



Full wwPDB NMR Structure Validation Report i

Jun 6, 2023 – 01:27 AM EDT

PDB ID : 2M1X
BMRB ID : 18883
Title : TICAM-1 TIR domain structure
Authors : Enokizono, Y.; Kumeta, H.; Funami, K.; Horiuchi, M.; Sarmiento, J.; Yamashita, K.; Standley, D.M.; Matsumoto, M.; Seya, T.; Inagaki, F.
Deposited on : 2012-12-07

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](#) ①) were used in the production of this report:

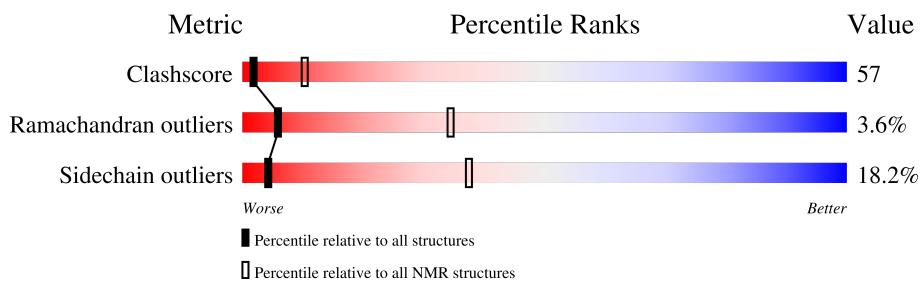
MolProbitiy : 4.02b-467
Percentile statistics : 20191225.v01 (using entries in the PDB archive December 25th 2019)
wwPDB-RCI : v_1n_11_5_13_A (Berjanski et al., 2005)
PANAV : Wang et al. (2010)
wwPDB-ShiftChecker : v1.2
BMRB Restraints Analysis : v1.2
Ideal geometry (proteins) : Engh & Huber (2001)
Ideal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

1 Overall quality at a glance

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

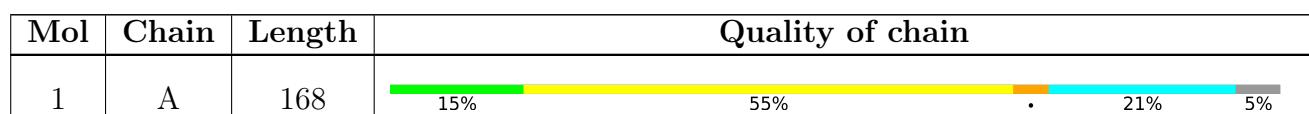
The overall completeness of chemical shifts assignment is 94%.

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%



2 Ensemble composition and analysis i

This entry contains 20 models. Model 10 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:395-A:427, A:443-A:533 (124)	0.60	10

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 3 clusters and 2 single-model clusters were found.

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

3 Entry composition [\(i\)](#)

There is only 1 type of molecule in this entry. The entry contains 2316 atoms, of which 1051 are hydrogens and 0 are deuteriums.

- Molecule 1 is a protein called TIR domain-containing adapter molecule 1.

Mol	Chain	Residues	Atoms						Trace
			Total	C	H	N	O	S	
1	A	160	2316	791	1051	229	237	8	0

There are 10 discrepancies between the modelled and reference sequences:

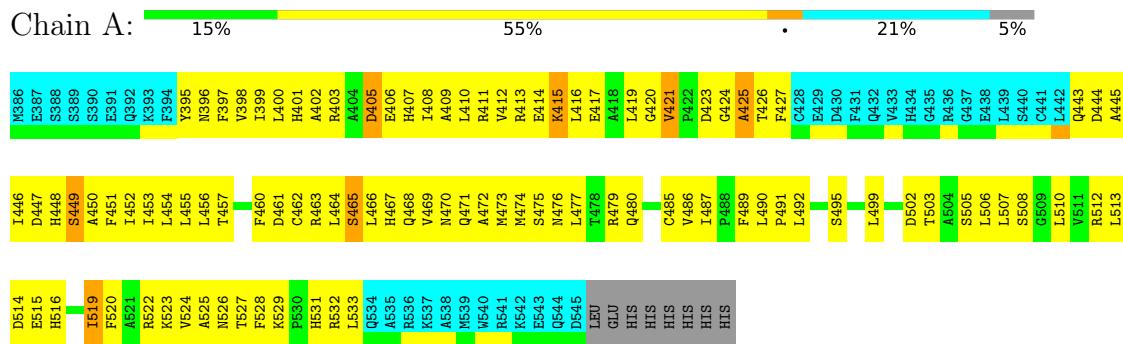
Chain	Residue	Modelled	Actual	Comment	Reference
A	386	MET	-	expression tag	UNP Q8IUC6
A	434	HIS	PRO	engineered mutation	UNP Q8IUC6
A	546	LEU	-	expression tag	UNP Q8IUC6
A	547	GLU	-	expression tag	UNP Q8IUC6
A	548	HIS	-	expression tag	UNP Q8IUC6
A	549	HIS	-	expression tag	UNP Q8IUC6
A	550	HIS	-	expression tag	UNP Q8IUC6
A	551	HIS	-	expression tag	UNP Q8IUC6
A	552	HIS	-	expression tag	UNP Q8IUC6
A	553	HIS	-	expression tag	UNP Q8IUC6

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: TIR domain-containing adapter molecule 1

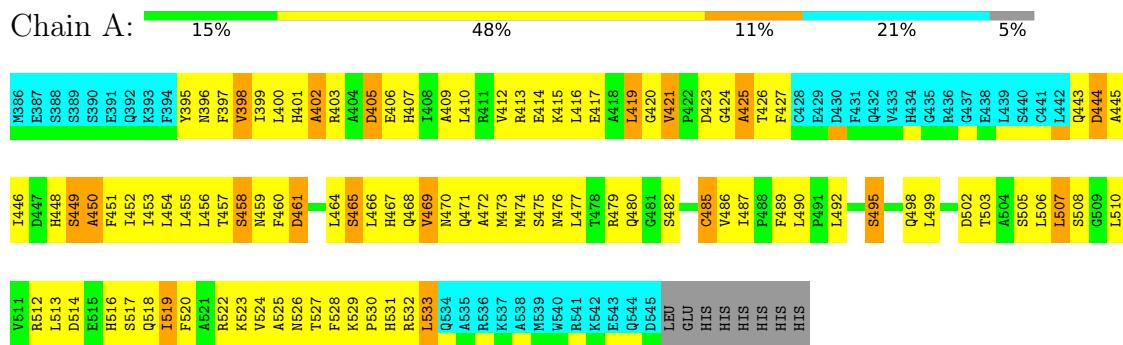


4.2 Scores per residue for each member of the ensemble

Colouring as in section 4.1 above.

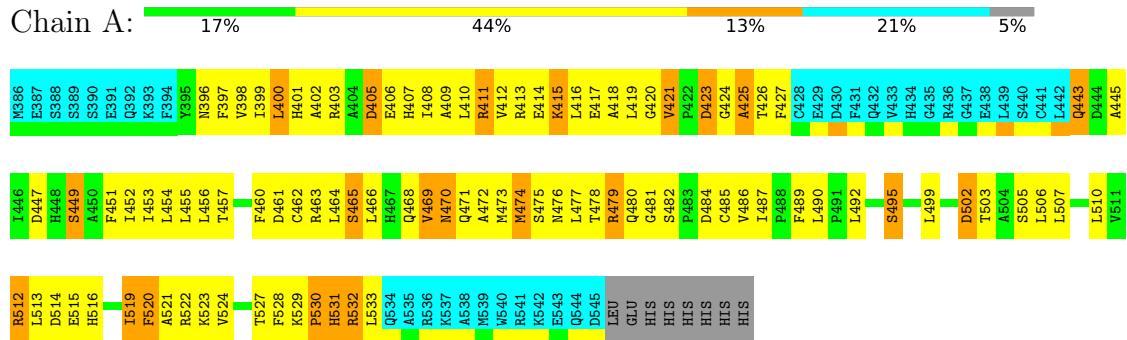
4.2.1 Score per residue for model 1

- Molecule 1: TIR domain-containing adapter molecule 1



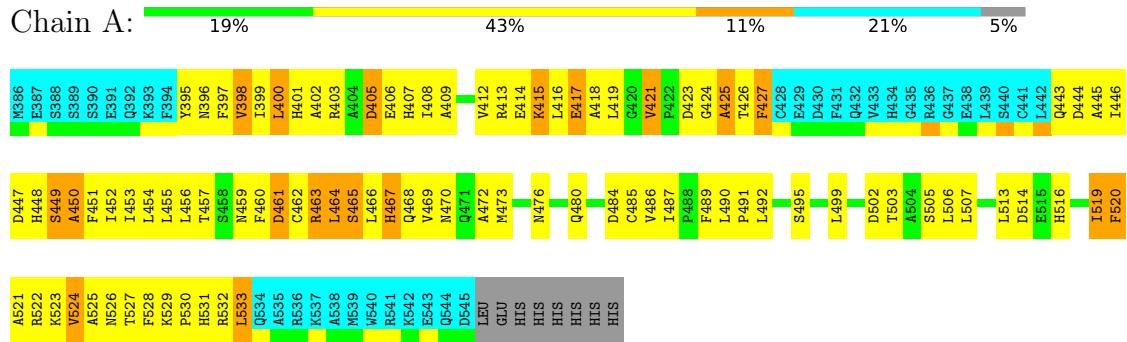
4.2.2 Score per residue for model 2

- Molecule 1: TIR domain-containing adapter molecule 1



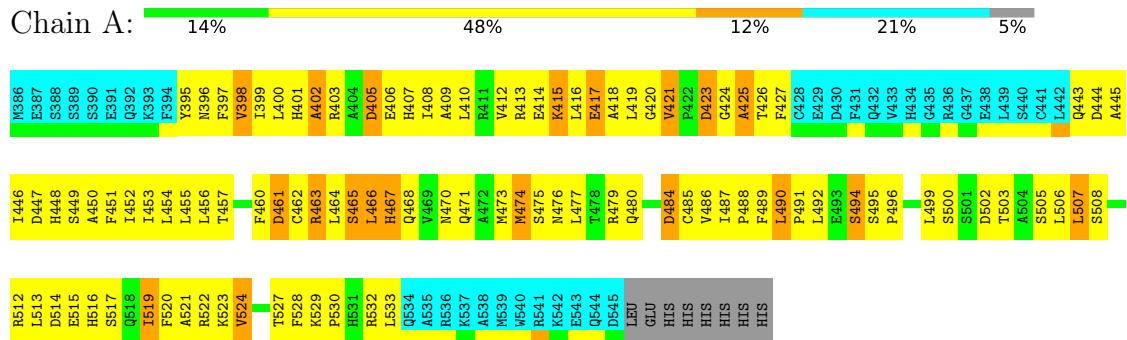
4.2.3 Score per residue for model 3

- Molecule 1: TIR domain-containing adapter molecule 1



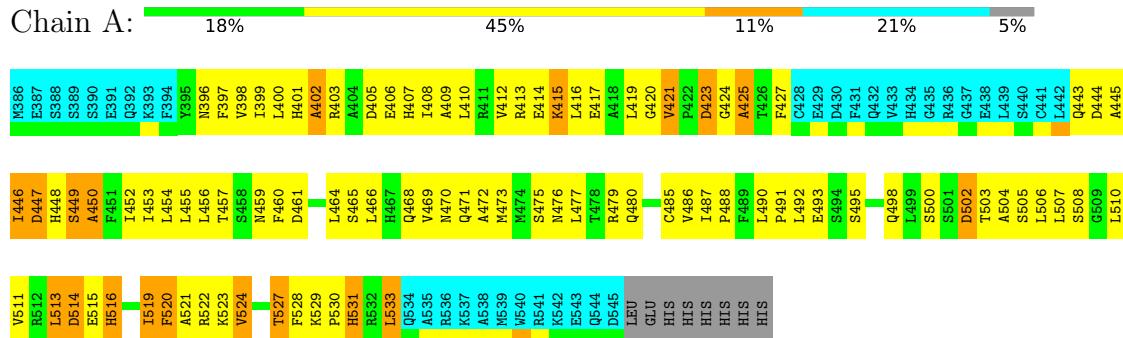
4.2.4 Score per residue for model 4

- Molecule 1: TIR domain-containing adapter molecule 1



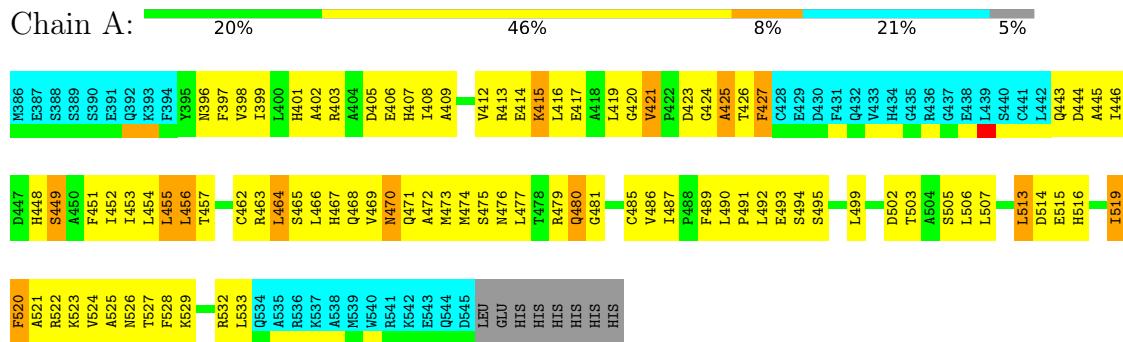
4.2.5 Score per residue for model 5

- Molecule 1: TIR domain-containing adapter molecule 1



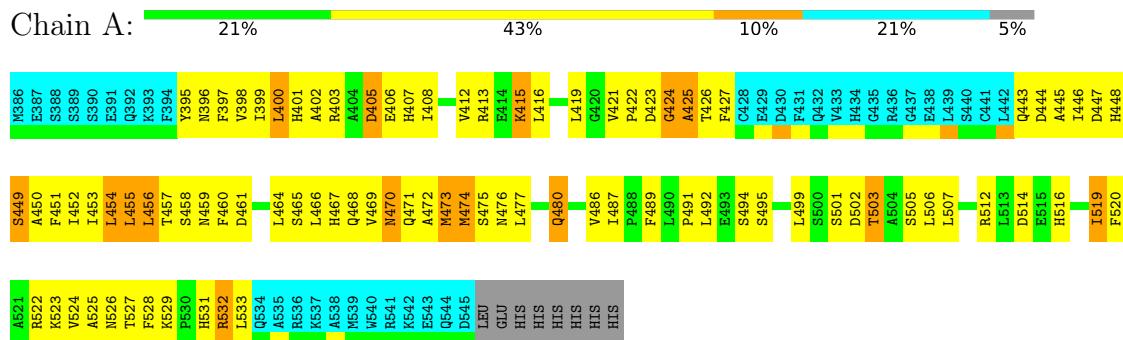
4.2.6 Score per residue for model 6

- Molecule 1: TIR domain-containing adapter molecule 1



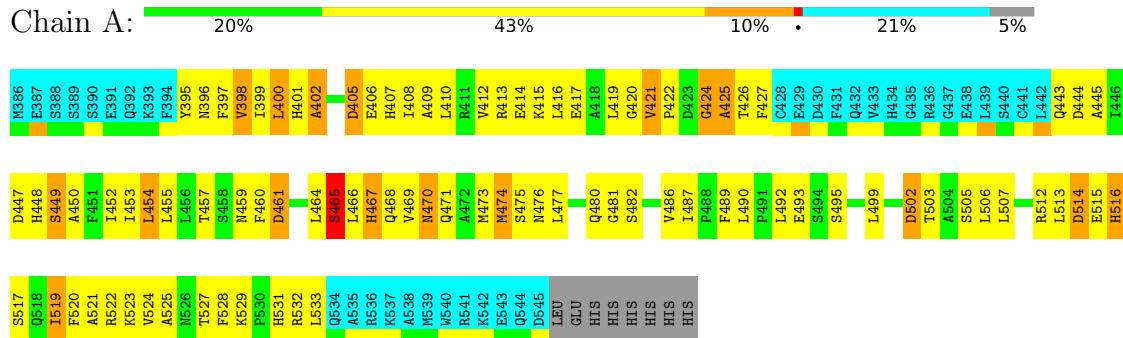
4.2.7 Score per residue for model 7

- Molecule 1: TIR domain-containing adapter molecule 1



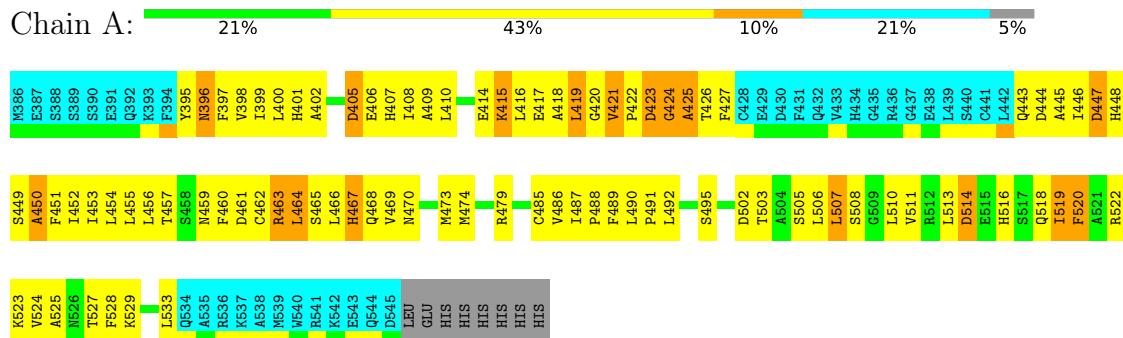
4.2.8 Score per residue for model 8

- Molecule 1: TIR domain-containing adapter molecule 1



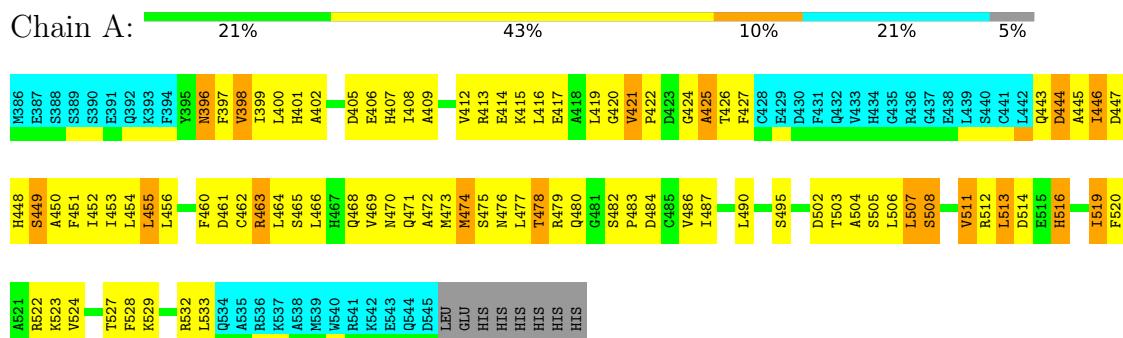
4.2.9 Score per residue for model 9

- Molecule 1: TIR domain-containing adapter molecule 1



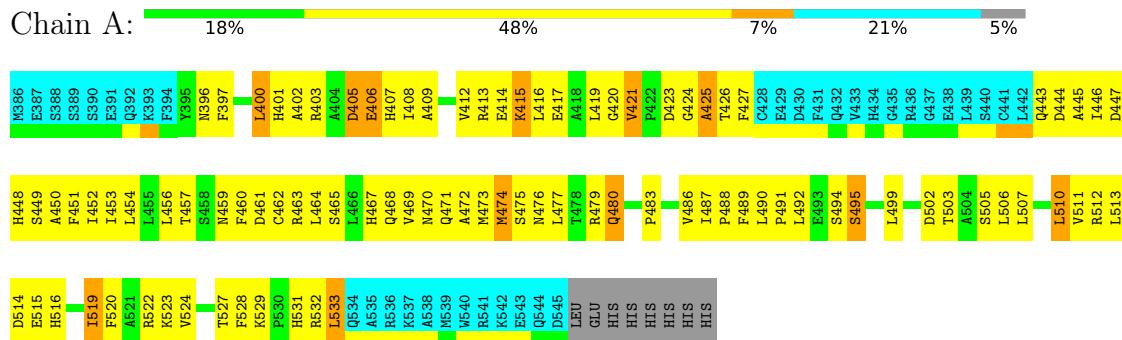
4.2.10 Score per residue for model 10 (medoid)

- Molecule 1: TIR domain-containing adapter molecule 1



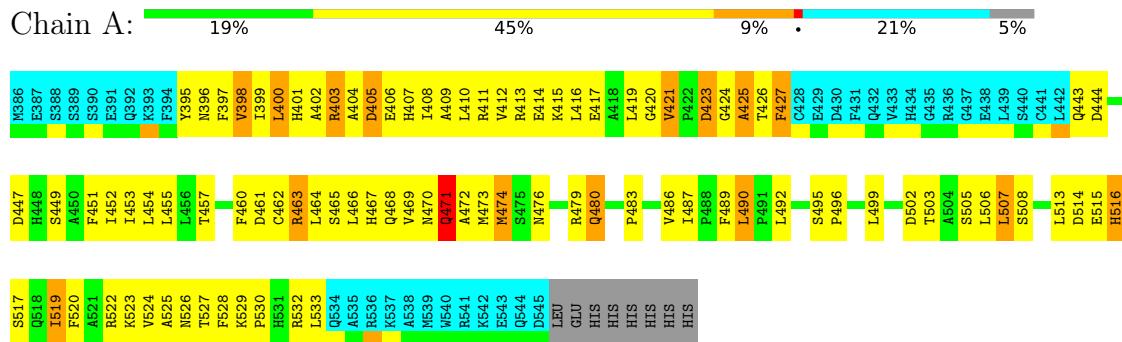
4.2.11 Score per residue for model 11

- Molecule 1: TIR domain-containing adapter molecule 1



4.2.12 Score per residue for model 12

- Molecule 1: TIR domain-containing adapter molecule 1



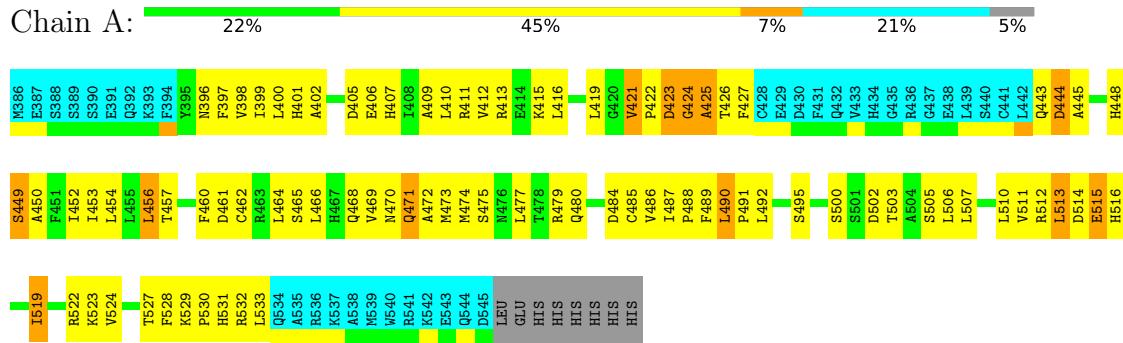
4.2.13 Score per residue for model 13

- Molecule 1: TIR domain-containing adapter molecule 1



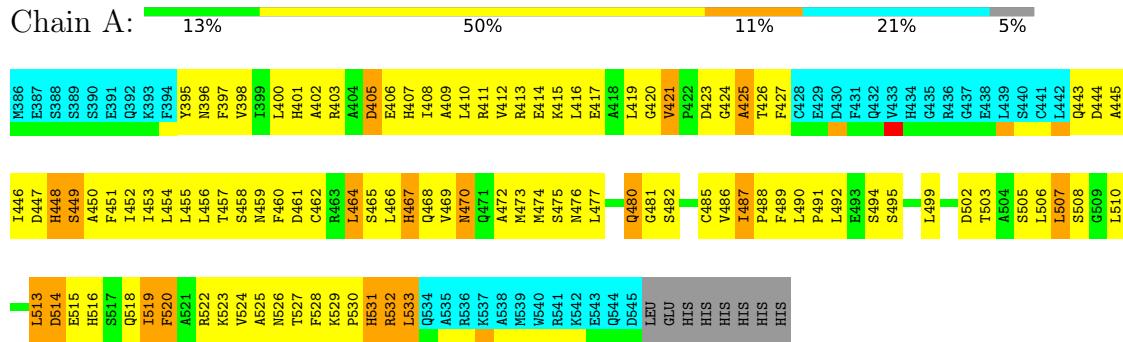
4.2.14 Score per residue for model 14

- Molecule 1: TIR domain-containing adapter molecule 1



4.2.15 Score per residue for model 15

- Molecule 1: TIR domain-containing adapter molecule 1



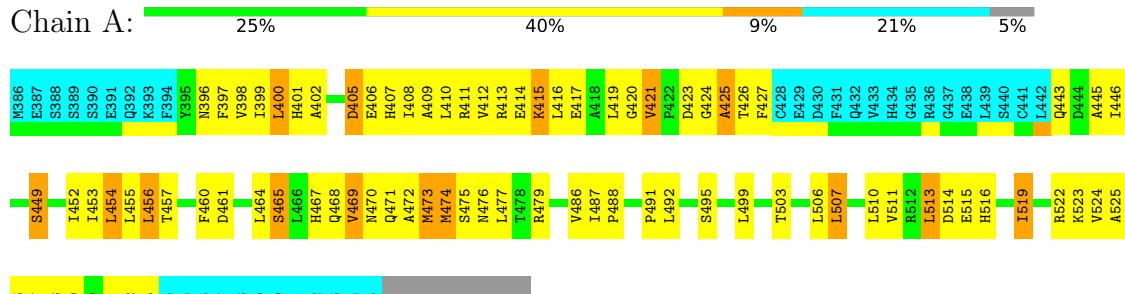
4.2.16 Score per residue for model 16

- Molecule 1: TIR domain-containing adapter molecule 1



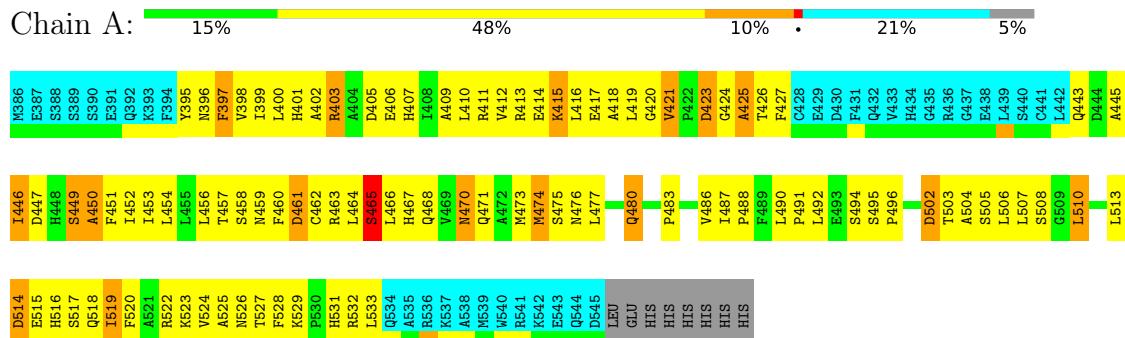
4.2.17 Score per residue for model 17

- Molecule 1: TIR domain-containing adapter molecule 1



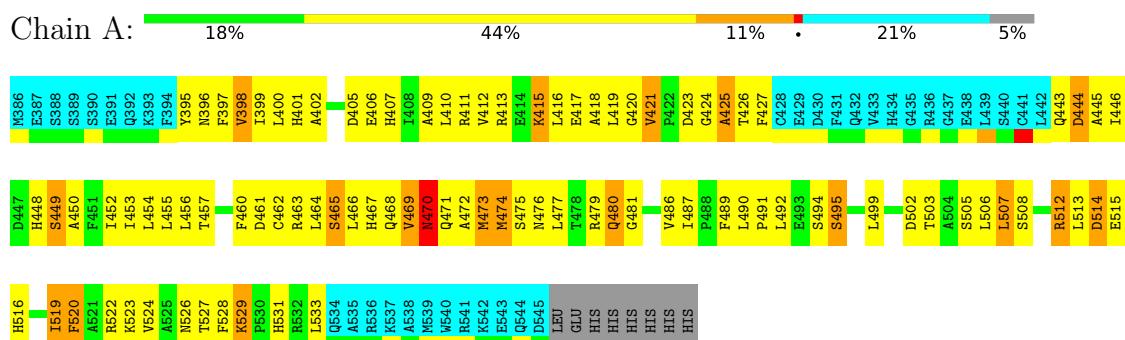
4.2.18 Score per residue for model 18

- Molecule 1: TIR domain-containing adapter molecule 1



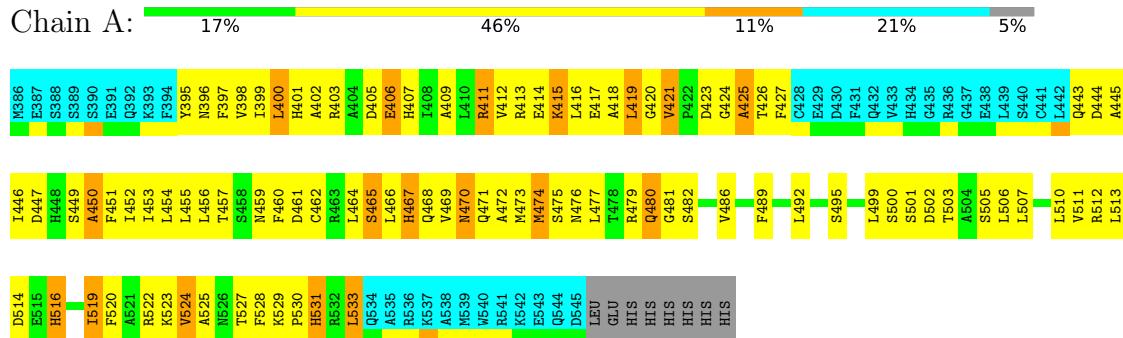
4.2.19 Score per residue for model 19

- Molecule 1: TIR domain-containing adapter molecule 1



4.2.20 Score per residue for model 20

- Molecule 1: TIR domain-containing adapter molecule 1



5 Refinement protocol and experimental data overview i

The models were refined using the following method: *torsion angle dynamics, simulated annealing*.

Of the 100 calculated structures, 20 were deposited, based on the following criterion: *target function*.

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

Software name	Classification	Version
Sparky	refinement	3.113
CYANA	structure solution	2.1
CYANA	geometry optimization	2.1
CYANA	refinement	2.1

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

Chemical shift file(s)	working_cs.cif
Number of chemical shift lists	1
Total number of shifts	2135
Number of shifts mapped to atoms	1848
Number of unparsed shifts	0
Number of shifts with mapping errors	287
Number of shifts with mapping warnings	0
Assignment completeness (well-defined parts)	94%

6 Model quality [\(i\)](#)

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

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

There are no bond-length outliers.

There are no bond-angle outliers.

There are no chirality outliers.

There are no planarity outliers.

6.2 Too-close contacts [\(i\)](#)

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

Mol	Chain	Non-H	H(model)	H(added)	Clashes
1	A	969	829	972	110±7
All	All	19380	16580	19440	2204

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 57.

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

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:469:VAL:HG11	1:A:486:VAL:HG22	1.07	1.22	17	2
1:A:397:PHE:CD2	1:A:453:ILE:HD12	0.99	1.92	13	15
1:A:419:LEU:HD13	1:A:524:VAL:HG11	0.95	1.37	19	19
1:A:446:ILE:HD11	1:A:469:VAL:HG23	0.94	1.39	16	4
1:A:486:VAL:O	1:A:487:ILE:HD13	0.92	1.66	4	14
1:A:492:LEU:HD21	1:A:515:GLU:CD	0.91	1.86	16	1
1:A:446:ILE:CD1	1:A:469:VAL:HG23	0.90	1.95	15	1
1:A:445:ALA:HB1	1:A:452:ILE:HD12	0.89	1.45	18	1
1:A:529:LYS:O	1:A:533:LEU:HD23	0.88	1.69	12	17
1:A:469:VAL:HG21	1:A:486:VAL:HG22	0.87	1.45	7	5
1:A:396:ASN:OD1	1:A:533:LEU:HD13	0.87	1.70	1	5
1:A:400:LEU:HD12	1:A:460:PHE:CZ	0.86	2.05	12	2
1:A:454:LEU:HD12	1:A:465:SER:CB	0.83	2.04	8	4
1:A:465:SER:O	1:A:469:VAL:HG23	0.83	1.73	12	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:398:VAL:HG12	1:A:452:ILE:HG23	0.83	1.50	1	14
1:A:400:LEU:HD22	1:A:460:PHE:CE1	0.81	2.10	7	2
1:A:400:LEU:HD12	1:A:460:PHE:CE1	0.80	2.11	12	2
1:A:398:VAL:CG1	1:A:452:ILE:HG23	0.80	2.07	14	13
1:A:397:PHE:CG	1:A:453:ILE:HD12	0.79	2.12	16	8
1:A:503:THR:HG22	1:A:507:LEU:CD2	0.79	2.08	1	2
1:A:469:VAL:CG1	1:A:486:VAL:HG22	0.79	2.07	17	1
1:A:397:PHE:CE2	1:A:416:LEU:HD13	0.79	2.13	16	6
1:A:416:LEU:HB3	1:A:421:VAL:HG13	0.78	1.56	13	20
1:A:503:THR:HG22	1:A:507:LEU:HD21	0.78	1.53	9	4
1:A:454:LEU:HD12	1:A:465:SER:HB2	0.77	1.56	8	3
1:A:454:LEU:HD12	1:A:465:SER:OG	0.77	1.78	5	2
1:A:419:LEU:HD22	1:A:521:ALA:HA	0.77	1.55	5	5
1:A:397:PHE:CE2	1:A:416:LEU:HD12	0.77	2.15	7	6
1:A:455:LEU:O	1:A:457:THR:HG23	0.76	1.79	17	9
1:A:400:LEU:HD23	1:A:427:PHE:O	0.75	1.80	16	2
1:A:396:ASN:CG	1:A:533:LEU:HD13	0.75	2.01	13	3
1:A:454:LEU:CD2	1:A:486:VAL:HG13	0.75	2.11	16	5
1:A:486:VAL:HB	1:A:510:LEU:HD13	0.74	1.57	20	3
1:A:405:ASP:OD1	1:A:457:THR:HG21	0.74	1.83	17	2
1:A:402:ALA:HB3	1:A:405:ASP:OD1	0.74	1.82	13	4
1:A:499:LEU:HD12	1:A:503:THR:HG21	0.73	1.59	3	6
1:A:405:ASP:CG	1:A:408:ILE:HD12	0.73	2.04	3	5
1:A:462:CYS:O	1:A:466:LEU:HD12	0.73	1.82	10	1
1:A:397:PHE:CD1	1:A:453:ILE:HD12	0.72	2.19	14	4
1:A:453:ILE:HD11	1:A:528:PHE:CE2	0.72	2.19	9	17
1:A:445:ALA:C	1:A:452:ILE:HD11	0.72	2.05	15	12
1:A:492:LEU:N	1:A:492:LEU:HD13	0.72	2.00	16	1
1:A:503:THR:O	1:A:507:LEU:HD13	0.72	1.84	12	5
1:A:397:PHE:CE1	1:A:421:VAL:CG2	0.71	2.73	12	14
1:A:397:PHE:CE2	1:A:416:LEU:CD1	0.71	2.74	18	17
1:A:446:ILE:HD11	1:A:469:VAL:CG2	0.71	2.15	16	3
1:A:466:LEU:C	1:A:466:LEU:HD13	0.71	2.06	4	3
1:A:454:LEU:HD23	1:A:486:VAL:HG13	0.71	1.61	12	2
1:A:492:LEU:HD11	1:A:515:GLU:CD	0.71	2.06	13	1
1:A:503:THR:HA	1:A:506:LEU:HD12	0.71	1.63	7	20
1:A:454:LEU:HD13	1:A:465:SER:OG	0.71	1.85	11	2
1:A:519:ILE:HD11	1:A:523:LYS:CD	0.70	2.16	5	20
1:A:400:LEU:HD13	1:A:427:PHE:CD2	0.70	2.20	18	1
1:A:398:VAL:CG2	1:A:427:PHE:CD1	0.70	2.75	14	3
1:A:400:LEU:HD13	1:A:427:PHE:O	0.70	1.85	19	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:487:ILE:CG2	1:A:513:LEU:HD22	0.70	2.16	12	16
1:A:400:LEU:C	1:A:400:LEU:HD12	0.70	2.07	11	1
1:A:507:LEU:HD12	1:A:507:LEU:O	0.69	1.86	2	9
1:A:401:HIS:CB	1:A:455:LEU:HD23	0.69	2.18	15	10
1:A:469:VAL:CG2	1:A:486:VAL:HG22	0.69	2.17	7	1
1:A:454:LEU:HD22	1:A:465:SER:HB2	0.69	1.64	19	2
1:A:397:PHE:CZ	1:A:416:LEU:HD12	0.69	2.23	4	13
1:A:454:LEU:HD22	1:A:454:LEU:N	0.69	2.03	8	4
1:A:486:VAL:HB	1:A:510:LEU:HD22	0.69	1.64	5	2
1:A:454:LEU:HD13	1:A:465:SER:HB3	0.69	1.62	2	2
1:A:466:LEU:HD22	1:A:470:ASN:ND2	0.69	2.03	13	3
1:A:412:VAL:HG21	1:A:489:PHE:CE1	0.68	2.23	11	8
1:A:402:ALA:HB2	1:A:459:ASN:O	0.68	1.88	7	10
1:A:396:ASN:OD1	1:A:533:LEU:HD12	0.68	1.89	17	5
1:A:419:LEU:HD11	1:A:520:PHE:CE2	0.68	2.23	5	1
1:A:454:LEU:HD22	1:A:465:SER:OG	0.68	1.88	2	1
1:A:473:MET:HE3	1:A:486:VAL:HG23	0.67	1.64	9	2
1:A:397:PHE:CZ	1:A:416:LEU:CD1	0.67	2.78	4	17
1:A:519:ILE:HD11	1:A:523:LYS:HD3	0.67	1.66	20	20
1:A:403:ARG:NE	1:A:404:ALA:HB2	0.67	2.04	12	1
1:A:396:ASN:ND2	1:A:533:LEU:HD12	0.67	2.05	6	2
1:A:499:LEU:HD13	1:A:503:THR:HG21	0.66	1.66	20	1
1:A:412:VAL:HG21	1:A:489:PHE:CE2	0.66	2.25	14	5
1:A:398:VAL:HB	1:A:445:ALA:HB1	0.66	1.66	8	2
1:A:415:LYS:O	1:A:418:ALA:HB3	0.66	1.91	9	7
1:A:454:LEU:N	1:A:454:LEU:HD23	0.66	2.05	10	2
1:A:399:ILE:HD12	1:A:426:THR:HG22	0.66	1.67	3	2
1:A:398:VAL:CG2	1:A:427:PHE:CG	0.66	2.79	9	3
1:A:424:GLY:O	1:A:425:ALA:HB2	0.65	1.91	15	20
1:A:531:HIS:CD2	1:A:532:ARG:CD	0.65	2.79	7	2
1:A:519:ILE:HD12	1:A:519:ILE:O	0.65	1.90	18	20
1:A:448:HIS:CD2	1:A:449:SER:N	0.65	2.65	3	1
1:A:454:LEU:HD13	1:A:465:SER:HB2	0.64	1.67	6	1
1:A:492:LEU:N	1:A:492:LEU:HD23	0.64	2.06	17	3
1:A:400:LEU:HD22	1:A:427:PHE:HB3	0.64	1.68	13	1
1:A:405:ASP:OD2	1:A:457:THR:HG21	0.64	1.92	4	1
1:A:486:VAL:C	1:A:487:ILE:HD13	0.64	2.12	12	5
1:A:400:LEU:HD13	1:A:465:SER:HB3	0.64	1.70	16	1
1:A:499:LEU:CD1	1:A:503:THR:HG21	0.64	2.22	8	10
1:A:503:THR:O	1:A:507:LEU:HD23	0.64	1.93	1	4
1:A:454:LEU:HD13	1:A:465:SER:CB	0.64	2.23	2	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:466:LEU:HD13	1:A:466:LEU:O	0.64	1.93	3	3
1:A:487:ILE:CG2	1:A:513:LEU:CD2	0.64	2.76	5	2
1:A:499:LEU:CB	1:A:503:THR:HG21	0.64	2.22	7	1
1:A:487:ILE:HG22	1:A:513:LEU:HD22	0.63	1.69	12	8
1:A:397:PHE:CD2	1:A:453:ILE:CD1	0.63	2.81	10	12
1:A:445:ALA:O	1:A:452:ILE:HD11	0.63	1.94	18	4
1:A:486:VAL:O	1:A:510:LEU:HD22	0.63	1.92	15	1
1:A:454:LEU:HD22	1:A:486:VAL:CG1	0.63	2.23	20	2
1:A:412:VAL:CG2	1:A:489:PHE:CE2	0.63	2.82	14	3
1:A:396:ASN:O	1:A:450:ALA:HB3	0.63	1.94	5	6
1:A:464:LEU:C	1:A:464:LEU:HD13	0.63	2.14	1	2
1:A:473:MET:CE	1:A:486:VAL:HG23	0.63	2.24	9	3
1:A:456:LEU:HD12	1:A:507:LEU:HD22	0.63	1.69	20	2
1:A:474:MET:HA	1:A:477:LEU:HD11	0.62	1.71	2	9
1:A:445:ALA:HB3	1:A:452:ILE:CD1	0.62	2.24	3	3
1:A:443:GLN:HG2	1:A:472:ALA:HB1	0.62	1.71	14	2
1:A:487:ILE:HG21	1:A:513:LEU:HD22	0.62	1.71	15	9
1:A:456:LEU:CD1	1:A:507:LEU:HD22	0.62	2.25	5	1
1:A:446:ILE:HD12	1:A:469:VAL:HG23	0.62	1.72	15	2
1:A:400:LEU:HD21	1:A:427:PHE:CD2	0.62	2.29	1	4
1:A:398:VAL:HG13	1:A:398:VAL:O	0.62	1.95	9	5
1:A:398:VAL:O	1:A:398:VAL:HG12	0.62	1.94	16	1
1:A:421:VAL:HG23	1:A:422:PRO:HD2	0.61	1.72	14	6
1:A:412:VAL:CG2	1:A:489:PHE:CE1	0.61	2.83	12	2
1:A:478:THR:HG23	1:A:479:ARG:CD	0.61	2.24	2	1
1:A:397:PHE:HD2	1:A:453:ILE:HD12	0.61	1.53	19	4
1:A:454:LEU:HD11	1:A:486:VAL:CG1	0.61	2.26	15	2
1:A:464:LEU:HD13	1:A:465:SER:N	0.61	2.11	8	3
1:A:492:LEU:HD12	1:A:492:LEU:N	0.61	2.11	20	13
1:A:451:PHE:CZ	1:A:527:THR:O	0.61	2.54	11	4
1:A:460:PHE:CZ	1:A:461:ASP:O	0.60	2.55	2	3
1:A:395:TYR:CD1	1:A:424:GLY:O	0.60	2.55	3	6
1:A:401:HIS:CE1	1:A:402:ALA:O	0.60	2.55	19	6
1:A:531:HIS:CE1	1:A:532:ARG:NE	0.60	2.70	11	1
1:A:460:PHE:CE2	1:A:461:ASP:O	0.60	2.55	1	11
1:A:489:PHE:CD2	1:A:513:LEU:HD23	0.60	2.32	11	2
1:A:463:ARG:O	1:A:467:HIS:CE1	0.60	2.54	18	1
1:A:490:LEU:HD12	1:A:490:LEU:C	0.60	2.17	4	1
1:A:492:LEU:HD23	1:A:516:HIS:ND1	0.59	2.12	13	1
1:A:460:PHE:CE2	1:A:465:SER:OG	0.59	2.54	17	1
1:A:395:TYR:CD1	1:A:395:TYR:N	0.59	2.69	19	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:400:LEU:O	1:A:460:PHE:CE2	0.59	2.56	8	1
1:A:398:VAL:HG22	1:A:427:PHE:HB2	0.59	1.74	2	3
1:A:453:ILE:HD11	1:A:528:PHE:CZ	0.59	2.33	5	12
1:A:503:THR:HG22	1:A:507:LEU:HD11	0.59	1.73	10	2
1:A:465:SER:O	1:A:469:VAL:HG12	0.59	1.97	20	2
1:A:447:ASP:OD1	1:A:448:HIS:CD2	0.59	2.55	8	1
1:A:447:ASP:OD2	1:A:448:HIS:CE1	0.59	2.56	4	1
1:A:398:VAL:HG13	1:A:427:PHE:CB	0.59	2.28	16	2
1:A:460:PHE:CZ	1:A:465:SER:OG	0.59	2.56	17	1
1:A:455:LEU:HD12	1:A:489:PHE:HB3	0.59	1.73	13	6
1:A:397:PHE:CZ	1:A:423:ASP:O	0.58	2.56	18	16
1:A:397:PHE:HE2	1:A:416:LEU:HD13	0.58	1.55	16	1
1:A:469:VAL:HG22	1:A:473:MET:CE	0.58	2.28	2	2
1:A:446:ILE:HD12	1:A:469:VAL:CG2	0.58	2.29	9	1
1:A:444:ASP:CG	1:A:448:HIS:CE1	0.58	2.76	14	1
1:A:486:VAL:CG1	1:A:510:LEU:HD13	0.58	2.28	5	2
1:A:397:PHE:HE2	1:A:399:ILE:HD11	0.58	1.58	19	10
1:A:445:ALA:HB1	1:A:449:SER:OG	0.58	1.98	20	2
1:A:473:MET:HE1	1:A:486:VAL:HG23	0.58	1.74	17	3
1:A:396:ASN:CG	1:A:533:LEU:HD11	0.58	2.19	11	1
1:A:451:PHE:CD2	1:A:485:CYS:SG	0.57	2.96	1	1
1:A:464:LEU:HD11	1:A:468:GLN:NE2	0.57	2.14	1	1
1:A:460:PHE:CG	1:A:461:ASP:N	0.57	2.72	2	18
1:A:416:LEU:HD22	1:A:524:VAL:HG21	0.57	1.76	13	3
1:A:492:LEU:HD22	1:A:516:HIS:ND1	0.57	2.14	6	3
1:A:471:GLN:HA	1:A:474:MET:HE2	0.57	1.76	2	4
1:A:397:PHE:CD1	1:A:397:PHE:O	0.57	2.57	9	2
1:A:487:ILE:CD1	1:A:527:THR:HG21	0.57	2.29	15	1
1:A:519:ILE:HD12	1:A:522:ARG:HB2	0.57	1.77	14	20
1:A:419:LEU:HD22	1:A:521:ALA:CA	0.57	2.29	5	2
1:A:514:ASP:O	1:A:520:PHE:CG	0.56	2.59	10	16
1:A:400:LEU:HD13	1:A:460:PHE:HZ	0.56	1.58	7	1
1:A:400:LEU:HD12	1:A:427:PHE:O	0.56	2.00	18	1
1:A:400:LEU:O	1:A:460:PHE:CZ	0.56	2.58	8	1
1:A:457:THR:HG22	1:A:491:PRO:CG	0.56	2.30	6	8
1:A:403:ARG:CZ	1:A:404:ALA:HB2	0.56	2.30	12	1
1:A:466:LEU:O	1:A:466:LEU:HD13	0.56	2.00	2	2
1:A:446:ILE:HA	1:A:452:ILE:HD11	0.56	1.78	19	2
1:A:397:PHE:CZ	1:A:416:LEU:HD13	0.56	2.36	5	5
1:A:476:ASN:ND2	1:A:480:GLN:HE22	0.56	1.98	1	3
1:A:469:VAL:HG22	1:A:473:MET:HE2	0.56	1.77	14	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:401:HIS:ND1	1:A:402:ALA:O	0.56	2.39	12	20
1:A:401:HIS:HB3	1:A:455:LEU:HD23	0.56	1.78	3	8
1:A:445:ALA:CB	1:A:452:ILE:CD1	0.56	2.84	3	6
1:A:446:ILE:HG22	1:A:480:GLN:NE2	0.55	2.16	4	1
1:A:444:ASP:O	1:A:448:HIS:CG	0.55	2.60	8	6
1:A:464:LEU:HD11	1:A:468:GLN:OE1	0.55	2.02	2	1
1:A:443:GLN:CG	1:A:472:ALA:HB1	0.55	2.31	11	1
1:A:448:HIS:CD2	1:A:448:HIS:C	0.55	2.79	13	1
1:A:492:LEU:HD11	1:A:515:GLU:HB3	0.55	1.78	16	2
1:A:529:LYS:CB	1:A:531:HIS:CE1	0.55	2.89	14	1
1:A:478:THR:HG23	1:A:479:ARG:HD3	0.55	1.79	2	1
1:A:456:LEU:HD22	1:A:462:CYS:SG	0.55	2.42	16	1
1:A:401:HIS:CD2	1:A:409:ALA:HB2	0.55	2.37	15	4
1:A:446:ILE:CG2	1:A:480:GLN:NE2	0.55	2.70	7	2
1:A:446:ILE:HD12	1:A:472:ALA:HB3	0.55	1.78	6	3
1:A:469:VAL:HG22	1:A:473:MET:HE1	0.55	1.79	2	1
1:A:473:MET:CE	1:A:486:VAL:CG2	0.54	2.84	19	6
1:A:467:HIS:CE1	1:A:471:GLN:OE1	0.54	2.60	19	1
1:A:401:HIS:CE1	1:A:405:ASP:C	0.54	2.80	15	7
1:A:462:CYS:SG	1:A:499:LEU:HD13	0.54	2.42	4	3
1:A:397:PHE:CG	1:A:453:ILE:CD1	0.54	2.90	16	2
1:A:412:VAL:HG22	1:A:489:PHE:CZ	0.54	2.37	12	1
1:A:397:PHE:CE2	1:A:399:ILE:HD11	0.54	2.37	17	4
1:A:447:ASP:OD1	1:A:448:HIS:CG	0.54	2.61	7	1
1:A:400:LEU:HD22	1:A:427:PHE:CB	0.54	2.32	13	2
1:A:398:VAL:CG1	1:A:398:VAL:O	0.54	2.56	9	8
1:A:455:LEU:O	1:A:460:PHE:CD2	0.54	2.61	1	2
1:A:444:ASP:CG	1:A:448:HIS:CD2	0.54	2.81	7	1
1:A:444:ASP:OD1	1:A:448:HIS:CE1	0.54	2.61	14	2
1:A:487:ILE:HG22	1:A:513:LEU:CD2	0.54	2.33	17	1
1:A:400:LEU:HD11	1:A:427:PHE:CD2	0.54	2.38	19	1
1:A:487:ILE:CG2	1:A:513:LEU:HD13	0.54	2.33	9	1
1:A:464:LEU:HD13	1:A:468:GLN:HG3	0.54	1.79	11	1
1:A:451:PHE:N	1:A:451:PHE:CD1	0.54	2.75	9	8
1:A:446:ILE:HG22	1:A:480:GLN:HE22	0.54	1.63	4	1
1:A:469:VAL:O	1:A:472:ALA:HB3	0.54	2.02	19	4
1:A:469:VAL:CG1	1:A:473:MET:HE3	0.54	2.33	12	1
1:A:492:LEU:HD21	1:A:515:GLU:OE1	0.54	2.01	16	1
1:A:419:LEU:CD1	1:A:520:PHE:CZ	0.54	2.91	5	1
1:A:398:VAL:O	1:A:398:VAL:CG1	0.53	2.56	8	6
1:A:396:ASN:ND2	1:A:533:LEU:CD1	0.53	2.71	6	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:446:ILE:HD12	1:A:472:ALA:CB	0.53	2.33	1	4
1:A:446:ILE:N	1:A:452:ILE:HD11	0.53	2.18	20	4
1:A:400:LEU:HD13	1:A:427:PHE:HD2	0.53	1.63	18	1
1:A:424:GLY:O	1:A:425:ALA:CB	0.53	2.57	13	19
1:A:464:LEU:HD11	1:A:468:GLN:CD	0.53	2.24	17	2
1:A:445:ALA:HB3	1:A:452:ILE:HD11	0.53	1.80	3	1
1:A:396:ASN:ND2	1:A:424:GLY:CA	0.53	2.71	16	1
1:A:446:ILE:CD1	1:A:472:ALA:HB3	0.53	2.33	5	2
1:A:453:ILE:C	1:A:454:LEU:HD23	0.53	2.24	10	1
1:A:443:GLN:CB	1:A:472:ALA:HB1	0.53	2.34	1	2
1:A:398:VAL:HG22	1:A:427:PHE:HB3	0.53	1.81	17	2
1:A:466:LEU:CD2	1:A:470:ASN:ND2	0.53	2.72	12	1
1:A:454:LEU:N	1:A:454:LEU:CD2	0.52	2.71	8	4
1:A:527:THR:CG2	1:A:528:PHE:N	0.52	2.72	5	19
1:A:456:LEU:HD11	1:A:488:PRO:HB2	0.52	1.81	4	3
1:A:476:ASN:OD1	1:A:479:ARG:CG	0.52	2.57	10	7
1:A:456:LEU:HD23	1:A:456:LEU:N	0.52	2.20	20	4
1:A:396:ASN:ND2	1:A:422:PRO:CD	0.51	2.73	8	1
1:A:450:ALA:HB1	1:A:451:PHE:CD1	0.51	2.40	9	1
1:A:466:LEU:HD13	1:A:470:ASN:ND2	0.51	2.20	19	2
1:A:489:PHE:HD2	1:A:513:LEU:HD23	0.51	1.62	11	2
1:A:416:LEU:HA	1:A:419:LEU:HD12	0.51	1.82	13	1
1:A:398:VAL:HG12	1:A:452:ILE:HD12	0.51	1.81	3	3
1:A:397:PHE:CD1	1:A:397:PHE:C	0.51	2.83	9	4
1:A:443:GLN:HG2	1:A:472:ALA:HB2	0.51	1.82	7	4
1:A:460:PHE:CE2	1:A:465:SER:HB2	0.51	2.41	10	1
1:A:398:VAL:CG2	1:A:427:PHE:CB	0.51	2.89	17	1
1:A:456:LEU:HD22	1:A:462:CYS:HB3	0.51	1.81	2	1
1:A:513:LEU:HD21	1:A:524:VAL:HG23	0.51	1.81	12	2
1:A:398:VAL:HG13	1:A:427:PHE:HB2	0.51	1.83	7	2
1:A:471:GLN:O	1:A:475:SER:CB	0.51	2.59	18	14
1:A:412:VAL:HG22	1:A:515:GLU:OE2	0.51	2.06	2	1
1:A:397:PHE:CE1	1:A:399:ILE:HG13	0.51	2.40	16	5
1:A:445:ALA:HA	1:A:448:HIS:CD2	0.51	2.40	13	2
1:A:456:LEU:HD12	1:A:507:LEU:CD2	0.51	2.35	20	1
1:A:454:LEU:N	1:A:454:LEU:CD1	0.51	2.73	1	2
1:A:469:VAL:CG1	1:A:470:ASN:N	0.51	2.74	2	7
1:A:473:MET:HE1	1:A:486:VAL:CG2	0.51	2.35	1	3
1:A:419:LEU:CD2	1:A:521:ALA:CB	0.51	2.88	2	1
1:A:454:LEU:CD1	1:A:486:VAL:CG1	0.51	2.88	15	2
1:A:454:LEU:HD12	1:A:465:SER:HB3	0.51	1.82	17	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:396:ASN:OD1	1:A:533:LEU:CD1	0.51	2.59	19	7
1:A:511:VAL:HG12	1:A:511:VAL:O	0.51	2.06	10	2
1:A:448:HIS:N	1:A:448:HIS:CD2	0.51	2.79	14	2
1:A:396:ASN:CG	1:A:533:LEU:CD1	0.50	2.79	14	2
1:A:444:ASP:OD2	1:A:448:HIS:CD2	0.50	2.64	7	1
1:A:487:ILE:HG23	1:A:511:VAL:O	0.50	2.06	17	1
1:A:445:ALA:O	1:A:449:SER:CB	0.50	2.59	5	9
1:A:444:ASP:O	1:A:448:HIS:CB	0.50	2.59	19	5
1:A:511:VAL:HG13	1:A:523:LYS:HE2	0.50	1.82	9	4
1:A:489:PHE:CD2	1:A:513:LEU:HB3	0.50	2.42	13	1
1:A:397:PHE:CE1	1:A:424:GLY:HA3	0.50	2.41	6	15
1:A:464:LEU:CD1	1:A:468:GLN:OE1	0.50	2.59	17	2
1:A:398:VAL:O	1:A:398:VAL:HG13	0.50	2.05	14	4
1:A:398:VAL:HG13	1:A:400:LEU:HD23	0.50	1.83	3	1
1:A:398:VAL:HG21	1:A:427:PHE:CG	0.50	2.39	9	1
1:A:503:THR:O	1:A:507:LEU:CD2	0.50	2.60	4	4
1:A:514:ASP:O	1:A:520:PHE:CD1	0.50	2.65	12	2
1:A:490:LEU:HD21	1:A:496:PRO:HD3	0.50	1.83	4	2
1:A:514:ASP:O	1:A:520:PHE:CB	0.50	2.60	15	3
1:A:446:ILE:O	1:A:446:ILE:CG2	0.50	2.60	18	2
1:A:406:GLU:HG3	1:A:410:LEU:HD13	0.50	1.83	14	4
1:A:473:MET:O	1:A:477:LEU:CD2	0.50	2.60	15	10
1:A:416:LEU:O	1:A:419:LEU:N	0.50	2.45	5	11
1:A:425:ALA:C	1:A:426:THR:CG2	0.50	2.80	9	19
1:A:514:ASP:O	1:A:520:PHE:CD2	0.50	2.65	5	4
1:A:452:ILE:HG22	1:A:454:LEU:CD1	0.49	2.37	1	1
1:A:400:LEU:HD21	1:A:468:GLN:OE1	0.49	2.07	2	1
1:A:443:GLN:O	1:A:446:ILE:HG22	0.49	2.07	19	2
1:A:464:LEU:HD13	1:A:464:LEU:C	0.49	2.28	8	2
1:A:478:THR:O	1:A:479:ARG:CZ	0.49	2.59	10	1
1:A:398:VAL:HG22	1:A:427:PHE:CB	0.49	2.36	17	1
1:A:486:VAL:HG12	1:A:510:LEU:HD13	0.49	1.83	9	2
1:A:401:HIS:CE1	1:A:405:ASP:O	0.49	2.65	15	2
1:A:445:ALA:CB	1:A:449:SER:OG	0.49	2.60	20	2
1:A:412:VAL:O	1:A:413:ARG:C	0.49	2.50	13	19
1:A:454:LEU:HD11	1:A:486:VAL:HG13	0.49	1.85	10	1
1:A:476:ASN:ND2	1:A:480:GLN:NE2	0.49	2.60	12	2
1:A:412:VAL:HG22	1:A:489:PHE:CE1	0.49	2.42	12	1
1:A:451:PHE:CD1	1:A:485:CYS:HB2	0.49	2.43	13	1
1:A:446:ILE:HG21	1:A:472:ALA:HB1	0.49	1.84	15	1
1:A:507:LEU:C	1:A:507:LEU:CD2	0.49	2.80	15	5

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:462:CYS:SG	1:A:503:THR:HG23	0.49	2.47	11	1
1:A:469:VAL:HG13	1:A:470:ASN:N	0.49	2.23	5	5
1:A:400:LEU:HD13	1:A:460:PHE:CZ	0.49	2.41	7	1
1:A:490:LEU:HD11	1:A:496:PRO:HD3	0.49	1.85	12	1
1:A:451:PHE:CD1	1:A:528:PHE:CD1	0.49	3.00	7	2
1:A:448:HIS:CG	1:A:449:SER:N	0.49	2.80	3	1
1:A:531:HIS:CE1	1:A:532:ARG:HD3	0.49	2.43	3	1
1:A:396:ASN:N	1:A:396:ASN:ND2	0.49	2.60	10	1
1:A:513:LEU:HG	1:A:520:PHE:CE1	0.49	2.43	11	2
1:A:529:LYS:HB3	1:A:531:HIS:CE1	0.49	2.42	7	5
1:A:473:MET:HE3	1:A:486:VAL:HG22	0.49	1.84	20	2
1:A:446:ILE:HD13	1:A:472:ALA:HB3	0.49	1.82	5	1
1:A:457:THR:HG22	1:A:491:PRO:CD	0.49	2.38	9	6
1:A:396:ASN:OD1	1:A:422:PRO:CG	0.49	2.61	14	1
1:A:489:PHE:HD1	1:A:513:LEU:HD23	0.48	1.68	1	1
1:A:460:PHE:CZ	1:A:465:SER:HB3	0.48	2.43	5	2
1:A:503:THR:CA	1:A:506:LEU:HD12	0.48	2.35	5	4
1:A:527:THR:HG23	1:A:528:PHE:CD2	0.48	2.43	16	4
1:A:397:PHE:CB	1:A:451:PHE:O	0.48	2.61	13	1
1:A:447:ASP:CB	1:A:480:GLN:OE1	0.48	2.60	5	1
1:A:527:THR:HG23	1:A:528:PHE:N	0.48	2.23	17	16
1:A:503:THR:O	1:A:507:LEU:CD1	0.48	2.60	16	4
1:A:504:ALA:O	1:A:508:SER:CA	0.48	2.62	16	2
1:A:402:ALA:CB	1:A:459:ASN:O	0.48	2.60	11	3
1:A:460:PHE:CE2	1:A:465:SER:HB3	0.48	2.43	7	3
1:A:466:LEU:C	1:A:466:LEU:CD1	0.48	2.80	3	3
1:A:531:HIS:ND1	1:A:532:ARG:CD	0.48	2.77	3	2
1:A:492:LEU:HD11	1:A:515:GLU:OE1	0.48	2.08	13	1
1:A:406:GLU:CG	1:A:410:LEU:HD13	0.48	2.38	17	2
1:A:531:HIS:NE2	1:A:532:ARG:NE	0.48	2.61	1	1
1:A:533:LEU:N	1:A:533:LEU:HD23	0.48	2.23	9	1
1:A:396:ASN:ND2	1:A:533:LEU:HD13	0.48	2.23	14	1
1:A:469:VAL:HG11	1:A:486:VAL:CG2	0.48	2.15	17	1
1:A:410:LEU:HD23	1:A:410:LEU:N	0.48	2.23	1	6
1:A:468:GLN:O	1:A:472:ALA:HB2	0.48	2.08	2	1
1:A:400:LEU:CD2	1:A:427:PHE:O	0.48	2.61	17	1
1:A:397:PHE:CE2	1:A:424:GLY:HA3	0.48	2.44	14	2
1:A:469:VAL:CG2	1:A:470:ASN:N	0.48	2.77	10	1
1:A:513:LEU:CD1	1:A:523:LYS:CB	0.48	2.92	18	1
1:A:407:HIS:O	1:A:411:ARG:CB	0.48	2.62	17	4
1:A:529:LYS:HD3	1:A:531:HIS:CE1	0.48	2.43	19	4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:396:ASN:ND2	1:A:450:ALA:HB3	0.48	2.24	11	1
1:A:397:PHE:CD1	1:A:397:PHE:N	0.47	2.81	4	6
1:A:402:ALA:HB3	1:A:405:ASP:CG	0.47	2.29	8	3
1:A:502:ASP:O	1:A:505:SER:N	0.47	2.47	16	19
1:A:402:ALA:CB	1:A:405:ASP:OD1	0.47	2.60	13	2
1:A:456:LEU:HD13	1:A:462:CYS:SG	0.47	2.49	19	1
1:A:489:PHE:CD1	1:A:513:LEU:HD23	0.47	2.44	1	1
1:A:405:ASP:OD2	1:A:408:ILE:HD12	0.47	2.09	17	2
1:A:451:PHE:HB2	1:A:528:PHE:CE1	0.47	2.44	6	9
1:A:512:ARG:CZ	1:A:514:ASP:OD1	0.47	2.62	2	1
1:A:405:ASP:OD1	1:A:457:THR:CG2	0.47	2.60	17	1
1:A:492:LEU:N	1:A:492:LEU:CD1	0.47	2.77	9	13
1:A:467:HIS:CE1	1:A:471:GLN:HG3	0.47	2.44	8	1
1:A:397:PHE:HB3	1:A:528:PHE:CE1	0.47	2.45	10	2
1:A:398:VAL:CG1	1:A:427:PHE:CB	0.47	2.93	18	2
1:A:415:LYS:HZ3	1:A:415:LYS:HB3	0.47	1.68	19	1
1:A:406:GLU:O	1:A:409:ALA:N	0.47	2.48	14	16
1:A:450:ALA:HB1	1:A:451:PHE:CE1	0.47	2.44	7	2
1:A:492:LEU:HD21	1:A:515:GLU:OE2	0.47	2.10	16	1
1:A:531:HIS:CD2	1:A:532:ARG:HG2	0.47	2.44	18	1
1:A:490:LEU:HD21	1:A:495:SER:CA	0.47	2.40	2	4
1:A:409:ALA:O	1:A:412:VAL:N	0.47	2.48	12	9
1:A:473:MET:CE	1:A:485:CYS:SG	0.47	3.03	14	8
1:A:456:LEU:HB3	1:A:499:LEU:HD11	0.47	1.87	4	2
1:A:513:LEU:HD11	1:A:523:LYS:HB2	0.47	1.87	18	1
1:A:499:LEU:HB3	1:A:503:THR:HG21	0.47	1.84	7	1
1:A:531:HIS:NE2	1:A:532:ARG:CD	0.47	2.77	17	2
1:A:454:LEU:HD21	1:A:486:VAL:HG13	0.47	1.87	18	2
1:A:397:PHE:N	1:A:449:SER:OG	0.47	2.48	19	7
1:A:446:ILE:CG1	1:A:485:CYS:SG	0.47	3.03	5	1
1:A:463:ARG:HH21	1:A:502:ASP:CG	0.47	2.13	9	1
1:A:469:VAL:HG22	1:A:473:MET:HE3	0.47	1.86	13	3
1:A:519:ILE:O	1:A:522:ARG:N	0.47	2.48	1	20
1:A:514:ASP:HB3	1:A:516:HIS:CD2	0.47	2.45	17	3
1:A:492:LEU:HD21	1:A:515:GLU:HB2	0.46	1.87	14	2
1:A:486:VAL:O	1:A:487:ILE:CD1	0.46	2.60	8	2
1:A:401:HIS:CE1	1:A:406:GLU:HA	0.46	2.45	5	14
1:A:515:GLU:CG	1:A:515:GLU:O	0.46	2.63	12	4
1:A:414:GLU:O	1:A:417:GLU:N	0.46	2.49	1	8
1:A:445:ALA:CB	1:A:452:ILE:HD11	0.46	2.41	3	1
1:A:406:GLU:O	1:A:408:ILE:N	0.46	2.49	12	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:397:PHE:CE1	1:A:421:VAL:HG23	0.46	2.46	19	3
1:A:412:VAL:HG22	1:A:489:PHE:CE2	0.46	2.46	1	1
1:A:462:CYS:O	1:A:464:LEU:N	0.46	2.48	10	10
1:A:415:LYS:O	1:A:418:ALA:CB	0.46	2.61	9	4
1:A:397:PHE:CD1	1:A:399:ILE:HG13	0.46	2.45	16	5
1:A:469:VAL:HG12	1:A:473:MET:HE3	0.46	1.87	12	1
1:A:407:HIS:O	1:A:411:ARG:N	0.46	2.49	14	3
1:A:490:LEU:N	1:A:513:LEU:O	0.46	2.48	16	7
1:A:520:PHE:CD1	1:A:520:PHE:O	0.46	2.69	6	3
1:A:531:HIS:CD2	1:A:532:ARG:HD2	0.46	2.44	17	2
1:A:474:MET:HA	1:A:477:LEU:HD21	0.46	1.86	8	2
1:A:524:VAL:CG1	1:A:525:ALA:N	0.46	2.79	20	6
1:A:529:LYS:O	1:A:533:LEU:CD2	0.46	2.64	4	6
1:A:413:ARG:HA	1:A:416:LEU:HD12	0.46	1.87	16	1
1:A:400:LEU:O	1:A:455:LEU:CB	0.46	2.63	1	2
1:A:464:LEU:O	1:A:467:HIS:N	0.46	2.49	19	12
1:A:462:CYS:O	1:A:466:LEU:CD1	0.46	2.62	10	1
1:A:443:GLN:CG	1:A:443:GLN:O	0.46	2.63	20	1
1:A:416:LEU:O	1:A:418:ALA:N	0.46	2.49	4	6
1:A:463:ARG:O	1:A:467:HIS:CB	0.46	2.64	16	3
1:A:446:ILE:O	1:A:446:ILE:HG23	0.46	2.11	18	1
1:A:443:GLN:CB	1:A:472:ALA:CB	0.46	2.94	6	2
1:A:522:ARG:O	1:A:526:ASN:ND2	0.46	2.49	19	9
1:A:473:MET:HE3	1:A:485:CYS:SG	0.46	2.51	2	1
1:A:400:LEU:HB3	1:A:460:PHE:CZ	0.46	2.46	19	5
1:A:446:ILE:O	1:A:480:GLN:NE2	0.46	2.49	3	2
1:A:419:LEU:HD11	1:A:520:PHE:CZ	0.46	2.46	5	1
1:A:401:HIS:HB2	1:A:455:LEU:HD23	0.46	1.87	12	2
1:A:456:LEU:O	1:A:490:LEU:CD2	0.46	2.63	13	1
1:A:456:LEU:HD11	1:A:488:PRO:CB	0.46	2.41	14	3
1:A:465:SER:O	1:A:468:GLN:N	0.45	2.50	5	9
1:A:454:LEU:CD1	1:A:465:SER:OG	0.45	2.62	11	2
1:A:503:THR:CG2	1:A:507:LEU:HD11	0.45	2.41	10	1
1:A:405:ASP:OD1	1:A:405:ASP:N	0.45	2.49	1	1
1:A:444:ASP:O	1:A:448:HIS:N	0.45	2.49	8	2
1:A:464:LEU:O	1:A:468:GLN:N	0.45	2.49	2	5
1:A:397:PHE:CA	1:A:449:SER:OG	0.45	2.64	7	1
1:A:412:VAL:CG2	1:A:489:PHE:CZ	0.45	2.99	7	2
1:A:412:VAL:HG12	1:A:416:LEU:CD1	0.45	2.41	17	1
1:A:476:ASN:O	1:A:480:GLN:NE2	0.45	2.50	1	8
1:A:503:THR:O	1:A:506:LEU:N	0.45	2.49	17	4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:405:ASP:N	1:A:405:ASP:OD1	0.45	2.49	15	1
1:A:487:ILE:CG2	1:A:511:VAL:O	0.45	2.64	17	1
1:A:470:ASN:O	1:A:473:MET:N	0.45	2.49	8	7
1:A:400:LEU:CD2	1:A:468:GLN:OE1	0.45	2.64	2	1
1:A:398:VAL:HG21	1:A:427:PHE:CD2	0.45	2.46	9	2
1:A:451:PHE:CD1	1:A:451:PHE:N	0.45	2.83	6	2
1:A:454:LEU:O	1:A:456:LEU:N	0.45	2.50	7	3
1:A:507:LEU:CD2	1:A:512:ARG:NH1	0.45	2.80	8	1
1:A:444:ASP:O	1:A:448:HIS:NE2	0.45	2.49	9	1
1:A:446:ILE:HD11	1:A:485:CYS:SG	0.45	2.51	9	1
1:A:476:ASN:OD1	1:A:480:GLN:NE2	0.45	2.50	13	1
1:A:504:ALA:O	1:A:508:SER:CB	0.45	2.65	16	1
1:A:472:ALA:O	1:A:476:ASN:N	0.45	2.50	19	1
1:A:476:ASN:ND2	1:A:480:GLN:OE1	0.45	2.50	16	4
1:A:473:MET:CE	1:A:483:PRO:HA	0.45	2.42	18	5
1:A:406:GLU:HG2	1:A:410:LEU:HD13	0.45	1.88	17	1
1:A:514:ASP:OD2	1:A:516:HIS:CD2	0.45	2.70	20	1
1:A:419:LEU:CD2	1:A:521:ALA:HB1	0.45	2.41	2	1
1:A:416:LEU:C	1:A:418:ALA:N	0.45	2.70	13	6
1:A:427:PHE:CD1	1:A:427:PHE:C	0.45	2.88	3	4
1:A:454:LEU:O	1:A:489:PHE:N	0.45	2.50	4	4
1:A:463:ARG:O	1:A:467:HIS:N	0.45	2.50	4	1
1:A:473:MET:HE2	1:A:485:CYS:SG	0.45	2.51	14	2
1:A:464:LEU:O	1:A:466:LEU:N	0.45	2.49	8	3
1:A:469:VAL:HG22	1:A:473:MET:SD	0.45	2.51	11	1
1:A:444:ASP:OD1	1:A:448:HIS:ND1	0.45	2.50	14	1
1:A:492:LEU:HD22	1:A:492:LEU:H	0.45	1.72	16	1
1:A:396:ASN:O	1:A:450:ALA:N	0.45	2.49	20	2
1:A:400:LEU:HD12	1:A:401:HIS:N	0.45	2.27	2	1
1:A:445:ALA:O	1:A:449:SER:N	0.45	2.50	9	5
1:A:444:ASP:O	1:A:448:HIS:ND1	0.45	2.50	3	1
1:A:445:ALA:HA	1:A:448:HIS:CE1	0.45	2.46	3	1
1:A:520:PHE:CD1	1:A:520:PHE:C	0.45	2.89	13	3
1:A:480:GLN:NE2	1:A:481:GLY:H	0.45	2.10	8	2
1:A:447:ASP:OD1	1:A:448:HIS:N	0.45	2.50	9	2
1:A:464:LEU:CD1	1:A:468:GLN:CD	0.45	2.85	17	3
1:A:444:ASP:OD1	1:A:445:ALA:N	0.45	2.50	11	1
1:A:466:LEU:O	1:A:470:ASN:ND2	0.45	2.50	16	8
1:A:471:GLN:O	1:A:475:SER:N	0.45	2.49	19	4
1:A:444:ASP:CG	1:A:448:HIS:NE2	0.45	2.70	15	1
1:A:396:ASN:O	1:A:396:ASN:ND2	0.45	2.49	20	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:452:ILE:O	1:A:487:ILE:N	0.45	2.50	1	1
1:A:398:VAL:CG1	1:A:452:ILE:HD12	0.45	2.41	3	2
1:A:405:ASP:OD2	1:A:405:ASP:N	0.45	2.49	8	1
1:A:464:LEU:C	1:A:466:LEU:N	0.45	2.70	20	3
1:A:507:LEU:HD21	1:A:512:ARG:NH1	0.45	2.27	8	1
1:A:415:LYS:NZ	1:A:515:GLU:OE1	0.45	2.50	17	2
1:A:406:GLU:O	1:A:407:HIS:C	0.45	2.55	11	16
1:A:419:LEU:CD1	1:A:524:VAL:HG11	0.45	2.42	8	8
1:A:406:GLU:C	1:A:408:ILE:N	0.45	2.70	4	3
1:A:407:HIS:CE1	1:A:408:ILE:HG13	0.45	2.47	9	5
1:A:465:SER:OG	1:A:466:LEU:N	0.45	2.50	7	3
1:A:473:MET:O	1:A:476:ASN:N	0.45	2.50	7	2
1:A:469:VAL:HG23	1:A:470:ASN:N	0.45	2.27	10	1
1:A:480:GLN:OE1	1:A:481:GLY:N	0.45	2.50	15	3
1:A:469:VAL:O	1:A:472:ALA:N	0.44	2.50	3	1
1:A:514:ASP:OD2	1:A:516:HIS:NE2	0.44	2.50	12	5
1:A:447:ASP:CG	1:A:448:HIS:N	0.44	2.71	10	1
1:A:470:ASN:O	1:A:472:ALA:N	0.44	2.50	12	1
1:A:399:ILE:O	1:A:427:PHE:N	0.44	2.50	19	1
1:A:512:ARG:NH2	1:A:514:ASP:OD2	0.44	2.50	2	2
1:A:462:CYS:C	1:A:464:LEU:N	0.44	2.70	10	9
1:A:490:LEU:HD22	1:A:491:PRO:HD2	0.44	1.89	11	1
1:A:466:LEU:HD21	1:A:470:ASN:ND2	0.44	2.27	12	1
1:A:466:LEU:CD1	1:A:506:LEU:O	0.44	2.66	14	1
1:A:399:ILE:CG2	1:A:455:LEU:HD22	0.44	2.43	16	1
1:A:507:LEU:HB2	1:A:510:LEU:HD12	0.44	1.89	18	1
1:A:400:LEU:HG	1:A:460:PHE:CZ	0.44	2.47	2	2
1:A:447:ASP:O	1:A:479:ARG:NH1	0.44	2.50	9	1
1:A:512:ARG:NH2	1:A:514:ASP:OD1	0.44	2.51	11	2
1:A:462:CYS:O	1:A:465:SER:N	0.44	2.51	14	1
1:A:464:LEU:HA	1:A:467:HIS:CD2	0.44	2.48	18	1
1:A:465:SER:O	1:A:469:VAL:CG1	0.44	2.66	20	1
1:A:419:LEU:HD22	1:A:521:ALA:CB	0.44	2.43	8	2
1:A:514:ASP:OD1	1:A:516:HIS:NE2	0.44	2.50	5	2
1:A:464:LEU:CD1	1:A:465:SER:N	0.44	2.81	8	1
1:A:467:HIS:CE1	1:A:471:GLN:HB3	0.44	2.48	12	1
1:A:511:VAL:HG12	1:A:513:LEU:CD1	0.44	2.41	14	1
1:A:525:ALA:O	1:A:529:LYS:CG	0.44	2.66	3	8
1:A:454:LEU:HD22	1:A:486:VAL:HG12	0.44	1.90	20	1
1:A:490:LEU:HD21	1:A:495:SER:HA	0.44	1.89	2	3
1:A:518:GLN:O	1:A:522:ARG:NH1	0.44	2.51	18	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:461:ASP:OD1	1:A:464:LEU:CB	0.44	2.66	4	1
1:A:465:SER:O	1:A:469:VAL:HG13	0.44	2.13	10	1
1:A:397:PHE:CZ	1:A:424:GLY:HA3	0.44	2.48	14	1
1:A:507:LEU:C	1:A:507:LEU:HD22	0.44	2.32	19	3
1:A:416:LEU:HD22	1:A:421:VAL:HG11	0.44	1.90	20	1
1:A:479:ARG:CD	1:A:479:ARG:N	0.44	2.81	2	1
1:A:476:ASN:O	1:A:476:ASN:CG	0.44	2.54	13	1
1:A:443:GLN:NE2	1:A:475:SER:OG	0.44	2.50	15	1
1:A:400:LEU:CD1	1:A:427:PHE:CD2	0.44	2.99	18	1
1:A:447:ASP:OD1	1:A:448:HIS:ND1	0.43	2.51	7	1
1:A:468:GLN:C	1:A:470:ASN:N	0.43	2.71	18	3
1:A:471:GLN:HA	1:A:474:MET:CE	0.43	2.43	18	4
1:A:446:ILE:CD1	1:A:472:ALA:CB	0.43	2.95	3	1
1:A:400:LEU:HD22	1:A:427:PHE:HB2	0.43	1.89	4	1
1:A:464:LEU:O	1:A:465:SER:C	0.43	2.56	17	8
1:A:400:LEU:HD12	1:A:465:SER:OG	0.43	2.13	10	1
1:A:456:LEU:HD11	1:A:488:PRO:HB3	0.43	1.89	11	1
1:A:401:HIS:C	1:A:460:PHE:CD1	0.43	2.91	3	1
1:A:461:ASP:N	1:A:461:ASP:OD2	0.43	2.51	4	1
1:A:499:LEU:N	1:A:499:LEU:HD23	0.43	2.28	15	2
1:A:396:ASN:N	1:A:396:ASN:OD1	0.43	2.50	9	1
1:A:500:SER:OG	1:A:501:SER:N	0.43	2.51	13	2
1:A:398:VAL:HG21	1:A:427:PHE:CD1	0.43	2.46	14	1
1:A:416:LEU:O	1:A:417:GLU:C	0.43	2.57	3	7
1:A:444:ASP:OD2	1:A:448:HIS:NE2	0.43	2.51	7	1
1:A:398:VAL:HG12	1:A:452:ILE:CD1	0.43	2.43	9	1
1:A:469:VAL:O	1:A:473:MET:CG	0.43	2.67	11	1
1:A:454:LEU:CD2	1:A:486:VAL:CG1	0.43	2.97	20	1
1:A:461:ASP:N	1:A:461:ASP:OD1	0.43	2.51	3	1
1:A:397:PHE:HZ	1:A:416:LEU:HD12	0.43	1.72	13	1
1:A:422:PRO:HD3	1:A:533:LEU:HD12	0.43	1.91	14	1
1:A:398:VAL:CG2	1:A:427:PHE:HB2	0.43	2.43	17	1
1:A:473:MET:HE1	1:A:486:VAL:HG22	0.43	1.91	2	1
1:A:453:ILE:CD1	1:A:528:PHE:CZ	0.43	3.01	4	2
1:A:466:LEU:O	1:A:469:VAL:N	0.43	2.52	12	1
1:A:447:ASP:OD2	1:A:448:HIS:ND1	0.43	2.51	4	1
1:A:446:ILE:CA	1:A:452:ILE:HD11	0.43	2.44	19	2
1:A:401:HIS:CD2	1:A:409:ALA:CB	0.43	3.02	15	3
1:A:512:ARG:NE	1:A:514:ASP:OD1	0.43	2.51	7	2
1:A:492:LEU:CD1	1:A:515:GLU:HB3	0.43	2.44	18	4
1:A:466:LEU:HD13	1:A:470:ASN:CG	0.43	2.34	7	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:470:ASN:C	1:A:472:ALA:N	0.43	2.71	12	3
1:A:466:LEU:CD1	1:A:470:ASN:ND2	0.43	2.82	18	1
1:A:419:LEU:CD2	1:A:521:ALA:HA	0.42	2.44	2	1
1:A:531:HIS:CD2	1:A:531:HIS:C	0.42	2.91	18	1
1:A:468:GLN:O	1:A:470:ASN:N	0.42	2.52	14	3
1:A:512:ARG:CZ	1:A:514:ASP:OD2	0.42	2.67	19	1
1:A:524:VAL:O	1:A:528:PHE:N	0.42	2.52	20	4
1:A:400:LEU:HD21	1:A:427:PHE:HD2	0.42	1.74	15	1
1:A:400:LEU:HD12	1:A:400:LEU:C	0.42	2.35	2	1
1:A:414:GLU:O	1:A:415:LYS:C	0.42	2.57	4	9
1:A:470:ASN:O	1:A:471:GLN:C	0.42	2.58	17	3
1:A:453:ILE:C	1:A:454:LEU:HD22	0.42	2.34	8	1
1:A:463:ARG:NH2	1:A:502:ASP:CG	0.42	2.73	9	1
1:A:460:PHE:CZ	1:A:465:SER:HB2	0.42	2.49	10	1
1:A:467:HIS:O	1:A:467:HIS:ND1	0.42	2.53	11	1
1:A:445:ALA:HB3	1:A:452:ILE:HD12	0.42	1.89	17	1
1:A:462:CYS:O	1:A:463:ARG:C	0.42	2.58	10	6
1:A:398:VAL:HG21	1:A:427:PHE:CE1	0.42	2.49	14	1
1:A:469:VAL:HG21	1:A:486:VAL:CG2	0.42	2.41	15	1
1:A:445:ALA:HB1	1:A:452:ILE:CD1	0.42	2.30	18	1
1:A:443:GLN:HB2	1:A:472:ALA:HB1	0.42	1.89	20	1
1:A:515:GLU:O	1:A:515:GLU:CG	0.42	2.67	19	2
1:A:531:HIS:CD2	1:A:532:ARG:NE	0.42	2.88	7	1
1:A:466:LEU:O	1:A:466:LEU:HD22	0.42	2.14	4	1
1:A:398:VAL:CG2	1:A:427:PHE:CE1	0.42	3.02	14	1
1:A:443:GLN:O	1:A:447:ASP:CB	0.42	2.68	18	1
1:A:454:LEU:HB3	1:A:456:LEU:HD21	0.42	1.90	20	1
1:A:492:LEU:CD2	1:A:515:GLU:OE1	0.42	2.68	16	1
1:A:416:LEU:C	1:A:421:VAL:O	0.42	2.58	14	3
1:A:411:ARG:C	1:A:411:ARG:CD	0.42	2.88	2	1
1:A:420:GLY:O	1:A:421:VAL:C	0.42	2.58	5	9
1:A:457:THR:HG22	1:A:491:PRO:HG2	0.42	1.92	6	1
1:A:398:VAL:HG22	1:A:427:PHE:CG	0.42	2.47	9	1
1:A:466:LEU:C	1:A:468:GLN:N	0.42	2.72	10	1
1:A:464:LEU:CD2	1:A:468:GLN:HG3	0.42	2.45	12	1
1:A:458:SER:OG	1:A:498:GLN:CB	0.42	2.68	1	1
1:A:444:ASP:OD2	1:A:448:HIS:ND1	0.42	2.53	3	1
1:A:395:TYR:CE1	1:A:425:ALA:HB2	0.42	2.49	8	1
1:A:454:LEU:HD11	1:A:486:VAL:HG11	0.42	1.92	15	1
1:A:398:VAL:CG2	1:A:427:PHE:HB3	0.42	2.45	17	1
1:A:476:ASN:OD1	1:A:476:ASN:C	0.41	2.57	10	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:402:ALA:O	1:A:405:ASP:N	0.41	2.52	13	1
1:A:408:ILE:O	1:A:411:ARG:CB	0.41	2.68	13	1
1:A:451:PHE:HB2	1:A:528:PHE:CZ	0.41	2.50	2	3
1:A:446:ILE:HD13	1:A:472:ALA:CB	0.41	2.44	5	1
1:A:502:ASP:C	1:A:504:ALA:N	0.41	2.73	18	2
1:A:471:GLN:O	1:A:474:MET:CE	0.41	2.68	12	1
1:A:472:ALA:O	1:A:476:ASN:OD1	0.41	2.38	13	1
1:A:480:GLN:O	1:A:481:GLY:C	0.41	2.59	2	3
1:A:452:ILE:N	1:A:485:CYS:O	0.41	2.53	4	1
1:A:468:GLN:O	1:A:469:VAL:C	0.41	2.59	19	7
1:A:451:PHE:CD1	1:A:485:CYS:HA	0.41	2.50	3	1
1:A:405:ASP:HB3	1:A:408:ILE:HD12	0.41	1.90	15	1
1:A:492:LEU:CD2	1:A:515:GLU:HB3	0.41	2.46	17	1
1:A:412:VAL:HG22	1:A:515:GLU:CD	0.41	2.36	2	1
1:A:408:ILE:CD1	1:A:493:GLU:CB	0.41	2.99	5	2
1:A:456:LEU:CD1	1:A:488:PRO:HB2	0.41	2.45	5	3
1:A:408:ILE:HD13	1:A:493:GLU:CB	0.41	2.45	6	1
1:A:455:LEU:O	1:A:457:THR:N	0.41	2.53	7	1
1:A:395:TYR:CZ	1:A:425:ALA:CB	0.41	3.03	8	1
1:A:473:MET:HE3	1:A:486:VAL:CG2	0.41	2.46	19	1
1:A:444:ASP:O	1:A:447:ASP:OD2	0.41	2.39	9	1
1:A:404:ALA:C	1:A:405:ASP:OD2	0.41	2.58	13	1
1:A:401:HIS:HA	1:A:460:PHE:CG	0.41	2.50	14	1
1:A:457:THR:HA	1:A:494:SER:CB	0.41	2.46	6	2
1:A:400:LEU:HD11	1:A:468:GLN:OE1	0.41	2.16	7	1
1:A:502:ASP:O	1:A:506:LEU:N	0.41	2.54	15	1
1:A:400:LEU:HD13	1:A:465:SER:CB	0.41	2.43	16	1
1:A:454:LEU:CD1	1:A:465:SER:HB2	0.41	2.46	4	1
1:A:467:HIS:O	1:A:471:GLN:CG	0.41	2.69	4	1
1:A:484:ASP:OD1	1:A:484:ASP:N	0.41	2.53	4	1
1:A:415:LYS:O	1:A:416:LEU:C	0.41	2.58	5	1
1:A:492:LEU:HD22	1:A:516:HIS:CG	0.41	2.51	6	1
1:A:457:THR:CG2	1:A:491:PRO:CG	0.41	2.99	7	1
1:A:456:LEU:N	1:A:456:LEU:HD23	0.41	2.31	11	1
1:A:510:LEU:N	1:A:510:LEU:HD23	0.41	2.31	11	1
1:A:409:ALA:C	1:A:411:ARG:N	0.41	2.74	12	1
1:A:398:VAL:HG13	1:A:427:PHE:HB3	0.41	1.93	16	1
1:A:412:VAL:CG1	1:A:416:LEU:HD11	0.41	2.45	17	1
1:A:445:ALA:CB	1:A:452:ILE:HD12	0.41	2.46	17	1
1:A:457:THR:O	1:A:460:PHE:O	0.41	2.39	17	1
1:A:410:LEU:HD22	1:A:413:ARG:CZ	0.41	2.46	18	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:456:LEU:HD22	1:A:462:CYS:CB	0.41	2.46	2	1
1:A:399:ILE:C	1:A:400:LEU:HD23	0.41	2.36	10	1
1:A:400:LEU:HD23	1:A:427:PHE:HB3	0.41	1.93	14	1
1:A:401:HIS:HB3	1:A:455:LEU:CD2	0.41	2.46	15	1
1:A:513:LEU:C	1:A:514:ASP:OD2	0.41	2.60	16	1
1:A:513:LEU:CD1	1:A:523:LYS:HB2	0.41	2.46	18	1
1:A:413:ARG:HD3	1:A:426:THR:CG2	0.41	2.46	19	1
1:A:445:ALA:O	1:A:449:SER:O	0.40	2.40	14	3
1:A:522:ARG:O	1:A:526:ASN:CG	0.40	2.60	13	3
1:A:396:ASN:ND2	1:A:533:LEU:HD11	0.40	2.32	11	1
1:A:400:LEU:HD11	1:A:460:PHE:CE1	0.40	2.51	11	1
1:A:464:LEU:HD22	1:A:468:GLN:HG3	0.40	1.92	12	1
1:A:472:ALA:O	1:A:475:SER:CB	0.40	2.68	14	1
1:A:443:GLN:NE2	1:A:472:ALA:O	0.40	2.54	20	1
1:A:480:GLN:NE2	1:A:480:GLN:H	0.40	2.14	1	1
1:A:411:ARG:CD	1:A:515:GLU:OE2	0.40	2.70	2	1
1:A:474:MET:C	1:A:474:MET:SD	0.40	3.00	2	2
1:A:450:ALA:CB	1:A:533:LEU:HD13	0.40	2.46	4	1
1:A:473:MET:SD	1:A:482:SER:O	0.40	2.80	8	1
1:A:399:ILE:HG12	1:A:453:ILE:HG21	0.40	1.91	9	1
1:A:471:GLN:HA	1:A:474:MET:HE3	0.40	1.94	10	1
1:A:531:HIS:CE1	1:A:532:ARG:CZ	0.40	3.04	11	1
1:A:464:LEU:HD13	1:A:468:GLN:OE1	0.40	2.16	15	1
1:A:487:ILE:HG22	1:A:513:LEU:HB2	0.40	1.92	3	1
1:A:412:VAL:O	1:A:415:LYS:N	0.40	2.54	7	1
1:A:444:ASP:O	1:A:447:ASP:OD1	0.40	2.39	7	1
1:A:443:GLN:O	1:A:447:ASP:N	0.40	2.53	11	1
1:A:471:GLN:HG3	1:A:472:ALA:N	0.40	2.32	14	1
1:A:492:LEU:CD2	1:A:515:GLU:HB2	0.40	2.46	14	1
1:A:469:VAL:O	1:A:470:ASN:C	0.40	2.60	17	2
1:A:515:GLU:O	1:A:515:GLU:OE1	0.40	2.40	18	1
1:A:507:LEU:HD11	1:A:512:ARG:HD3	0.40	1.93	4	1
1:A:443:GLN:NE2	1:A:475:SER:CB	0.40	2.85	11	1
1:A:457:THR:HB	1:A:494:SER:CB	0.40	2.46	11	1
1:A:532:ARG:O	1:A:533:LEU:C	0.40	2.60	14	1
1:A:398:VAL:CG1	1:A:427:PHE:HB2	0.40	2.47	15	1
1:A:444:ASP:OD1	1:A:448:HIS:NE2	0.40	2.54	15	1
1:A:463:ARG:NH2	1:A:502:ASP:OD1	0.40	2.54	16	1
1:A:443:GLN:O	1:A:447:ASP:CG	0.40	2.59	18	1
1:A:474:MET:SD	1:A:474:MET:C	0.40	3.00	18	2
1:A:476:ASN:O	1:A:476:ASN:OD1	0.40	2.39	3	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:488:PRO:HG3	1:A:510:LEU:HD12	0.40	1.94	5	1
1:A:528:PHE:O	1:A:529:LYS:O	0.40	2.40	5	1
1:A:412:VAL:CG2	1:A:515:GLU:OE2	0.40	2.69	6	1
1:A:425:ALA:O	1:A:426:THR:HG22	0.40	2.17	9	1
1:A:410:LEU:N	1:A:410:LEU:HD23	0.40	2.31	16	1
1:A:453:ILE:C	1:A:454:LEU:HD13	0.40	2.36	16	1
1:A:449:SER:O	1:A:450:ALA:C	0.40	2.58	18	1
1:A:491:PRO:O	1:A:494:SER:O	0.40	2.40	19	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	124/168 (74%)	96±3 (77±3%)	24±3 (19±3%)	4±1 (4±1%)	6 34
All	All	2480/3360 (74%)	1914 (77%)	477 (19%)	89 (4%)	6 34

All 22 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	425	ALA	20
1	A	450	ALA	8
1	A	463	ARG	8
1	A	420	GLY	6
1	A	417	GLU	5
1	A	456	LEU	5
1	A	402	ALA	4
1	A	530	PRO	4
1	A	455	LEU	4
1	A	424	GLY	4
1	A	510	LEU	4
1	A	473	MET	3
1	A	465	SER	3
1	A	470	ASN	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	406	GLU	2
1	A	511	VAL	1
1	A	471	GLN	1
1	A	500	SER	1
1	A	469	VAL	1
1	A	397	PHE	1
1	A	508	SER	1
1	A	512	ARG	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	108/148 (73%)	88±4 (82±3%)	20±4 (18±3%)	4 37
All	All	2160/2960 (73%)	1767 (82%)	393 (18%)	4 37

All 62 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	415	LYS	20
1	A	495	SER	20
1	A	519	ILE	20
1	A	405	ASP	19
1	A	421	VAL	18
1	A	474	MET	17
1	A	516	HIS	17
1	A	449	SER	16
1	A	403	ARG	12
1	A	465	SER	10
1	A	480	GLN	10
1	A	507	LEU	9
1	A	508	SER	9
1	A	400	LEU	9
1	A	423	ASP	9
1	A	447	ASP	8
1	A	520	PHE	8

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	398	VAL	7
1	A	479	ARG	7
1	A	513	LEU	7
1	A	514	ASP	7
1	A	470	ASN	7
1	A	461	ASP	6
1	A	533	LEU	6
1	A	484	ASP	6
1	A	467	HIS	6
1	A	458	SER	5
1	A	482	SER	5
1	A	517	SER	5
1	A	464	LEU	5
1	A	490	LEU	5
1	A	444	ASP	4
1	A	502	ASP	4
1	A	531	HIS	4
1	A	524	VAL	4
1	A	494	SER	4
1	A	454	LEU	4
1	A	419	LEU	3
1	A	469	VAL	3
1	A	443	GLN	3
1	A	512	ARG	3
1	A	532	ARG	3
1	A	427	PHE	3
1	A	500	SER	3
1	A	446	ILE	3
1	A	396	ASN	3
1	A	471	GLN	3
1	A	515	GLU	3
1	A	411	ARG	2
1	A	463	ARG	2
1	A	466	LEU	2
1	A	503	THR	2
1	A	518	GLN	2
1	A	448	HIS	2
1	A	492	LEU	2
1	A	485	CYS	1
1	A	498	GLN	1
1	A	527	THR	1
1	A	501	SER	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	478	THR	1
1	A	487	ILE	1
1	A	529	LYS	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 [\(i\)](#)

There are no ligands in this entry.

6.7 Other polymers [\(i\)](#)

There are no such molecules in this entry.

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

There are no chain breaks in this entry.

7 Chemical shift validation i

The completeness of assignment taking into account all chemical shift lists is 94% for the well-defined parts and 93% for the entire structure.

7.1 Chemical shift list 1

File name: working_cs.cif

Chemical shift list name: *assigned_chem_shift_list_1*

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	2135
Number of shifts mapped to atoms	1848
Number of unparsed shifts	0
Number of shifts with mapping errors	287
Number of shifts with mapping warnings	0
Number of shift outliers (ShiftChecker)	1

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

- No matching atom found in the structure. All 287 occurrences are reported below.

List ID	Chain	Res	Type	Atom	Shift Data		
					Value	Uncertainty	Ambiguity
1	A	386	MET	HB2	2.169	.	.
1	A	386	MET	HG2	2.604	.	.
1	A	387	GLU	HB2	1.969	.	.
1	A	387	GLU	HG2	2.313	.	.
1	A	388	SER	HB2	3.869	.	.
1	A	389	SER	HB2	3.895	.	.
1	A	390	SER	HB2	3.871	.	.
1	A	391	GLU	HB2	1.953	.	.
1	A	391	GLU	HG2	2.26	.	.
1	A	392	GLN	HB2	1.989	.	.
1	A	392	GLN	HG2	2.277	.	.
1	A	393	LYS	HB2	1.294	.	.
1	A	393	LYS	HG2	0.978	.	.
1	A	393	LYS	HD2	1.504	.	.

Continued on next page...

Continued from previous page...

List ID	Chain	Res	Type	Atom	Shift Data		
					Value	Uncertainty	Ambiguity
1	A	393	LYS	HE2	2.775	.	.
1	A	394	PHE	HB2	1.586	.	.
1	A	395	TYR	HB2	2.839	.	.
1	A	396	ASN	HB2	2.581	.	.
1	A	397	PHE	HB2	2.687	.	.
1	A	399	ILE	HG12	0.751	.	.
1	A	400	LEU	HB2	1.791	.	.
1	A	401	HIS	HB2	2.715	.	.
1	A	403	ARG	HB2	1.877	.	.
1	A	403	ARG	HD2	3.075	.	.
1	A	403	ARG	HG2	1.629	.	.
1	A	405	ASP	HB2	2.773	.	.
1	A	406	GLU	HB2	2.146	.	.
1	A	406	GLU	HG2	2.056	.	.
1	A	407	HIS	HB2	3.234	.	.
1	A	408	ILE	HG12	0.751	.	.
1	A	410	LEU	HB2	1.503	.	.
1	A	411	ARG	HB2	1.72	.	.
1	A	411	ARG	HD2	2.892	.	.
1	A	411	ARG	HG2	1.568	.	.
1	A	413	ARG	HB2	1.813	.	.
1	A	413	ARG	HD2	2.861	.	.
1	A	413	ARG	HG2	1.502	.	.
1	A	414	GLU	HB2	2.068	.	.
1	A	414	GLU	HG2	2.273	.	.
1	A	415	LYS	HB2	1.88	.	.
1	A	415	LYS	HE2	2.932	.	.
1	A	415	LYS	HD2	1.777	.	.
1	A	415	LYS	HG2	1.543	.	.
1	A	416	LEU	HB2	0.696	.	.
1	A	417	GLU	HB2	2.031	.	.
1	A	417	GLU	HG2	2.787	.	.
1	A	419	LEU	HB2	1.776	.	.
1	A	422	PRO	HB2	1.887	.	.
1	A	422	PRO	HD2	3.516	.	.
1	A	422	PRO	HG2	1.731	.	.
1	A	423	ASP	HB2	2.794	.	.
1	A	427	PHE	HB2	2.477	.	.
1	A	428	CYS	HB2	2.149	.	.
1	A	429	GLU	HB2	1.9	.	.
1	A	429	GLU	HG2	2.272	.	.

Continued on next page...

Continued from previous page...

List ID	Chain	Res	Type	Atom	Shift Data		
					Value	Uncertainty	Ambiguity
1	A	430	ASP	HB2	2.624	.	.
1	A	431	PHE	HB2	2.946	.	.
1	A	432	GLN	HB2	1.889	.	.
1	A	432	GLN	HG2	2.273	.	.
1	A	434	HIS	HB2	3.159	.	.
1	A	436	ARG	HB2	1.787	.	.
1	A	436	ARG	HD2	3.206	.	.
1	A	436	ARG	HG2	1.678	.	.
1	A	438	GLU	HB2	1.994	.	.
1	A	438	GLU	HG2	2.271	.	.
1	A	439	LEU	HB2	1.2	.	.
1	A	440	SER	HB2	3.929	.	.
1	A	442	LEU	HB2	1.56	.	.
1	A	443	GLN	HB2	1.991	.	.
1	A	443	GLN	HG2	2.325	.	.
1	A	444	ASP	HB2	2.711	.	.
1	A	446	ILE	HG12	1.227	.	.
1	A	447	ASP	HB2	2.49	.	.
1	A	448	HIS	HB2	2.822	.	.
1	A	449	SER	HB2	3.347	.	.
1	A	451	PHE	HB2	2.957	.	.
1	A	452	ILE	HG12	1.258	.	.
1	A	453	ILE	HG12	1.201	.	.
1	A	454	LEU	HB2	1.528	.	.
1	A	455	LEU	HB2	0.807	.	.
1	A	456	LEU	HB2	1.329	.	.
1	A	458	SER	HB2	3.983	.	.
1	A	459	ASN	HB2	2.753	.	.
1	A	460	PHE	HB2	3.377	.	.
1	A	461	ASP	HB2	2.352	.	.
1	A	462	CYS	HB2	2.983	.	.
1	A	463	ARG	HD2	3.173	.	.
1	A	463	ARG	HG2	1.445	.	.
1	A	463	ARG	HB2	1.872	.	.
1	A	464	LEU	HB2	1.39	.	.
1	A	465	SER	HB2	3.619	.	.
1	A	466	LEU	HB2	1.713	.	.
1	A	467	HIS	HB2	3.408	.	.
1	A	468	GLN	HB2	1.964	.	.
1	A	468	GLN	HG2	2.428	.	.
1	A	470	ASN	HB2	2.729	.	.

Continued on next page...

Continued from previous page...

List ID	Chain	Res	Type	Atom	Shift Data		
					Value	Uncertainty	Ambiguity
1	A	471	GLN	HG2	2.211	.	.
1	A	471	GLN	HB2	2.028	.	.
1	A	473	MET	HB2	2.084	.	.
1	A	473	MET	HG2	2.457	.	.
1	A	474	MET	HG2	2.636	.	.
1	A	474	MET	HB2	2.145	.	.
1	A	475	SER	HB2	3.945	.	.
1	A	476	ASN	HB2	2.795	.	.
1	A	477	LEU	HB2	1.64	.	.
1	A	479	ARG	HB2	1.805	.	.
1	A	479	ARG	HD2	3.201	.	.
1	A	479	ARG	HG2	1.615	.	.
1	A	480	GLN	HB2	2.035	.	.
1	A	480	GLN	HG2	2.4	.	.
1	A	482	SER	HB2	3.897	.	.
1	A	483	PRO	HB2	2.043	.	.
1	A	483	PRO	HD2	3.785	.	.
1	A	483	PRO	HG2	2.045	.	.
1	A	484	ASP	HB2	2.749	.	.
1	A	485	CYS	HB2	2.89	.	.
1	A	487	ILE	HG12	1.298	.	.
1	A	488	PRO	HB2	1.99	.	.
1	A	488	PRO	HD2	3.973	.	.
1	A	488	PRO	HG2	1.792	.	.
1	A	489	PHE	HB2	2.611	.	.
1	A	490	LEU	HB2	1.237	.	.
1	A	491	PRO	HB2	1.872	.	.
1	A	491	PRO	HD2	4.229	.	.
1	A	491	PRO	HG2	1.688	.	.
1	A	492	LEU	HB2	1.17	.	.
1	A	493	GLU	HB2	1.817	.	.
1	A	493	GLU	HG2	2.276	.	.
1	A	494	SER	HB2	3.82	.	.
1	A	495	SER	HB2	3.785	.	.
1	A	496	PRO	HB2	1.925	.	.
1	A	496	PRO	HD2	3.576	.	.
1	A	496	PRO	HG2	1.717	.	.
1	A	498	GLN	HB2	2.158	.	.
1	A	498	GLN	HG2	2.383	.	.
1	A	499	LEU	HB2	1.577	.	.
1	A	500	SER	HB2	4.079	.	.

Continued on next page...

Continued from previous page...

List ID	Chain	Res	Type	Atom	Shift Data		
					Value	Uncertainty	Ambiguity
1	A	501	SER	HB2	4.007	.	.
1	A	502	ASP	HB2	2.681	.	.
1	A	505	SER	HB2	3.999	.	.
1	A	506	LEU	HB2	1.554	.	.
1	A	507	LEU	HB2	1.7	.	.
1	A	508	SER	HB2	4.007	.	.
1	A	510	LEU	HB2	1.558	.	.
1	A	512	ARG	HB2	1.678	.	.
1	A	512	ARG	HG2	1.392	.	.
1	A	512	ARG	HD2	3.101	.	.
1	A	513	LEU	HB2	1.171	.	.
1	A	514	ASP	HB2	2.363	.	.
1	A	515	GLU	HG2	1.08	.	.
1	A	515	GLU	HB2	1.388	.	.
1	A	516	HIS	HB2	3.168	.	.
1	A	517	SER	HB2	3.815	.	.
1	A	518	GLN	HB2	2.163	.	.
1	A	518	GLN	HG2	2.562	.	.
1	A	519	ILE	HG12	1.095	.	.
1	A	520	PHE	HB2	2.926	.	.
1	A	522	ARG	HD2	3.198	.	.
1	A	522	ARG	HB2	1.947	.	.
1	A	522	ARG	HG2	1.707	.	.
1	A	523	LYS	HB2	1.652	.	.
1	A	523	LYS	HD2	1.643	.	.
1	A	523	LYS	HE2	2.888	.	.
1	A	523	LYS	HG2	1.365	.	.
1	A	526	ASN	HB2	2.787	.	.
1	A	528	PHE	HB2	2.68	.	.
1	A	529	LYS	HB2	1.677	.	.
1	A	529	LYS	HD2	1.793	.	.
1	A	529	LYS	HE2	3.168	.	.
1	A	529	LYS	HG2	1.592	.	.
1	A	530	PRO	HB2	2.082	.	.
1	A	530	PRO	HD2	3.931	.	.
1	A	530	PRO	HG2	2.201	.	.
1	A	531	HIS	HB2	3.203	.	.
1	A	532	ARG	HG2	1.633	.	.
1	A	532	ARG	HB2	2.11	.	.
1	A	532	ARG	HD2	3.339	.	.
1	A	533	LEU	HB2	1.756	.	.

Continued on next page...

Continued from previous page...

List ID	Chain	Res	Type	Atom	Shift Data		
					Value	Uncertainty	Ambiguity
1	A	534	GLN	HG2	2.475	.	.
1	A	534	GLN	HB2	2.131	.	.
1	A	536	ARG	HB2	2.025	.	.
1	A	536	ARG	HD2	3.233	.	.
1	A	536	ARG	HG2	1.829	.	.
1	A	537	LYS	HB2	1.605	.	.
1	A	537	LYS	HE2	2.882	.	.
1	A	537	LYS	HG2	0.853	.	.
1	A	537	LYS	HD2	1.607	.	.
1	A	539	MET	HG2	2.637	.	.
1	A	539	MET	HB2	2.186	.	.
1	A	540	TRP	HB2	3.155	.	.
1	A	541	ARG	HD2	3.099	.	.
1	A	541	ARG	HG2	1.604	.	.
1	A	541	ARG	HB2	1.819	.	.
1	A	542	LYS	HG2	1.409	.	.
1	A	542	LYS	HB2	1.887	.	.
1	A	542	LYS	HD2	1.698	.	.
1	A	542	LYS	HE2	2.975	.	.
1	A	543	GLU	HG2	2.288	.	.
1	A	543	GLU	HB2	2.051	.	.
1	A	544	GLN	HB2	1.664	.	.
1	A	544	GLN	HG2	1.504	.	.
1	A	545	ASP	HB2	2.682	.	.
1	A	546	LEU	C	178.697	.	.
1	A	546	LEU	CA	56.611	.	.
1	A	546	LEU	CB	42.028	.	.
1	A	546	LEU	CD1	23.317	.	.
1	A	546	LEU	CD2	26.04	.	.
1	A	546	LEU	CG	26.977	.	.
1	A	546	LEU	HA	4.101	.	.
1	A	546	LEU	HB2	1.527	.	.
1	A	546	LEU	HB3	1.7	.	.
1	A	546	LEU	HG	1.52	.	.
1	A	546	LEU	H	7.882	.	.
1	A	546	LEU	N	120.836	.	.
1	A	546	LEU	HD11	0.824	.	.
1	A	546	LEU	HD12	0.824	.	.
1	A	546	LEU	HD13	0.824	.	.
1	A	546	LEU	HD21	0.846	.	.
1	A	546	LEU	HD22	0.846	.	.

Continued on next page...

Continued from previous page...

List ID	Chain	Res	Type	Atom	Shift Data		
					Value	Uncertainty	Ambiguity
1	A	546	LEU	HD23	0.846	.	.
1	A	547	GLU	C	177.245	.	.
1	A	547	GLU	CA	57.473	.	.
1	A	547	GLU	CB	29.478	.	.
1	A	547	GLU	CG	35.739	.	.
1	A	547	GLU	HA	4.055	.	.
1	A	547	GLU	HG2	2.15	.	.
1	A	547	GLU	HG3	2.238	.	.
1	A	547	GLU	H	8.027	.	.
1	A	547	GLU	N	118.309	.	.
1	A	547	GLU	HB2	1.875	.	.
1	A	547	GLU	HB3	1.875	.	.
1	A	548	HIS	C	174.796	.	.
1	A	548	HIS	CA	55.94	.	.
1	A	548	HIS	CB	28.547	.	.
1	A	548	HIS	CD2	120.197	.	.
1	A	548	HIS	HA	4.539	.	.
1	A	548	HIS	HB2	3.084	.	.
1	A	548	HIS	HB3	3.19	.	.
1	A	548	HIS	HD2	7.178	.	.
1	A	548	HIS	H	8.042	.	.
1	A	548	HIS	N	116.181	.	.
1	A	549	HIS	C	174.413	.	.
1	A	549	HIS	CA	55.881	.	.
1	A	549	HIS	CB	28.677	.	.
1	A	549	HIS	CD2	119.958	.	.
1	A	549	HIS	HA	4.592	.	.
1	A	549	HIS	HB2	3.1	.	.
1	A	549	HIS	HB3	3.195	.	.
1	A	549	HIS	HD2	7.204	.	.
1	A	549	HIS	H	8.205	.	.
1	A	549	HIS	N	117.324	.	.
1	A	550	HIS	C	174.278	.	.
1	A	550	HIS	CA	55.422	.	.
1	A	550	HIS	CB	29.128	.	.
1	A	550	HIS	CD2	119.588	.	.
1	A	550	HIS	HA	4.654	.	.
1	A	550	HIS	HB2	3.102	.	.
1	A	550	HIS	HB3	3.192	.	.
1	A	550	HIS	HD2	7.205	.	.
1	A	550	HIS	H	8.385	.	.

Continued on next page...

Continued from previous page...

List ID	Chain	Res	Type	Atom	Shift Data		
					Value	Uncertainty	Ambiguity
1	A	550	HIS	N	118.46	.	.
1	A	551	HIS	C	174.07	.	.
1	A	551	HIS	CA	55.524	.	.
1	A	551	HIS	CB	29.322	.	.
1	A	551	HIS	HA	4.648	.	.
1	A	551	HIS	HB2	3.1	.	.
1	A	551	HIS	HB3	3.192	.	.
1	A	551	HIS	H	8.492	.	.
1	A	551	HIS	N	119.21	.	.
1	A	552	HIS	C	173.536	.	.
1	A	552	HIS	CA	55.562	.	.
1	A	552	HIS	CB	29.484	.	.
1	A	552	HIS	CD2	119.65	.	.
1	A	552	HIS	HA	4.648	.	.
1	A	552	HIS	HD2	7.208	.	.
1	A	552	HIS	H	8.529	.	.
1	A	552	HIS	N	120.145	.	.
1	A	552	HIS	HB2	3.193	.	.
1	A	552	HIS	HB3	3.193	.	.
1	A	553	HIS	C	178.843	.	.
1	A	553	HIS	CA	57.106	.	.
1	A	553	HIS	CB	29.761	.	.
1	A	553	HIS	HA	4.454	.	.
1	A	553	HIS	HB2	3.117	.	.
1	A	553	HIS	HB3	3.239	.	.
1	A	553	HIS	H	8.329	.	.
1	A	553	HIS	N	125.197	.	.

7.1.2 Chemical shift referencing [\(i\)](#)

The following table shows the suggested chemical shift referencing corrections.

Nucleus	# values	Correction \pm precision, ppm	Suggested action
$^{13}\text{C}_\alpha$	168	-0.07 \pm 0.11	None needed (< 0.5 ppm)
$^{13}\text{C}_\beta$	161	0.39 \pm 0.11	None needed (< 0.5 ppm)
$^{13}\text{C}'$	163	0.07 \pm 0.10	None needed (< 0.5 ppm)
^{15}N	158	0.38 \pm 0.22	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 94%, i.e. 1602 atoms were assigned a chemical shift out of a possible 1710. 0 out of 25 assigned methyl groups (LEU and VAL) were assigned stereospecifically.

	Total	¹ H	¹³ C	¹⁵ N
Backbone	606/612 (99%)	245/246 (100%)	244/248 (98%)	117/118 (99%)
Sidechain	919/976 (94%)	616/640 (96%)	284/298 (95%)	19/38 (50%)
Aromatic	77/122 (63%)	46/63 (73%)	30/52 (58%)	1/7 (14%)
Overall	1602/1710 (94%)	907/949 (96%)	558/598 (93%)	137/163 (84%)

The following table shows the completeness of the chemical shift assignments for the full structure. The overall completeness is 93%, i.e. 2050 atoms were assigned a chemical shift out of a possible 2201. 0 out of 28 assigned methyl groups (LEU and VAL) were assigned stereospecifically.

	Total	¹ H	¹³ C	¹⁵ N
Backbone	781/794 (98%)	316/320 (99%)	315/320 (98%)	150/154 (97%)
Sidechain	1160/1246 (93%)	774/810 (96%)	360/382 (94%)	26/54 (48%)
Aromatic	109/161 (68%)	64/83 (77%)	43/69 (62%)	2/9 (22%)
Overall	2050/2201 (93%)	1154/1213 (95%)	718/771 (93%)	178/217 (82%)

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

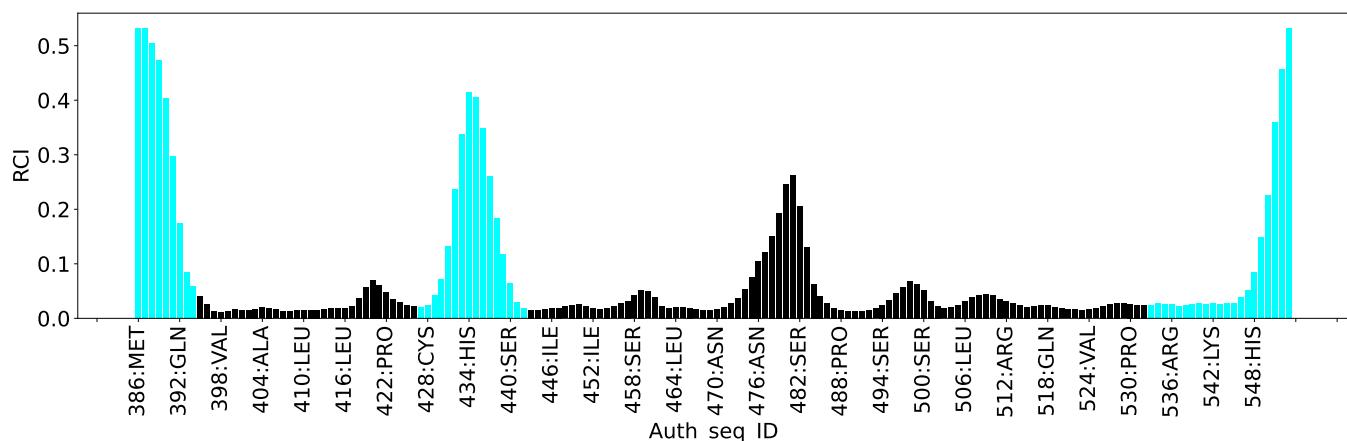
The following table lists the statistically unusual chemical shifts. These are statistical measures, and large deviations from the mean do not necessarily imply incorrect assignments. Molecules containing paramagnetic centres or hemes are expected to give rise to anomalous chemical shifts.

List Id	Chain	Res	Type	Atom	Shift, ppm	Expected range, ppm	Z-score
1	A	515	GLU	HG2	1.08	1.24 – 3.30	-5.8

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

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

Random coil index (RCI) for chain A:



8 NMR restraints analysis (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	2867
Intra-residue ($ i-j =0$)	831
Sequential ($ i-j =1$)	845
Medium range ($ i-j >1$ and $ i-j <5$)	575
Long range ($ i-j \geq 5$)	616
Inter-chain	0
Hydrogen bond restraints	0
Disulfide bond restraints	0
Total dihedral-angle restraints	0
Number of unmapped restraints	1218
Number of restraints per residue	17.1
Number of long range restraints per residue ¹	3.7

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

8.2 Residual restraint violations (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)	45.8	0.2
0.2-0.5 (Medium)	101.7	0.5
>0.5 (Large)	127.8	3.49

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

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

9 Distance violation analysis (i)

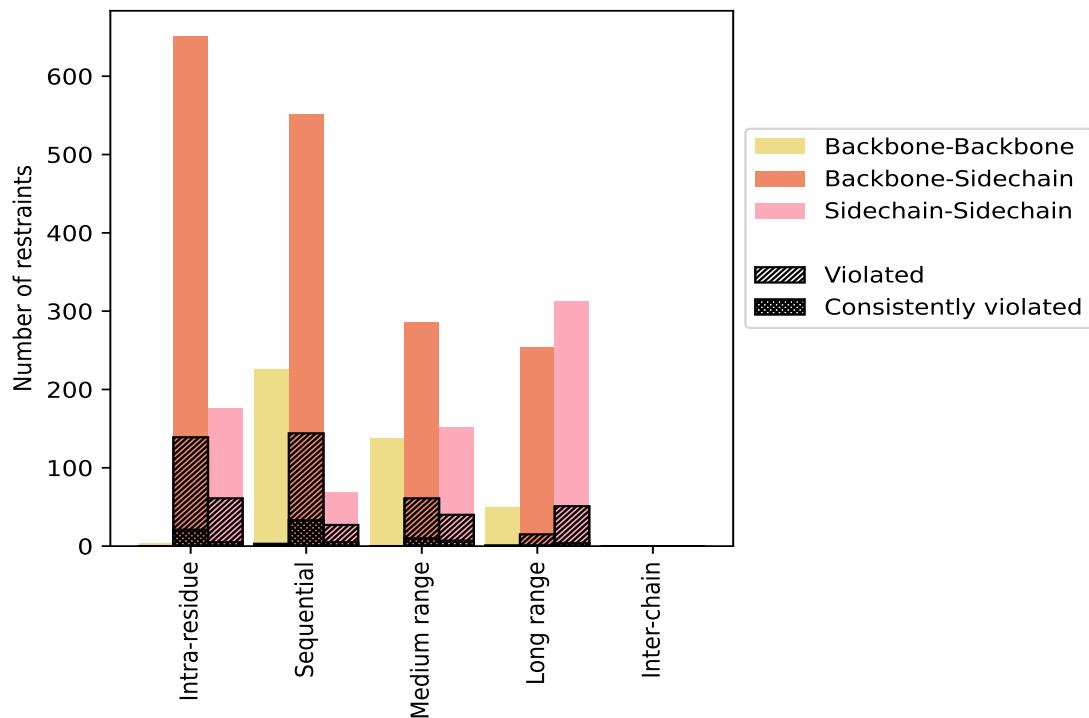
9.1 Summary of distance violations (i)

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$)	831	29.0	200	24.1	7.0	26	3.1	0.9
Backbone-Backbone	4	0.1	0	0.0	0.0	0	0.0	0.0
Backbone-Sidechain	651	22.7	139	21.4	4.8	21	3.2	0.7
Sidechain-Sidechain	176	6.1	61	34.7	2.1	5	2.8	0.2
Sequential ($ i-j =1$)	845	29.5	174	20.6	6.1	40	4.7	1.4
Backbone-Backbone	226	7.9	3	1.3	0.1	2	0.9	0.1
Backbone-Sidechain	551	19.2	144	26.1	5.0	33	6.0	1.2
Sidechain-Sidechain	68	2.4	27	39.7	0.9	5	7.4	0.2
Medium range ($ i-j >1 \text{ & } i-j <5$)	575	20.1	101	17.6	3.5	17	3.0	0.6
Backbone-Backbone	137	4.8	0	0.0	0.0	0	0.0	0.0
Backbone-Sidechain	286	10.0	61	21.3	2.1	10	3.5	0.3
Sidechain-Sidechain	152	5.3	40	26.3	1.4	7	4.6	0.2
Long range ($ i-j \geq 5$)	616	21.5	67	10.9	2.3	5	0.8	0.2
Backbone-Backbone	49	1.7	1	2.0	0.0	0	0.0	0.0
Backbone-Sidechain	254	8.9	15	5.9	0.5	1	0.4	0.0
Sidechain-Sidechain	313	10.9	51	16.3	1.8	4	1.3	0.1
Inter-chain	0	0.0	0	0.0	0.0	0	0.0	0.0
Backbone-Backbone	0	0.0	0	0.0	0.0	0	0.0	0.0
Backbone-Sidechain	0	0.0	0	0.0	0.0	0	0.0	0.0
Sidechain-Sidechain	0	0.0	0	0.0	0.0	0	0.0	0.0
Hydrogen bond	0	0.0	0	0.0	0.0	0	0.0	0.0
Disulfide bond	0	0.0	0	0.0	0.0	0	0.0	0.0
Total	2867	100.0	542	18.9	18.9	88	3.1	3.1
Backbone-Backbone	416	14.5	4	1.0	0.1	2	0.5	0.1
Backbone-Sidechain	1742	60.8	359	20.6	12.5	65	3.7	2.3
Sidechain-Sidechain	709	24.7	179	25.2	6.2	21	3.0	0.7

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	98	96	50	21	0	265	0.54	3.49	0.4	0.44
2	92	91	53	30	0	266	0.57	3.49	0.41	0.45
3	104	99	50	27	0	280	0.55	3.43	0.4	0.48
4	99	91	47	24	0	261	0.56	3.21	0.42	0.47
5	100	97	51	23	0	271	0.53	2.32	0.35	0.45
6	106	96	54	29	0	285	0.56	3.49	0.41	0.47
7	94	96	41	25	0	256	0.53	2.63	0.37	0.44
8	104	100	46	30	0	280	0.55	2.51	0.37	0.47
9	109	101	50	24	0	284	0.54	2.5	0.39	0.44
10	109	106	43	36	0	294	0.56	2.52	0.38	0.49
11	81	102	50	25	0	258	0.57	3.43	0.42	0.48

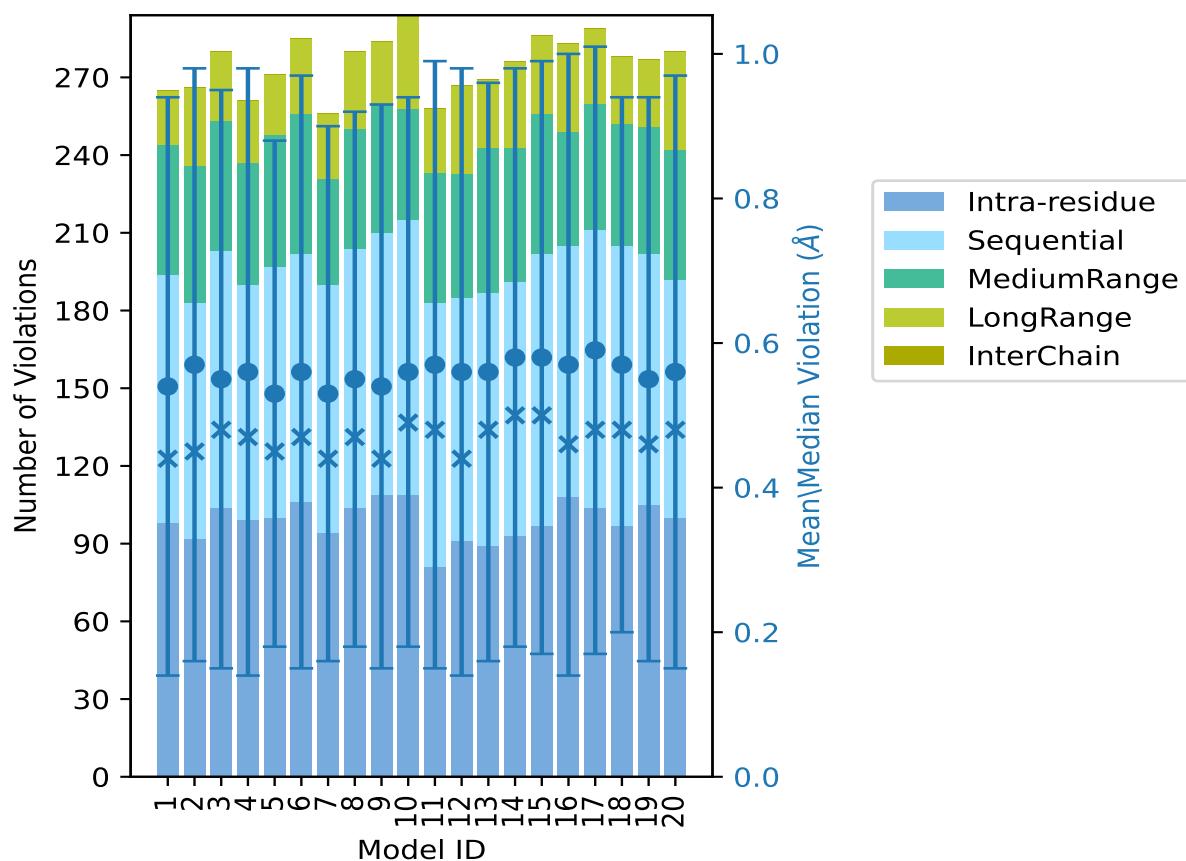
Continued on next page...

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	91	94	48	34	0	267	0.56	3.4	0.42	0.44
13	89	98	56	26	0	269	0.56	3.21	0.4	0.48
14	93	98	52	33	0	276	0.58	2.8	0.4	0.5
15	97	105	54	30	0	286	0.58	3.34	0.41	0.5
16	108	97	44	34	0	283	0.57	3.47	0.43	0.46
17	104	107	49	29	0	289	0.59	3.45	0.42	0.48
18	97	108	47	26	0	278	0.57	2.29	0.37	0.48
19	105	97	49	26	0	277	0.55	3.41	0.39	0.46
20	100	92	50	38	0	280	0.56	3.45	0.41	0.48

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

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



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

9.3 Distance violation statistics for the ensemble [\(i\)](#)

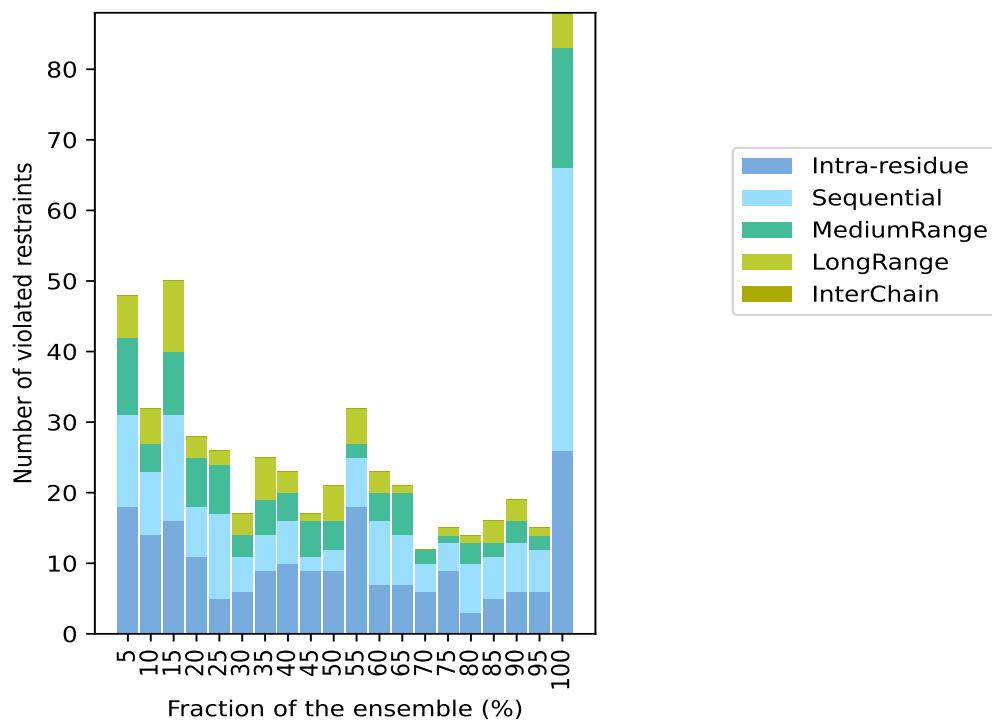
Violation analysis may find that some restraints are violated in few models and some are violated in most of models. The following table provides this information as number of violated restraints for a given fraction of the ensemble. In total, 2325(IR:631, SQ:671, MR:474, LR:549, IC:0) restraints are not violated in the ensemble.

IR ¹	SQ ²	MR ³	LR ⁴	IC ⁵	Total	Fraction of the ensemble	
						Count ⁶	%
18	13	11	6	0	48	1	5.0
14	9	4	5	0	32	2	10.0
16	15	9	10	0	50	3	15.0
11	7	7	3	0	28	4	20.0
5	12	7	2	0	26	5	25.0
6	5	3	3	0	17	6	30.0
9	5	5	6	0	25	7	35.0
10	6	4	3	0	23	8	40.0
9	2	5	1	0	17	9	45.0
9	3	4	5	0	21	10	50.0
18	7	2	5	0	32	11	55.0
7	9	4	3	0	23	12	60.0
7	7	6	1	0	21	13	65.0
6	4	2	0	0	12	14	70.0
9	4	1	1	0	15	15	75.0
3	7	3	1	0	14	16	80.0
5	6	2	3	0	16	17	85.0
6	7	3	3	0	19	18	90.0
6	6	2	1	0	15	19	95.0
26	40	17	5	0	88	20	100.0

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

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

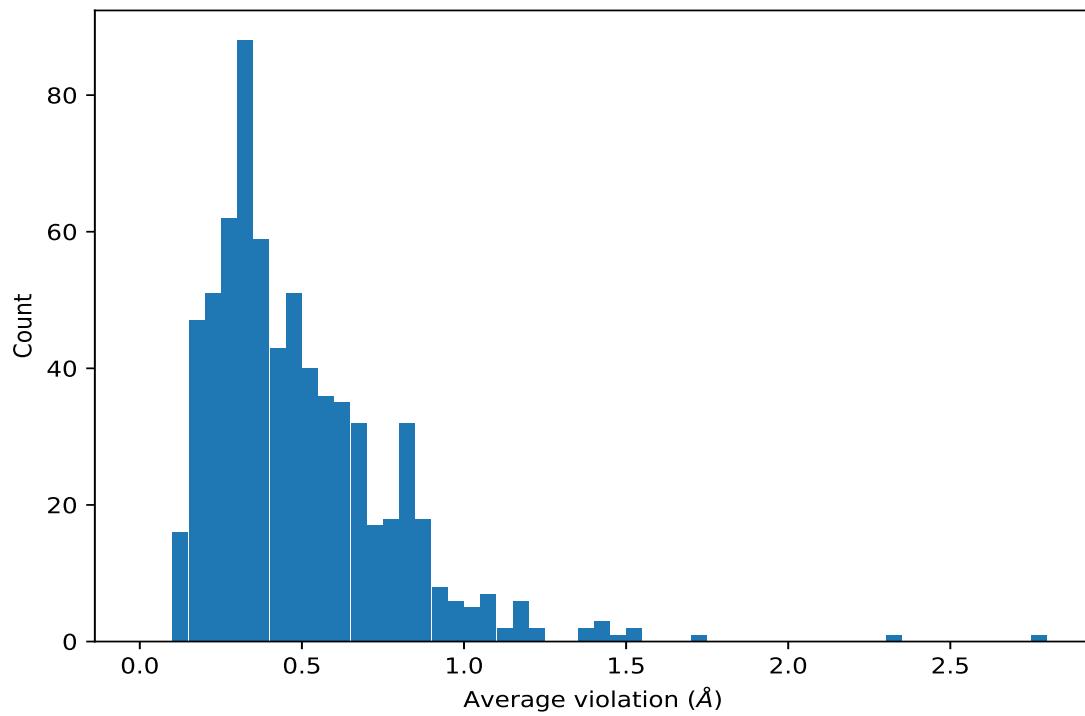
9.3.1 Bar graph : Distance violation statistics for the ensemble [\(i\)](#)



9.4 Most violated distance restraints in the ensemble [\(i\)](#)

9.4.1 Histogram : Distribution of mean distance violations [\(i\)](#)

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



9.4.2 Table: Most violated distance restraints [\(i\)](#)

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

Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)	Median (Å)
(1,2557)	1:A:479:ARG:HH22	1:A:480:GLN:H	20	2.75	1.03	3.37
(1,2642)	1:A:492:LEU:HB3	1:A:493:GLU:HG3	20	2.33	0.2	2.32
(1,1679)	1:A:519:ILE:HB	1:A:522:ARG:HB3	20	1.7	0.01	1.7
(1,469)	1:A:521:ALA:H	1:A:522:ARG:HB3	20	1.51	0.02	1.52
(1,621)	1:A:523:LYS:H	1:A:526:ASN:HB3	20	1.5	0.04	1.5
(1,858)	1:A:403:ARG:HG3	1:A:406:GLU:H	20	1.46	0.54	1.67
(1,746)	1:A:525:ALA:H	1:A:526:ASN:HB3	20	1.42	0.07	1.42
(1,1578)	1:A:462:CYS:HB3	1:A:463:ARG:HB3	20	1.38	0.48	1.42
(1,2562)	1:A:480:GLN:HB3	1:A:482:SER:HB3	20	1.36	0.5	1.44
(1,2590)	1:A:487:ILE:HG21	1:A:489:PHE:HB3	20	1.17	0.19	1.25
(1,2590)	1:A:487:ILE:HG22	1:A:489:PHE:HB3	20	1.17	0.19	1.25
(1,2590)	1:A:487:ILE:HG23	1:A:489:PHE:HB3	20	1.17	0.19	1.25
(1,1789)	1:A:483:PRO:HG3	1:A:484:ASP:HA	20	1.11	0.06	1.1
(1,1638)	1:A:539:MET:HA	1:A:542:LYS:HB3	20	1.1	0.33	1.09
(1,1678)	1:A:519:ILE:HB	1:A:522:ARG:HG3	20	1.09	0.02	1.08
(1,1163)	1:A:525:ALA:HB1	1:A:526:ASN:HB3	20	1.08	0.02	1.08

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)	Median (Å)
(1,1163)	1:A:525:ALA:HB2	1:A:526:ASN:HB3	20	1.08	0.02	1.08
(1,1163)	1:A:525:ALA:HB3	1:A:526:ASN:HB3	20	1.08	0.02	1.08
(1,1745)	1:A:479:ARG:HD3	1:A:479:ARG:HH22	20	1.06	0.3	1.07
(1,1950)	1:A:474:MET:HB3	1:A:475:SER:HA	20	0.96	0.03	0.96
(1,2634)	1:A:491:PRO:HG3	1:A:494:SER:H	20	0.96	0.15	0.92
(1,1776)	1:A:496:PRO:HB3	1:A:497:ALA:HA	20	0.93	0.01	0.93
(1,2226)	1:A:408:ILE:HG21	1:A:494:SER:HB3	20	0.92	0.2	0.92
(1,2226)	1:A:408:ILE:HG22	1:A:494:SER:HB3	20	0.92	0.2	0.92
(1,2226)	1:A:408:ILE:HG23	1:A:494:SER:HB3	20	0.92	0.2	0.92
(1,620)	1:A:522:ARG:HB3	1:A:523:LYS:H	20	0.9	0.03	0.91
(1,530)	1:A:522:ARG:H	1:A:522:ARG:HB3	20	0.9	0.0	0.9
(1,2412)	1:A:446:ILE:HG13	1:A:473:MET:HE1	20	0.89	0.35	1.02
(1,2412)	1:A:446:ILE:HG13	1:A:473:MET:HE2	20	0.89	0.35	1.02
(1,2412)	1:A:446:ILE:HG13	1:A:473:MET:HE3	20	0.89	0.35	1.02
(1,1432)	1:A:462:CYS:HB3	1:A:506:LEU:HD21	20	0.85	0.43	0.87
(1,1432)	1:A:462:CYS:HB3	1:A:506:LEU:HD22	20	0.85	0.43	0.87
(1,1432)	1:A:462:CYS:HB3	1:A:506:LEU:HD23	20	0.85	0.43	0.87
(1,254)	1:A:483:PRO:HG3	1:A:484:ASP:H	20	0.84	0.01	0.84
(1,1010)	1:A:454:LEU:HB3	1:A:489:PHE:H	20	0.81	0.17	0.82
(1,2596)	1:A:488:PRO:HG3	1:A:489:PHE:H	20	0.81	0.01	0.81
(1,2848)	1:A:544:GLN:HG3	1:A:545:ASP:H	20	0.8	0.29	0.76
(1,1964)	1:A:540:TRP:HA	1:A:541:ARG:HB3	20	0.79	0.38	1.05
(1,2658)	1:A:493:GLU:HG3	1:A:494:SER:H	20	0.77	0.12	0.78
(1,2661)	1:A:495:SER:H	1:A:495:SER:HB3	20	0.76	0.03	0.76
(1,2784)	1:A:523:LYS:HG3	1:A:524:VAL:H	20	0.76	0.04	0.77
(1,2633)	1:A:491:PRO:HG3	1:A:493:GLU:H	20	0.75	0.15	0.72
(1,2332)	1:A:422:PRO:HG3	1:A:423:ASP:H	20	0.75	0.04	0.74
(1,2334)	1:A:422:PRO:HD3	1:A:423:ASP:H	20	0.75	0.02	0.74
(1,105)	1:A:522:ARG:HG3	1:A:526:ASN:HD22	20	0.75	0.05	0.76
(1,1617)	1:A:415:LYS:H	1:A:415:LYS:HD3	20	0.74	0.22	0.86
(1,247)	1:A:410:LEU:H	1:A:410:LEU:HB3	20	0.73	0.02	0.74
(1,2632)	1:A:491:PRO:HB3	1:A:494:SER:H	20	0.73	0.09	0.76
(1,945)	1:A:462:CYS:H	1:A:463:ARG:HB3	20	0.71	0.16	0.7
(1,449)	1:A:543:GLU:HB3	1:A:544:GLN:H	20	0.7	0.25	0.74
(1,2568)	1:A:483:PRO:HB3	1:A:484:ASP:H	20	0.67	0.0	0.67
(1,1752)	1:A:512:ARG:HD3	1:A:512:ARG:HH22	20	0.67	0.22	0.57
(1,1982)	1:A:413:ARG:HA	1:A:413:ARG:HD3	20	0.62	0.04	0.63
(1,138)	1:A:526:ASN:H	1:A:526:ASN:HB3	20	0.62	0.03	0.62
(1,542)	1:A:463:ARG:H	1:A:463:ARG:HB3	20	0.61	0.02	0.6
(1,2677)	1:A:498:GLN:HA	1:A:498:GLN:HG3	20	0.57	0.04	0.58
(1,735)	1:A:410:LEU:HB3	1:A:411:ARG:H	20	0.57	0.05	0.57
(1,2250)	1:A:414:GLU:H	1:A:414:GLU:HB3	20	0.56	0.02	0.56

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)	Median (Å)
(1,2196)	1:A:401:HIS:HE1	1:A:406:GLU:HB3	20	0.55	0.11	0.56
(1,2799)	1:A:529:LYS:H	1:A:529:LYS:HB3	20	0.55	0.02	0.56
(1,1933)	1:A:523:LYS:HA	1:A:526:ASN:HB3	20	0.54	0.07	0.55
(1,2367)	1:A:434:HIS:HB3	1:A:435:GLY:H	20	0.54	0.12	0.53
(1,895)	1:A:420:GLY:HA2	1:A:421:VAL:H	20	0.54	0.01	0.54
(1,2710)	1:A:511:VAL:HA	1:A:512:ARG:HB3	20	0.54	0.21	0.63
(1,266)	1:A:481:GLY:HA3	1:A:482:SER:H	20	0.53	0.02	0.54
(1,561)	1:A:543:GLU:HB3	1:A:545:ASP:H	20	0.52	0.24	0.47
(1,1684)	1:A:523:LYS:HB3	1:A:526:ASN:HB3	20	0.52	0.09	0.52
(1,2374)	1:A:438:GLU:H	1:A:438:GLU:HB3	20	0.5	0.08	0.5
(1,883)	1:A:523:LYS:HB3	1:A:524:VAL:H	20	0.5	0.06	0.49
(1,2659)	1:A:494:SER:H	1:A:494:SER:HB3	20	0.48	0.09	0.51
(1,2697)	1:A:507:LEU:HB3	1:A:508:SER:H	20	0.47	0.11	0.46
(1,2796)	1:A:527:THR:HA	1:A:529:LYS:HD3	20	0.47	0.15	0.48
(1,1203)	1:A:471:GLN:HB3	1:A:472:ALA:HB1	20	0.46	0.16	0.39
(1,1203)	1:A:471:GLN:HB3	1:A:472:ALA:HB2	20	0.46	0.16	0.39
(1,1203)	1:A:471:GLN:HB3	1:A:472:ALA:HB3	20	0.46	0.16	0.39
(1,2215)	1:A:406:GLU:HG3	1:A:409:ALA:H	20	0.45	0.15	0.45
(1,811)	1:A:391:GLU:H	1:A:391:GLU:HG3	20	0.45	0.08	0.45
(1,2209)	1:A:406:GLU:H	1:A:406:GLU:HG3	20	0.44	0.03	0.45
(1,2672)	1:A:496:PRO:HD3	1:A:497:ALA:H	20	0.44	0.0	0.44
(1,2255)	1:A:414:GLU:HB3	1:A:415:LYS:H	20	0.43	0.15	0.4
(1,2575)	1:A:484:ASP:HB3	1:A:485:CYS:H	20	0.43	0.15	0.4
(1,2783)	1:A:523:LYS:HG3	1:A:523:LYS:HE3	20	0.43	0.12	0.46
(1,2533)	1:A:473:MET:H	1:A:473:MET:HB3	20	0.42	0.04	0.42
(1,454)	1:A:496:PRO:HG3	1:A:497:ALA:H	20	0.39	0.05	0.39
(1,2759)	1:A:516:HIS:HB3	1:A:517:SER:H	20	0.38	0.06	0.38
(1,175)	1:A:474:MET:HB3	1:A:475:SER:H	20	0.36	0.11	0.33
(1,2520)	1:A:470:ASN:H	1:A:470:ASN:HB3	20	0.35	0.04	0.36
(1,2769)	1:A:519:ILE:HD11	1:A:523:LYS:HE3	20	0.35	0.04	0.34
(1,2769)	1:A:519:ILE:HD12	1:A:523:LYS:HE3	20	0.35	0.04	0.34
(1,2769)	1:A:519:ILE:HD13	1:A:523:LYS:HE3	20	0.35	0.04	0.34
(1,1660)	1:A:518:GLN:HA	1:A:518:GLN:HG3	20	0.34	0.26	0.19
(1,2656)	1:A:493:GLU:HA	1:A:493:GLU:HG3	20	0.33	0.03	0.34
(1,2202)	1:A:405:ASP:HB3	1:A:406:GLU:H	20	0.32	0.19	0.22
(1,2814)	1:A:533:LEU:H	1:A:533:LEU:HB3	20	0.32	0.04	0.3
(1,2702)	1:A:510:LEU:H	1:A:510:LEU:HB3	20	0.31	0.05	0.31
(1,2570)	1:A:483:PRO:HD3	1:A:484:ASP:H	20	0.31	0.0	0.31
(1,2673)	1:A:496:PRO:HD3	1:A:497:ALA:HB1	20	0.31	0.01	0.31
(1,2673)	1:A:496:PRO:HD3	1:A:497:ALA:HB2	20	0.31	0.01	0.31
(1,2673)	1:A:496:PRO:HD3	1:A:497:ALA:HB3	20	0.31	0.01	0.31
(1,2526)	1:A:471:GLN:HB3	1:A:471:GLN:HG3	20	0.27	0.09	0.23

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)	Median (Å)
(1,2321)	1:A:421:VAL:HA	1:A:422:PRO:HG3	20	0.21	0.01	0.21
(1,2505)	1:A:468:GLN:H	1:A:468:GLN:HB3	20	0.19	0.03	0.2
(1,2804)	1:A:529:LYS:HA	1:A:530:PRO:HG3	20	0.15	0.02	0.16
(1,2431)	1:A:453:ILE:HG21	1:A:453:ILE:HG13	20	0.15	0.01	0.15
(1,2431)	1:A:453:ILE:HG22	1:A:453:ILE:HG13	20	0.15	0.01	0.15
(1,2431)	1:A:453:ILE:HG23	1:A:453:ILE:HG13	20	0.15	0.01	0.15
(1,2807)	1:A:529:LYS:HB3	1:A:529:LYS:HE3	19	1.08	0.18	1.11
(1,165)	1:A:463:ARG:HB3	1:A:465:SER:H	19	0.66	0.28	0.67
(1,1549)	1:A:522:ARG:HG3	1:A:526:ASN:HD21	19	0.65	0.05	0.65
(1,554)	1:A:542:LYS:H	1:A:542:LYS:HB3	19	0.63	0.03	0.63
(1,2350)	1:A:431:PHE:HA	1:A:432:GLN:HB3	19	0.6	0.41	0.36
(1,2225)	1:A:408:ILE:HG21	1:A:493:GLU:HB3	19	0.52	0.15	0.51
(1,2225)	1:A:408:ILE:HG22	1:A:493:GLU:HB3	19	0.52	0.15	0.51
(1,2225)	1:A:408:ILE:HG23	1:A:493:GLU:HB3	19	0.52	0.15	0.51
(1,2685)	1:A:502:ASP:HB3	1:A:503:THR:H	19	0.5	0.14	0.46
(1,2728)	1:A:513:LEU:HA	1:A:514:ASP:HB3	19	0.48	0.06	0.5
(1,2357)	1:A:432:GLN:HB3	1:A:433:VAL:H	19	0.46	0.23	0.45
(1,1676)	1:A:416:LEU:HG	1:A:417:GLU:HG3	19	0.44	0.17	0.47
(1,2822)	1:A:534:GLN:HG3	1:A:534:GLN:HE22	19	0.41	0.23	0.6
(1,2721)	1:A:512:ARG:H	1:A:512:ARG:HG3	19	0.33	0.09	0.36
(1,2336)	1:A:423:ASP:HB3	1:A:424:GLY:H	19	0.3	0.16	0.24
(1,2803)	1:A:529:LYS:HA	1:A:529:LYS:HD3	19	0.28	0.04	0.28
(1,536)	1:A:543:GLU:H	1:A:543:GLU:HB3	19	0.23	0.04	0.23
(1,1751)	1:A:488:PRO:HB3	1:A:512:ARG:HD3	18	1.4	0.42	1.5
(1,731)	1:A:538:ALA:H	1:A:539:MET:HB3	18	1.16	0.34	1.24
(1,2464)	1:A:456:LEU:HB3	1:A:490:LEU:HD11	18	0.86	0.24	0.92
(1,2464)	1:A:456:LEU:HB3	1:A:490:LEU:HD12	18	0.86	0.24	0.92
(1,2464)	1:A:456:LEU:HB3	1:A:490:LEU:HD13	18	0.86	0.24	0.92
(1,2464)	1:A:456:LEU:HB3	1:A:490:LEU:HD21	18	0.86	0.24	0.92
(1,2464)	1:A:456:LEU:HB3	1:A:490:LEU:HD22	18	0.86	0.24	0.92
(1,2464)	1:A:456:LEU:HB3	1:A:490:LEU:HD23	18	0.86	0.24	0.92
(1,2680)	1:A:499:LEU:HB3	1:A:500:SER:HB3	18	0.83	0.49	1.1
(1,2729)	1:A:513:LEU:HA	1:A:523:LYS:HE3	18	0.82	0.25	0.84
(1,2148)	1:A:395:TYR:HA	1:A:396:ASN:HB3	18	0.7	0.2	0.76
(1,2842)	1:A:544:GLN:H	1:A:544:GLN:HG3	18	0.65	0.17	0.68
(1,2254)	1:A:414:GLU:HB3	1:A:414:GLU:HG3	18	0.57	0.19	0.66
(1,2611)	1:A:490:LEU:HG	1:A:494:SER:HB3	18	0.56	0.21	0.57
(1,1716)	1:A:529:LYS:HB3	1:A:529:LYS:HE3	18	0.52	0.1	0.53
(1,2844)	1:A:544:GLN:HA	1:A:544:GLN:HG3	18	0.48	0.06	0.48
(1,2502)	1:A:467:HIS:HA	1:A:470:ASN:HB3	18	0.44	0.17	0.4
(1,2161)	1:A:397:PHE:HB3	1:A:398:VAL:H	18	0.43	0.15	0.44
(1,2027)	1:A:389:SER:HB3	1:A:390:SER:H	18	0.4	0.12	0.36

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)	Median (Å)
(1,2214)	1:A:406:GLU:HG3	1:A:407:HIS:HA	18	0.39	0.19	0.32
(1,2524)	1:A:471:GLN:HA	1:A:471:GLN:HG3	18	0.35	0.09	0.36
(1,2714)	1:A:511:VAL:HG11	1:A:513:LEU:HB3	18	0.34	0.15	0.32
(1,2714)	1:A:511:VAL:HG12	1:A:513:LEU:HB3	18	0.34	0.15	0.32
(1,2714)	1:A:511:VAL:HG13	1:A:513:LEU:HB3	18	0.34	0.15	0.32
(1,2714)	1:A:511:VAL:HG21	1:A:513:LEU:HB3	18	0.34	0.15	0.32
(1,2714)	1:A:511:VAL:HG22	1:A:513:LEU:HB3	18	0.34	0.15	0.32
(1,2714)	1:A:511:VAL:HG23	1:A:513:LEU:HB3	18	0.34	0.15	0.32
(1,2800)	1:A:529:LYS:H	1:A:529:LYS:HD3	18	0.28	0.13	0.26
(1,829)	1:A:534:GLN:HB3	1:A:535:ALA:H	18	0.17	0.05	0.16
(1,2683)	1:A:501:SER:H	1:A:502:ASP:HB3	17	0.97	0.08	0.97
(1,1595)	1:A:470:ASN:H	1:A:471:GLN:HB3	17	0.95	0.11	0.92
(1,415)	1:A:471:GLN:H	1:A:471:GLN:HB3	17	0.74	0.01	0.74
(1,710)	1:A:466:LEU:HB3	1:A:469:VAL:H	17	0.64	0.14	0.68
(1,2684)	1:A:502:ASP:H	1:A:502:ASP:HB3	17	0.6	0.03	0.6
(1,2529)	1:A:471:GLN:HG3	1:A:472:ALA:H	17	0.53	0.13	0.59
(1,2264)	1:A:415:LYS:HE3	1:A:521:ALA:HB1	17	0.5	0.32	0.44
(1,2264)	1:A:415:LYS:HE3	1:A:521:ALA:HB2	17	0.5	0.32	0.44
(1,2264)	1:A:415:LYS:HE3	1:A:521:ALA:HB3	17	0.5	0.32	0.44
(1,2553)	1:A:479:ARG:H	1:A:479:ARG:HB3	17	0.45	0.08	0.47
(1,2700)	1:A:509:GLY:H	1:A:510:LEU:HB3	17	0.45	0.17	0.49
(1,1571)	1:A:479:ARG:H	1:A:479:ARG:HG3	17	0.39	0.15	0.35
(1,2179)	1:A:398:VAL:HG11	1:A:449:SER:HB3	17	0.38	0.18	0.39
(1,2179)	1:A:398:VAL:HG12	1:A:449:SER:HB3	17	0.38	0.18	0.39
(1,2179)	1:A:398:VAL:HG13	1:A:449:SER:HB3	17	0.38	0.18	0.39
(1,2179)	1:A:398:VAL:HG21	1:A:449:SER:HB3	17	0.38	0.18	0.39
(1,2179)	1:A:398:VAL:HG22	1:A:449:SER:HB3	17	0.38	0.18	0.39
(1,2179)	1:A:398:VAL:HG23	1:A:449:SER:HB3	17	0.38	0.18	0.39
(1,543)	1:A:462:CYS:HB3	1:A:463:ARG:H	17	0.35	0.13	0.34
(1,2641)	1:A:492:LEU:HB3	1:A:493:GLU:H	17	0.33	0.13	0.27
(1,2316)	1:A:420:GLY:HA2	1:A:524:VAL:HG11	17	0.3	0.1	0.31
(1,2316)	1:A:420:GLY:HA2	1:A:524:VAL:HG12	17	0.3	0.1	0.31
(1,2316)	1:A:420:GLY:HA2	1:A:524:VAL:HG13	17	0.3	0.1	0.31
(1,2316)	1:A:420:GLY:HA2	1:A:524:VAL:HG21	17	0.3	0.1	0.31
(1,2316)	1:A:420:GLY:HA2	1:A:524:VAL:HG22	17	0.3	0.1	0.31
(1,2316)	1:A:420:GLY:HA2	1:A:524:VAL:HG23	17	0.3	0.1	0.31
(1,249)	1:A:407:HIS:HB3	1:A:410:LEU:H	17	0.29	0.1	0.3
(1,2654)	1:A:493:GLU:H	1:A:493:GLU:HB3	17	0.15	0.02	0.14
(1,2473)	1:A:458:SER:HB3	1:A:459:ASN:HA	16	1.08	0.32	1.23
(1,2263)	1:A:415:LYS:HE3	1:A:520:PHE:HZ	16	0.85	0.52	0.8
(1,25)	1:A:479:ARG:HG3	1:A:481:GLY:H	16	0.69	0.15	0.69
(1,2126)	1:A:529:LYS:HE3	1:A:531:HIS:HE1	16	0.62	0.22	0.58

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)	Median (Å)
(1,1188)	1:A:538:ALA:HB1	1:A:539:MET:HB3	16	0.56	0.16	0.57
(1,1188)	1:A:538:ALA:HB2	1:A:539:MET:HB3	16	0.56	0.16	0.57
(1,1188)	1:A:538:ALA:HB3	1:A:539:MET:HB3	16	0.56	0.16	0.57
(1,2145)	1:A:393:LYS:HG3	1:A:393:LYS:HE3	16	0.55	0.19	0.5
(1,2499)	1:A:466:LEU:HD11	1:A:467:HIS:HB3	16	0.5	0.21	0.46
(1,2499)	1:A:466:LEU:HD12	1:A:467:HIS:HB3	16	0.5	0.21	0.46
(1,2499)	1:A:466:LEU:HD13	1:A:467:HIS:HB3	16	0.5	0.21	0.46
(1,2499)	1:A:466:LEU:HD21	1:A:467:HIS:HB3	16	0.5	0.21	0.46
(1,2499)	1:A:466:LEU:HD22	1:A:467:HIS:HB3	16	0.5	0.21	0.46
(1,2499)	1:A:466:LEU:HD23	1:A:467:HIS:HB3	16	0.5	0.21	0.46
(1,2137)	1:A:392:GLN:HA	1:A:393:LYS:HB3	16	0.43	0.16	0.38
(1,636)	1:A:463:ARG:HB3	1:A:464:LEU:H	16	0.4	0.19	0.32
(1,385)	1:A:539:MET:H	1:A:539:MET:HB3	16	0.39	0.05	0.39
(1,2560)	1:A:480:GLN:HB3	1:A:481:GLY:H	16	0.36	0.1	0.36
(1,2369)	1:A:436:ARG:H	1:A:436:ARG:HB3	16	0.28	0.1	0.32
(1,2669)	1:A:495:SER:HB3	1:A:498:GLN:HB3	16	0.23	0.06	0.24
(1,2679)	1:A:498:GLN:HG3	1:A:499:LEU:H	16	0.16	0.03	0.16
(1,830)	1:A:532:ARG:HD3	1:A:535:ALA:H	15	1.18	0.24	1.14
(1,1768)	1:A:461:ASP:HA	1:A:462:CYS:HB3	15	0.81	0.32	0.96
(1,555)	1:A:542:LYS:H	1:A:542:LYS:HE3	15	0.72	0.51	0.91
(1,265)	1:A:482:SER:H	1:A:482:SER:HB3	15	0.69	0.3	0.76
(1,835)	1:A:415:LYS:H	1:A:415:LYS:HG3	15	0.56	0.17	0.64
(1,146)	1:A:508:SER:HB3	1:A:509:GLY:H	15	0.54	0.13	0.58
(1,2377)	1:A:438:GLU:HB3	1:A:439:LEU:H	15	0.52	0.14	0.55
(1,397)	1:A:536:ARG:H	1:A:536:ARG:HD3	15	0.47	0.35	0.31
(1,1136)	1:A:473:MET:HE1	1:A:482:SER:HB3	15	0.46	0.34	0.34
(1,1136)	1:A:473:MET:HE2	1:A:482:SER:HB3	15	0.46	0.34	0.34
(1,1136)	1:A:473:MET:HE3	1:A:482:SER:HB3	15	0.46	0.34	0.34
(1,523)	1:A:529:LYS:H	1:A:529:LYS:HE3	15	0.45	0.27	0.37
(1,1742)	1:A:479:ARG:HG3	1:A:479:ARG:HD3	15	0.36	0.05	0.37
(1,1920)	1:A:390:SER:HA	1:A:390:SER:HB3	15	0.36	0.02	0.36
(1,2472)	1:A:458:SER:HB3	1:A:459:ASN:H	15	0.29	0.09	0.33
(1,1850)	1:A:391:GLU:HA	1:A:391:GLU:HG3	15	0.15	0.03	0.15
(1,1927)	1:A:415:LYS:HA	1:A:415:LYS:HG3	15	0.15	0.01	0.15
(1,387)	1:A:539:MET:H	1:A:540:TRP:HB3	14	0.97	0.41	1.05
(1,1731)	1:A:532:ARG:HD3	1:A:533:LEU:H	14	0.86	0.44	0.93
(1,2257)	1:A:415:LYS:H	1:A:415:LYS:HE3	14	0.76	0.26	0.76
(1,1591)	1:A:531:HIS:HA	1:A:534:GLN:HB3	14	0.74	0.45	0.9
(1,1502)	1:A:466:LEU:HB3	1:A:466:LEU:HD21	14	0.6	0.01	0.6
(1,1502)	1:A:466:LEU:HB3	1:A:466:LEU:HD22	14	0.6	0.01	0.6
(1,1502)	1:A:466:LEU:HB3	1:A:466:LEU:HD23	14	0.6	0.01	0.6
(1,2571)	1:A:484:ASP:H	1:A:484:ASP:HB3	14	0.39	0.08	0.39

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)	Median (Å)
(1,2134)	1:A:392:GLN:H	1:A:392:GLN:HG3	14	0.37	0.11	0.36
(1,786)	1:A:471:GLN:HB3	1:A:472:ALA:H	14	0.3	0.17	0.31
(1,1723)	1:A:403:ARG:HD3	1:A:403:ARG:HH22	14	0.29	0.18	0.22
(1,910)	1:A:417:GLU:HG3	1:A:418:ALA:H	14	0.28	0.12	0.26
(1,2496)	1:A:466:LEU:HB3	1:A:469:VAL:HG11	14	0.26	0.19	0.2
(1,2496)	1:A:466:LEU:HB3	1:A:469:VAL:HG12	14	0.26	0.19	0.2
(1,2496)	1:A:466:LEU:HB3	1:A:469:VAL:HG13	14	0.26	0.19	0.2
(1,2496)	1:A:466:LEU:HB3	1:A:469:VAL:HG21	14	0.26	0.19	0.2
(1,2496)	1:A:466:LEU:HB3	1:A:469:VAL:HG22	14	0.26	0.19	0.2
(1,2496)	1:A:466:LEU:HB3	1:A:469:VAL:HG23	14	0.26	0.19	0.2
(1,1728)	1:A:532:ARG:HB3	1:A:532:ARG:HD3	14	0.25	0.07	0.24
(1,754)	1:A:479:ARG:H	1:A:480:GLN:HG3	13	1.2	0.17	1.18
(1,2130)	1:A:387:GLU:HB3	1:A:390:SER:HA	13	0.88	0.58	0.97
(1,1200)	1:A:532:ARG:HD3	1:A:535:ALA:HB1	13	0.83	0.19	0.9
(1,1200)	1:A:532:ARG:HD3	1:A:535:ALA:HB2	13	0.83	0.19	0.9
(1,1200)	1:A:532:ARG:HD3	1:A:535:ALA:HB3	13	0.83	0.19	0.9
(1,2122)	1:A:529:LYS:HG3	1:A:531:HIS:HE1	13	0.76	0.16	0.82
(1,2007)	1:A:462:CYS:HA	1:A:466:LEU:HB3	13	0.7	0.36	0.69
(1,2074)	1:A:393:LYS:HD3	1:A:395:TYR:HE1	13	0.69	0.34	0.65
(1,2074)	1:A:393:LYS:HD3	1:A:395:TYR:HE2	13	0.69	0.34	0.65
(1,1659)	1:A:480:GLN:HA	1:A:480:GLN:HG3	13	0.67	0.21	0.78
(1,2838)	1:A:542:LYS:HG3	1:A:542:LYS:HE3	13	0.6	0.23	0.66
(1,1656)	1:A:432:GLN:HG3	1:A:433:VAL:H	13	0.6	0.39	0.33
(1,1576)	1:A:462:CYS:HB3	1:A:506:LEU:HD11	13	0.58	0.25	0.58
(1,1576)	1:A:462:CYS:HB3	1:A:506:LEU:HD12	13	0.58	0.25	0.58
(1,1576)	1:A:462:CYS:HB3	1:A:506:LEU:HD13	13	0.58	0.25	0.58
(1,1599)	1:A:393:LYS:HD3	1:A:395:TYR:HD1	13	0.58	0.31	0.59
(1,1599)	1:A:393:LYS:HD3	1:A:395:TYR:HD2	13	0.58	0.31	0.59
(1,2837)	1:A:542:LYS:HA	1:A:542:LYS:HG3	13	0.56	0.22	0.61
(1,676)	1:A:436:ARG:H	1:A:436:ARG:HG3	13	0.54	0.24	0.53
(1,812)	1:A:390:SER:HB3	1:A:391:GLU:H	13	0.49	0.17	0.52
(1,789)	1:A:539:MET:HB3	1:A:540:TRP:H	13	0.49	0.15	0.5
(1,2241)	1:A:411:ARG:HA	1:A:411:ARG:HD3	13	0.45	0.17	0.48
(1,600)	1:A:403:ARG:HB3	1:A:403:ARG:HE	13	0.37	0.2	0.34
(1,535)	1:A:542:LYS:HB3	1:A:543:GLU:H	13	0.37	0.15	0.34
(1,2432)	1:A:453:ILE:HG13	1:A:454:LEU:H	13	0.35	0.23	0.18
(1,164)	1:A:465:SER:H	1:A:466:LEU:HB3	13	0.34	0.32	0.26
(1,2022)	1:A:505:SER:HA	1:A:505:SER:HB3	13	0.15	0.01	0.16
(1,1540)	1:A:490:LEU:HD11	1:A:512:ARG:HD3	12	1.02	0.38	1.02
(1,1540)	1:A:490:LEU:HD12	1:A:512:ARG:HD3	12	1.02	0.38	1.02
(1,1540)	1:A:490:LEU:HD13	1:A:512:ARG:HD3	12	1.02	0.38	1.02
(1,51)	1:A:436:ARG:HG3	1:A:437:GLY:H	12	0.93	0.19	0.98

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)	Median (Å)
(1,338)	1:A:503:THR:H	1:A:505:SER:HB3	12	0.86	0.7	0.8
(1,1532)	1:A:490:LEU:HD21	1:A:512:ARG:HD3	12	0.81	0.41	0.76
(1,1532)	1:A:490:LEU:HD22	1:A:512:ARG:HD3	12	0.81	0.41	0.76
(1,1532)	1:A:490:LEU:HD23	1:A:512:ARG:HD3	12	0.81	0.41	0.76
(1,2479)	1:A:463:ARG:HD3	1:A:464:LEU:H	12	0.61	0.42	0.43
(1,806)	1:A:434:HIS:H	1:A:438:GLU:HG3	12	0.61	0.34	0.6
(1,524)	1:A:529:LYS:H	1:A:532:ARG:HD3	12	0.58	0.17	0.52
(1,2495)	1:A:466:LEU:HB3	1:A:467:HIS:HB3	12	0.56	0.46	0.34
(1,1655)	1:A:432:GLN:HA	1:A:432:GLN:HG3	12	0.54	0.08	0.51
(1,2020)	1:A:504:ALA:HB1	1:A:505:SER:HB3	12	0.53	0.24	0.58
(1,2020)	1:A:504:ALA:HB2	1:A:505:SER:HB3	12	0.53	0.24	0.58
(1,2020)	1:A:504:ALA:HB3	1:A:505:SER:HB3	12	0.53	0.24	0.58
(1,511)	1:A:403:ARG:HD3	1:A:404:ALA:H	12	0.48	0.36	0.44
(1,2813)	1:A:532:ARG:HA	1:A:532:ARG:HG3	12	0.41	0.09	0.42
(1,1706)	1:A:393:LYS:HE3	1:A:394:PHE:H	12	0.39	0.15	0.42
(1,2757)	1:A:515:GLU:HG3	1:A:516:HIS:H	12	0.37	0.29	0.26
(1,2839)	1:A:542:LYS:HG3	1:A:543:GLU:H	12	0.37	0.19	0.3
(1,2344)	1:A:430:ASP:H	1:A:430:ASP:HB3	12	0.35	0.11	0.34
(1,2840)	1:A:543:GLU:HA	1:A:543:GLU:HG3	12	0.32	0.07	0.33
(1,652)	1:A:480:GLN:H	1:A:480:GLN:HG3	12	0.29	0.06	0.3
(1,553)	1:A:541:ARG:HB3	1:A:542:LYS:H	12	0.25	0.11	0.2
(1,2655)	1:A:493:GLU:H	1:A:493:GLU:HG3	12	0.22	0.09	0.2
(1,2152)	1:A:395:TYR:HB3	1:A:397:PHE:HA	12	0.22	0.08	0.21
(1,947)	1:A:462:CYS:H	1:A:462:CYS:HB3	12	0.21	0.03	0.23
(1,2599)	1:A:488:PRO:HD3	1:A:510:LEU:HG	12	0.2	0.04	0.22
(1,2816)	1:A:533:LEU:H	1:A:534:GLN:HG3	11	1.23	0.22	1.21
(1,54)	1:A:436:ARG:HD3	1:A:437:GLY:H	11	0.9	0.53	1.12
(1,2609)	1:A:490:LEU:HB3	1:A:512:ARG:HD3	11	0.87	0.38	1.01
(1,1794)	1:A:534:GLN:HB3	1:A:535:ALA:HA	11	0.82	0.01	0.81
(1,891)	1:A:393:LYS:H	1:A:393:LYS:HE3	11	0.81	0.32	0.85
(1,2827)	1:A:537:LYS:HG3	1:A:537:LYS:HE3	11	0.72	0.26	0.74
(1,1753)	1:A:512:ARG:H	1:A:512:ARG:HD3	11	0.71	0.41	0.98
(1,641)	1:A:501:SER:HB3	1:A:502:ASP:H	11	0.65	0.26	0.77
(1,2480)	1:A:463:ARG:HD3	1:A:506:LEU:HD21	11	0.6	0.19	0.59
(1,2480)	1:A:463:ARG:HD3	1:A:506:LEU:HD22	11	0.6	0.19	0.59
(1,2480)	1:A:463:ARG:HD3	1:A:506:LEU:HD23	11	0.6	0.19	0.59
(1,1090)	1:A:518:GLN:HG3	1:A:519:ILE:HD11	11	0.57	0.41	0.29
(1,1090)	1:A:518:GLN:HG3	1:A:519:ILE:HD12	11	0.57	0.41	0.29
(1,1090)	1:A:518:GLN:HG3	1:A:519:ILE:HD13	11	0.57	0.41	0.29
(1,756)	1:A:479:ARG:H	1:A:479:ARG:HD3	11	0.55	0.38	0.51
(1,679)	1:A:436:ARG:H	1:A:436:ARG:HD3	11	0.54	0.38	0.3
(1,1605)	1:A:539:MET:HA	1:A:542:LYS:HD3	11	0.48	0.26	0.37

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)	Median (Å)
(1,2741)	1:A:513:LEU:HD11	1:A:523:LYS:HE3	11	0.46	0.16	0.43
(1,2741)	1:A:513:LEU:HD12	1:A:523:LYS:HE3	11	0.46	0.16	0.43
(1,2741)	1:A:513:LEU:HD13	1:A:523:LYS:HE3	11	0.46	0.16	0.43
(1,2741)	1:A:513:LEU:HD21	1:A:523:LYS:HE3	11	0.46	0.16	0.43
(1,2741)	1:A:513:LEU:HD22	1:A:523:LYS:HE3	11	0.46	0.16	0.43
(1,2741)	1:A:513:LEU:HD23	1:A:523:LYS:HE3	11	0.46	0.16	0.43
(1,552)	1:A:542:LYS:H	1:A:542:LYS:HD3	11	0.4	0.14	0.4
(1,1670)	1:A:438:GLU:HA	1:A:438:GLU:HG3	11	0.39	0.21	0.5
(1,2372)	1:A:436:ARG:HB3	1:A:436:ARG:HD3	11	0.35	0.08	0.36
(1,2352)	1:A:431:PHE:HB3	1:A:432:GLN:H	11	0.35	0.14	0.32
(1,2681)	1:A:500:SER:H	1:A:500:SER:HB3	11	0.31	0.03	0.33
(1,1853)	1:A:436:ARG:HA	1:A:436:ARG:HG3	11	0.31	0.21	0.2
(1,2538)	1:A:473:MET:HE1	1:A:485:CYS:HB3	11	0.31	0.09	0.31
(1,2538)	1:A:473:MET:HE2	1:A:485:CYS:HB3	11	0.31	0.09	0.31
(1,2538)	1:A:473:MET:HE3	1:A:485:CYS:HB3	11	0.31	0.09	0.31
(1,2821)	1:A:534:GLN:H	1:A:534:GLN:HG3	11	0.3	0.08	0.3
(1,2508)	1:A:468:GLN:HA	1:A:468:GLN:HG3	11	0.27	0.11	0.24
(1,2252)	1:A:414:GLU:H	1:A:423:ASP:HB3	11	0.27	0.11	0.26
(1,421)	1:A:466:LEU:HB3	1:A:468:GLN:H	11	0.25	0.07	0.25
(1,1844)	1:A:479:ARG:HA	1:A:479:ARG:HG3	11	0.25	0.06	0.24
(1,2141)	1:A:393:LYS:H	1:A:393:LYS:HG3	11	0.23	0.13	0.16
(1,484)	1:A:419:LEU:H	1:A:420:GLY:HA3	11	0.23	0.03	0.23
(1,2371)	1:A:436:ARG:HB3	1:A:436:ARG:HG3	11	0.2	0.07	0.2
(1,2399)	1:A:443:GLN:HG3	1:A:443:GLN:HE21	11	0.2	0.02	0.2
(1,2399)	1:A:443:GLN:HG3	1:A:443:GLN:HE22	11	0.2	0.02	0.2
(1,1993)	1:A:501:SER:HA	1:A:501:SER:HB3	11	0.18	0.01	0.19
(1,2408)	1:A:446:ILE:HG21	1:A:446:ILE:HG13	11	0.12	0.01	0.12
(1,2408)	1:A:446:ILE:HG22	1:A:446:ILE:HG13	11	0.12	0.01	0.12
(1,2408)	1:A:446:ILE:HG23	1:A:446:ILE:HG13	11	0.12	0.01	0.12
(1,2546)	1:A:476:ASN:HB3	1:A:479:ARG:HG3	10	1.04	0.51	1.08
(1,1791)	1:A:538:ALA:HA	1:A:541:ARG:HB3	10	0.83	0.52	0.86
(1,2621)	1:A:490:LEU:HD11	1:A:512:ARG:HD3	10	0.83	0.26	0.87
(1,2621)	1:A:490:LEU:HD12	1:A:512:ARG:HD3	10	0.83	0.26	0.87
(1,2621)	1:A:490:LEU:HD13	1:A:512:ARG:HD3	10	0.83	0.26	0.87
(1,2621)	1:A:490:LEU:HD21	1:A:512:ARG:HD3	10	0.83	0.26	0.87
(1,2621)	1:A:490:LEU:HD22	1:A:512:ARG:HD3	10	0.83	0.26	0.87
(1,2621)	1:A:490:LEU:HD23	1:A:512:ARG:HD3	10	0.83	0.26	0.87
(1,2481)	1:A:463:ARG:HE	1:A:502:ASP:HB3	10	0.83	0.31	0.8
(1,1609)	1:A:394:PHE:HD1	1:A:537:LYS:HD3	10	0.72	0.57	0.49
(1,1609)	1:A:394:PHE:HD2	1:A:537:LYS:HD3	10	0.72	0.57	0.49
(1,2398)	1:A:443:GLN:HB3	1:A:446:ILE:HG21	10	0.65	0.45	0.84
(1,2398)	1:A:443:GLN:HB3	1:A:446:ILE:HG22	10	0.65	0.45	0.84

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)	Median (Å)
(1,2398)	1:A:443:GLN:HB3	1:A:446:ILE:HG23	10	0.65	0.45	0.84
(1,368)	1:A:389:SER:H	1:A:389:SER:HB3	10	0.65	0.11	0.61
(1,678)	1:A:436:ARG:H	1:A:438:GLU:HG3	10	0.6	0.59	0.24
(1,653)	1:A:479:ARG:HD3	1:A:480:GLN:H	10	0.56	0.4	0.42
(1,790)	1:A:540:TRP:H	1:A:540:TRP:HB3	10	0.53	0.06	0.52
(1,1709)	1:A:542:LYS:HB3	1:A:542:LYS:HE3	10	0.47	0.21	0.45
(1,2346)	1:A:430:ASP:HB3	1:A:431:PHE:H	10	0.43	0.14	0.38
(1,1616)	1:A:415:LYS:HD3	1:A:520:PHE:HE1	10	0.34	0.16	0.33
(1,1616)	1:A:415:LYS:HD3	1:A:520:PHE:HE2	10	0.34	0.16	0.33
(1,2342)	1:A:429:GLU:H	1:A:429:GLU:HG3	10	0.34	0.11	0.37
(1,2478)	1:A:463:ARG:H	1:A:463:ARG:HD3	10	0.33	0.16	0.26
(1,1739)	1:A:436:ARG:HG3	1:A:436:ARG:HD3	10	0.32	0.02	0.32
(1,1618)	1:A:463:ARG:HB3	1:A:506:LEU:HD11	10	0.31	0.15	0.29
(1,1618)	1:A:463:ARG:HB3	1:A:506:LEU:HD12	10	0.31	0.15	0.29
(1,1618)	1:A:463:ARG:HB3	1:A:506:LEU:HD13	10	0.31	0.15	0.29
(1,2723)	1:A:512:ARG:HB3	1:A:512:ARG:HD3	10	0.28	0.05	0.29
(1,2555)	1:A:479:ARG:HB3	1:A:479:ARG:HD3	10	0.21	0.07	0.18
(1,1572)	1:A:479:ARG:HG3	1:A:480:GLN:H	10	0.18	0.06	0.16
(1,2576)	1:A:485:CYS:H	1:A:485:CYS:HB3	10	0.18	0.06	0.16
(1,2133)	1:A:392:GLN:H	1:A:392:GLN:HB3	9	0.79	0.23	0.82
(1,1925)	1:A:427:PHE:HA	1:A:428:CYS:HB3	9	0.66	0.37	0.89
(1,2129)	1:A:387:GLU:HB3	1:A:390:SER:H	9	0.47	0.13	0.44
(1,2758)	1:A:515:GLU:HG3	1:A:520:PHE:HE1	9	0.42	0.26	0.35
(1,2758)	1:A:515:GLU:HG3	1:A:520:PHE:HE2	9	0.42	0.26	0.35
(1,579)	1:A:532:ARG:HB3	1:A:533:LEU:H	9	0.41	0.23	0.26
(1,2825)	1:A:537:LYS:H	1:A:537:LYS:HB3	9	0.36	0.08	0.39
(1,2353)	1:A:431:PHE:HB3	1:A:433:VAL:H	9	0.35	0.17	0.32
(1,2569)	1:A:483:PRO:HB3	1:A:485:CYS:H	9	0.31	0.12	0.3
(1,1633)	1:A:474:MET:HB3	1:A:474:MET:HG3	9	0.3	0.02	0.3
(1,337)	1:A:501:SER:HB3	1:A:503:THR:H	9	0.28	0.08	0.26
(1,2143)	1:A:393:LYS:HB3	1:A:393:LYS:HD3	9	0.26	0.15	0.23
(1,2808)	1:A:529:LYS:HB3	1:A:531:HIS:HE1	9	0.24	0.11	0.24
(1,431)	1:A:534:GLN:H	1:A:534:GLN:HB3	9	0.24	0.04	0.23
(1,1607)	1:A:537:LYS:HA	1:A:537:LYS:HD3	9	0.23	0.06	0.2
(1,2417)	1:A:448:HIS:H	1:A:448:HIS:HB3	9	0.19	0.09	0.15
(1,2083)	1:A:540:TRP:HB3	1:A:540:TRP:HD1	9	0.19	0.03	0.2
(1,1669)	1:A:438:GLU:HB3	1:A:438:GLU:HG3	9	0.13	0.01	0.13
(1,2591)	1:A:487:ILE:HG21	1:A:513:LEU:HB3	8	0.79	0.31	0.86
(1,2591)	1:A:487:ILE:HG22	1:A:513:LEU:HB3	8	0.79	0.31	0.86
(1,2591)	1:A:487:ILE:HG23	1:A:513:LEU:HB3	8	0.79	0.31	0.86
(1,358)	1:A:387:GLU:HG3	1:A:390:SER:H	8	0.79	0.45	0.81
(1,186)	1:A:507:LEU:H	1:A:508:SER:HB3	8	0.71	0.5	0.73

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)	Median (Å)
(1,1600)	1:A:393:LYS:H	1:A:393:LYS:HD3	8	0.66	0.41	0.72
(1,39)	1:A:435:GLY:H	1:A:438:GLU:HG3	8	0.53	0.32	0.32
(1,2052)	1:A:462:CYS:HB3	1:A:503:THR:HA	8	0.52	0.25	0.46
(1,2354)	1:A:432:GLN:H	1:A:432:GLN:HB3	8	0.51	0.16	0.59
(1,394)	1:A:536:ARG:H	1:A:536:ARG:HB3	8	0.48	0.04	0.5
(1,1611)	1:A:537:LYS:HD3	1:A:538:ALA:H	8	0.48	0.33	0.38
(1,1988)	1:A:403:ARG:HA	1:A:403:ARG:HD3	8	0.48	0.27	0.41
(1,2253)	1:A:414:GLU:HA	1:A:414:GLU:HG3	8	0.43	0.12	0.48
(1,538)	1:A:501:SER:H	1:A:501:SER:HB3	8	0.39	0.04	0.4
(1,2132)	1:A:388:SER:HA	1:A:388:SER:HB3	8	0.38	0.01	0.38
(1,2188)	1:A:400:LEU:HB3	1:A:401:HIS:H	8	0.37	0.17	0.34
(1,2131)	1:A:388:SER:H	1:A:388:SER:HB3	8	0.36	0.08	0.39
(1,2528)	1:A:471:GLN:HG3	1:A:471:GLN:HE21	8	0.34	0.11	0.36
(1,2528)	1:A:471:GLN:HG3	1:A:471:GLN:HE22	8	0.34	0.11	0.36
(1,2682)	1:A:500:SER:HB3	1:A:501:SER:H	8	0.32	0.26	0.15
(1,2485)	1:A:464:LEU:HD11	1:A:467:HIS:HB3	8	0.29	0.35	0.14
(1,2485)	1:A:464:LEU:HD12	1:A:467:HIS:HB3	8	0.29	0.35	0.14
(1,2485)	1:A:464:LEU:HD13	1:A:467:HIS:HB3	8	0.29	0.35	0.14
(1,98)	1:A:417:GLU:HG3	1:A:423:ASP:H	8	0.29	0.12	0.24
(1,2537)	1:A:473:MET:HG3	1:A:474:MET:H	8	0.19	0.09	0.16
(1,2184)	1:A:400:LEU:H	1:A:400:LEU:HB3	8	0.18	0.1	0.14
(1,2318)	1:A:421:VAL:H	1:A:422:PRO:HD3	8	0.15	0.03	0.14
(1,2211)	1:A:406:GLU:HB3	1:A:409:ALA:HB1	8	0.13	0.02	0.14
(1,2211)	1:A:406:GLU:HB3	1:A:409:ALA:HB2	8	0.13	0.02	0.14
(1,2211)	1:A:406:GLU:HB3	1:A:409:ALA:HB3	8	0.13	0.02	0.14
(1,2643)	1:A:492:LEU:HG	1:A:515:GLU:HG3	7	1.18	0.5	1.48
(1,1890)	1:A:431:PHE:HA	1:A:432:GLN:HG3	7	0.96	0.37	1.03
(1,1610)	1:A:394:PHE:HE1	1:A:537:LYS:HD3	7	0.79	0.52	1.07
(1,1610)	1:A:394:PHE:HE2	1:A:537:LYS:HD3	7	0.79	0.52	1.07
(1,2687)	1:A:502:ASP:HB3	1:A:505:SER:HB3	7	0.69	0.32	0.66
(1,2830)	1:A:538:ALA:HB1	1:A:541:ARG:HD3	7	0.68	0.28	0.68
(1,2830)	1:A:538:ALA:HB2	1:A:541:ARG:HD3	7	0.68	0.28	0.68
(1,2830)	1:A:538:ALA:HB3	1:A:541:ARG:HD3	7	0.68	0.28	0.68
(1,2239)	1:A:411:ARG:H	1:A:411:ARG:HD3	7	0.68	0.21	0.82
(1,2341)	1:A:428:CYS:HA	1:A:429:GLU:HB3	7	0.66	0.34	0.59
(1,1705)	1:A:393:LYS:HE3	1:A:395:TYR:HE1	7	0.61	0.41	0.33
(1,1705)	1:A:393:LYS:HE3	1:A:395:TYR:HE2	7	0.61	0.41	0.33
(1,2835)	1:A:541:ARG:HB3	1:A:541:ARG:HD3	7	0.6	0.25	0.57
(1,1235)	1:A:450:ALA:HB1	1:A:536:ARG:HD3	7	0.59	0.3	0.59
(1,1235)	1:A:450:ALA:HB2	1:A:536:ARG:HD3	7	0.59	0.3	0.59
(1,1235)	1:A:450:ALA:HB3	1:A:536:ARG:HD3	7	0.59	0.3	0.59
(1,1604)	1:A:542:LYS:HA	1:A:542:LYS:HD3	7	0.57	0.25	0.49

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)	Median (Å)
(1,691)	1:A:432:GLN:H	1:A:432:GLN:HG3	7	0.49	0.21	0.6
(1,2409)	1:A:446:ILE:HG21	1:A:473:MET:HG3	7	0.43	0.19	0.56
(1,2409)	1:A:446:ILE:HG22	1:A:473:MET:HG3	7	0.43	0.19	0.56
(1,2409)	1:A:446:ILE:HG23	1:A:473:MET:HG3	7	0.43	0.19	0.56
(1,1598)	1:A:393:LYS:HA	1:A:393:LYS:HD3	7	0.38	0.24	0.27
(1,1707)	1:A:542:LYS:HG3	1:A:542:LYS:HE3	7	0.33	0.1	0.3
(1,1881)	1:A:536:ARG:HA	1:A:536:ARG:HD3	7	0.31	0.12	0.28
(1,2831)	1:A:539:MET:HG3	1:A:540:TRP:H	7	0.31	0.08	0.33
(1,2648)	1:A:492:LEU:HD11	1:A:515:GLU:HG3	7	0.3	0.09	0.36
(1,2648)	1:A:492:LEU:HD12	1:A:515:GLU:HG3	7	0.3	0.09	0.36
(1,2648)	1:A:492:LEU:HD13	1:A:515:GLU:HG3	7	0.3	0.09	0.36
(1,2648)	1:A:492:LEU:HD21	1:A:515:GLU:HG3	7	0.3	0.09	0.36
(1,2648)	1:A:492:LEU:HD22	1:A:515:GLU:HG3	7	0.3	0.09	0.36
(1,2648)	1:A:492:LEU:HD23	1:A:515:GLU:HG3	7	0.3	0.09	0.36
(1,1198)	1:A:532:ARG:HB3	1:A:535:ALA:HB1	7	0.27	0.08	0.3
(1,1198)	1:A:532:ARG:HB3	1:A:535:ALA:HB2	7	0.27	0.08	0.3
(1,1198)	1:A:532:ARG:HB3	1:A:535:ALA:HB3	7	0.27	0.08	0.3
(1,1911)	1:A:389:SER:HA	1:A:389:SER:HB3	7	0.27	0.01	0.27
(1,2699)	1:A:507:LEU:HD11	1:A:512:ARG:HD3	7	0.22	0.05	0.2
(1,2699)	1:A:507:LEU:HD12	1:A:512:ARG:HD3	7	0.22	0.05	0.2
(1,2699)	1:A:507:LEU:HD13	1:A:512:ARG:HD3	7	0.22	0.05	0.2
(1,2699)	1:A:507:LEU:HD21	1:A:512:ARG:HD3	7	0.22	0.05	0.2
(1,2699)	1:A:507:LEU:HD22	1:A:512:ARG:HD3	7	0.22	0.05	0.2
(1,2699)	1:A:507:LEU:HD23	1:A:512:ARG:HD3	7	0.22	0.05	0.2
(1,2824)	1:A:534:GLN:HG3	1:A:535:ALA:HB1	7	0.2	0.07	0.16
(1,2824)	1:A:534:GLN:HG3	1:A:535:ALA:HB2	7	0.2	0.07	0.16
(1,2824)	1:A:534:GLN:HG3	1:A:535:ALA:HB3	7	0.2	0.07	0.16
(1,2812)	1:A:531:HIS:HA	1:A:534:GLN:HG3	7	0.19	0.04	0.2
(1,2558)	1:A:480:GLN:H	1:A:480:GLN:HB3	7	0.18	0.07	0.17
(1,2565)	1:A:482:SER:H	1:A:483:PRO:HD3	7	0.15	0.02	0.14
(1,1843)	1:A:502:ASP:HA	1:A:505:SER:HB3	6	1.03	0.12	1.05
(1,129)	1:A:505:SER:H	1:A:505:SER:HB3	6	0.85	0.04	0.85
(1,2265)	1:A:415:LYS:HE3	1:A:524:VAL:HG11	6	0.81	0.13	0.82
(1,2265)	1:A:415:LYS:HE3	1:A:524:VAL:HG12	6	0.81	0.13	0.82
(1,2265)	1:A:415:LYS:HE3	1:A:524:VAL:HG13	6	0.81	0.13	0.82
(1,2265)	1:A:415:LYS:HE3	1:A:524:VAL:HG21	6	0.81	0.13	0.82
(1,2265)	1:A:415:LYS:HE3	1:A:524:VAL:HG22	6	0.81	0.13	0.82
(1,2265)	1:A:415:LYS:HE3	1:A:524:VAL:HG23	6	0.81	0.13	0.82
(1,2834)	1:A:541:ARG:HA	1:A:541:ARG:HD3	6	0.75	0.28	0.92
(1,1332)	1:A:398:VAL:HG11	1:A:449:SER:HB3	6	0.65	0.22	0.7
(1,1332)	1:A:398:VAL:HG12	1:A:449:SER:HB3	6	0.65	0.22	0.7
(1,1332)	1:A:398:VAL:HG13	1:A:449:SER:HB3	6	0.65	0.22	0.7

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)	Median (Å)
(1,1121)	1:A:536:ARG:HD3	1:A:539:MET:HE1	6	0.6	0.21	0.62
(1,1121)	1:A:536:ARG:HD3	1:A:539:MET:HE2	6	0.6	0.21	0.62
(1,1121)	1:A:536:ARG:HD3	1:A:539:MET:HE3	6	0.6	0.21	0.62
(1,2547)	1:A:476:ASN:HB3	1:A:480:GLN:H	6	0.51	0.23	0.54
(1,818)	1:A:505:SER:HB3	1:A:506:LEU:H	6	0.47	0.1	0.46
(1,2389)	1:A:442:LEU:HD11	1:A:443:GLN:HG3	6	0.45	0.2	0.41
(1,2389)	1:A:442:LEU:HD12	1:A:443:GLN:HG3	6	0.45	0.2	0.41
(1,2389)	1:A:442:LEU:HD13	1:A:443:GLN:HG3	6	0.45	0.2	0.41
(1,2389)	1:A:442:LEU:HD21	1:A:443:GLN:HG3	6	0.45	0.2	0.41
(1,2389)	1:A:442:LEU:HD22	1:A:443:GLN:HG3	6	0.45	0.2	0.41
(1,2389)	1:A:442:LEU:HD23	1:A:443:GLN:HG3	6	0.45	0.2	0.41
(1,1730)	1:A:531:HIS:HD2	1:A:532:ARG:HD3	6	0.43	0.21	0.43
(1,2251)	1:A:414:GLU:H	1:A:414:GLU:HG3	6	0.42	0.05	0.42
(1,1740)	1:A:436:ARG:HA	1:A:436:ARG:HD3	6	0.36	0.18	0.3
(1,2021)	1:A:505:SER:HB3	1:A:506:LEU:HG	6	0.35	0.19	0.35
(1,2559)	1:A:480:GLN:HB3	1:A:480:GLN:HE21	6	0.34	0.08	0.38
(1,2559)	1:A:480:GLN:HB3	1:A:480:GLN:HE22	6	0.34	0.08	0.38
(1,1275)	1:A:398:VAL:HG21	1:A:449:SER:HB3	6	0.32	0.14	0.29
(1,1275)	1:A:398:VAL:HG22	1:A:449:SER:HB3	6	0.32	0.14	0.29
(1,1275)	1:A:398:VAL:HG23	1:A:449:SER:HB3	6	0.32	0.14	0.29
(1,2536)	1:A:473:MET:HB3	1:A:474:MET:H	6	0.28	0.08	0.26
(1,2118)	1:A:407:HIS:HB3	1:A:407:HIS:HE1	6	0.18	0.14	0.12
(1,779)	1:A:518:GLN:HG3	1:A:520:PHE:H	5	1.4	0.05	1.37
(1,1625)	1:A:514:ASP:HA	1:A:515:GLU:HB3	5	0.8	0.33	1.02
(1,1990)	1:A:505:SER:HA	1:A:508:SER:HB3	5	0.72	0.16	0.63
(1,1962)	1:A:462:CYS:HB3	1:A:463:ARG:HA	5	0.67	0.02	0.67
(1,1661)	1:A:518:GLN:HG3	1:A:519:ILE:HA	5	0.58	0.01	0.59
(1,2532)	1:A:472:ALA:HB1	1:A:475:SER:HB3	5	0.48	0.2	0.57
(1,2532)	1:A:472:ALA:HB2	1:A:475:SER:HB3	5	0.48	0.2	0.57
(1,2532)	1:A:472:ALA:HB3	1:A:475:SER:HB3	5	0.48	0.2	0.57
(1,1608)	1:A:534:GLN:HA	1:A:537:LYS:HD3	5	0.46	0.23	0.31
(1,2343)	1:A:429:GLU:HG3	1:A:430:ASP:H	5	0.41	0.21	0.44
(1,2828)	1:A:537:LYS:HG3	1:A:538:ALA:H	5	0.41	0.15	0.37
(1,2139)	1:A:392:GLN:HG3	1:A:393:LYS:H	5	0.41	0.35	0.27
(1,68)	1:A:518:GLN:HG3	1:A:519:ILE:H	5	0.4	0.07	0.37
(1,2638)	1:A:492:LEU:H	1:A:515:GLU:HG3	5	0.39	0.13	0.38
(1,1603)	1:A:536:ARG:HB3	1:A:537:LYS:H	5	0.38	0.22	0.35
(1,1928)	1:A:415:LYS:HA	1:A:415:LYS:HD3	5	0.36	0.09	0.4
(1,2542)	1:A:475:SER:HB3	1:A:476:ASN:H	5	0.32	0.07	0.33
(1,1701)	1:A:393:LYS:HG3	1:A:393:LYS:HE3	5	0.31	0.18	0.25
(1,2437)	1:A:454:LEU:H	1:A:489:PHE:HB3	5	0.29	0.06	0.29
(1,2561)	1:A:480:GLN:HB3	1:A:482:SER:H	5	0.27	0.17	0.15

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)	Median (Å)
(1,264)	1:A:480:GLN:HG3	1:A:482:SER:H	5	0.26	0.12	0.22
(1,2407)	1:A:446:ILE:H	1:A:446:ILE:HG13	5	0.26	0.05	0.25
(1,2563)	1:A:480:GLN:HG3	1:A:480:GLN:HE21	5	0.23	0.08	0.19
(1,2563)	1:A:480:GLN:HG3	1:A:480:GLN:HE22	5	0.23	0.08	0.19
(1,1765)	1:A:402:ALA:HA	1:A:403:ARG:HB3	5	0.2	0.05	0.22
(1,2365)	1:A:434:HIS:H	1:A:434:HIS:HB3	5	0.19	0.02	0.19
(1,137)	1:A:522:ARG:HB3	1:A:526:ASN:H	5	0.15	0.04	0.14
(1,2578)	1:A:485:CYS:HB3	1:A:486:VAL:H	5	0.15	0.01	0.15
(1,1550)	1:A:522:ARG:HG3	1:A:523:LYS:H	5	0.12	0.0	0.12
(1,1715)	1:A:529:LYS:HG3	1:A:529:LYS:HE3	4	0.83	0.22	0.8
(1,108)	1:A:526:ASN:HD21	1:A:529:LYS:HE3	4	0.57	0.24	0.57
(1,108)	1:A:526:ASN:HD22	1:A:529:LYS:HE3	4	0.57	0.24	0.57
(1,1704)	1:A:393:LYS:HA	1:A:393:LYS:HE3	4	0.55	0.3	0.52
(1,2144)	1:A:393:LYS:HB3	1:A:393:LYS:HE3	4	0.51	0.16	0.45
(1,280)	1:A:527:THR:H	1:A:529:LYS:HG3	4	0.5	0.4	0.42
(1,768)	1:A:537:LYS:H	1:A:537:LYS:HD3	4	0.43	0.15	0.43
(1,2385)	1:A:439:LEU:HD11	1:A:444:ASP:HB3	4	0.42	0.21	0.41
(1,2385)	1:A:439:LEU:HD12	1:A:444:ASP:HB3	4	0.42	0.21	0.41
(1,2385)	1:A:439:LEU:HD13	1:A:444:ASP:HB3	4	0.42	0.21	0.41
(1,2385)	1:A:439:LEU:HD21	1:A:444:ASP:HB3	4	0.42	0.21	0.41
(1,2385)	1:A:439:LEU:HD22	1:A:444:ASP:HB3	4	0.42	0.21	0.41
(1,2385)	1:A:439:LEU:HD23	1:A:444:ASP:HB3	4	0.42	0.21	0.41
(1,1592)	1:A:466:LEU:HB3	1:A:467:HIS:HB3	4	0.39	0.18	0.36
(1,2128)	1:A:387:GLU:HB3	1:A:388:SER:H	4	0.38	0.11	0.34
(1,1717)	1:A:526:ASN:HA	1:A:529:LYS:HE3	4	0.37	0.04	0.37
(1,763)	1:A:393:LYS:HD3	1:A:394:PHE:H	4	0.34	0.04	0.33
(1,2836)	1:A:541:ARG:HG3	1:A:541:ARG:HE	4	0.31	0.04	0.32
(1,2262)	1:A:415:LYS:HE3	1:A:520:PHE:HE1	4	0.3	0.17	0.22
(1,2262)	1:A:415:LYS:HE3	1:A:520:PHE:HE2	4	0.3	0.17	0.22
(1,2615)	1:A:490:LEU:HD11	1:A:494:SER:HB3	4	0.3	0.18	0.29
(1,2615)	1:A:490:LEU:HD12	1:A:494:SER:HB3	4	0.3	0.18	0.29
(1,2615)	1:A:490:LEU:HD13	1:A:494:SER:HB3	4	0.3	0.18	0.29
(1,2615)	1:A:490:LEU:HD21	1:A:494:SER:HB3	4	0.3	0.18	0.29
(1,2615)	1:A:490:LEU:HD22	1:A:494:SER:HB3	4	0.3	0.18	0.29
(1,2615)	1:A:490:LEU:HD23	1:A:494:SER:HB3	4	0.3	0.18	0.29
(1,2541)	1:A:475:SER:H	1:A:476:ASN:HB3	4	0.28	0.03	0.27
(1,2347)	1:A:430:ASP:HB3	1:A:432:GLN:H	4	0.27	0.11	0.24
(1,2832)	1:A:541:ARG:H	1:A:541:ARG:HG3	4	0.26	0.06	0.27
(1,2019)	1:A:505:SER:HB3	1:A:506:LEU:HD21	4	0.26	0.11	0.22
(1,2019)	1:A:505:SER:HB3	1:A:506:LEU:HD22	4	0.26	0.11	0.22
(1,2019)	1:A:505:SER:HB3	1:A:506:LEU:HD23	4	0.26	0.11	0.22
(1,699)	1:A:541:ARG:HB3	1:A:541:ARG:HE	4	0.22	0.08	0.2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)	Median (Å)
(1,1636)	1:A:471:GLN:HA	1:A:474:MET:HB3	4	0.21	0.07	0.2
(1,2138)	1:A:392:GLN:HG3	1:A:392:GLN:HE21	4	0.2	0.02	0.22
(1,2138)	1:A:392:GLN:HG3	1:A:392:GLN:HE22	4	0.2	0.02	0.22
(1,2732)	1:A:513:LEU:HB3	1:A:520:PHE:HD1	4	0.2	0.04	0.2
(1,2732)	1:A:513:LEU:HB3	1:A:520:PHE:HD2	4	0.2	0.04	0.2
(1,2810)	1:A:530:PRO:HA	1:A:533:LEU:HB3	4	0.2	0.06	0.18
(1,2256)	1:A:414:GLU:HG3	1:A:415:LYS:H	4	0.19	0.06	0.18
(1,1729)	1:A:532:ARG:HA	1:A:532:ARG:HD3	4	0.18	0.1	0.14
(1,2405)	1:A:444:ASP:H	1:A:444:ASP:HB3	4	0.18	0.04	0.19
(1,1574)	1:A:407:HIS:HB3	1:A:408:ILE:HG13	4	0.16	0.05	0.14
(1,1708)	1:A:542:LYS:HD3	1:A:542:LYS:HE3	4	0.15	0.02	0.16
(1,1577)	1:A:456:LEU:HG	1:A:462:CYS:HB3	3	0.81	0.18	0.79
(1,464)	1:A:492:LEU:H	1:A:515:GLU:HB3	3	0.69	0.05	0.7
(1,205)	1:A:482:SER:HB3	1:A:485:CYS:H	3	0.69	0.49	0.34
(1,2029)	1:A:389:SER:H	1:A:390:SER:HB3	3	0.67	0.34	0.7
(1,359)	1:A:390:SER:H	1:A:390:SER:HB3	3	0.64	0.07	0.59
(1,1710)	1:A:542:LYS:HA	1:A:542:LYS:HE3	3	0.64	0.06	0.63
(1,2686)	1:A:502:ASP:HB3	1:A:505:SER:H	3	0.63	0.04	0.64
(1,2829)	1:A:538:ALA:HB1	1:A:539:MET:HG3	3	0.63	0.38	0.52
(1,2829)	1:A:538:ALA:HB2	1:A:539:MET:HG3	3	0.63	0.38	0.52
(1,2829)	1:A:538:ALA:HB3	1:A:539:MET:HG3	3	0.63	0.38	0.52
(1,1996)	1:A:491:PRO:HA	1:A:515:GLU:HB3	3	0.62	0.04	0.59
(1,2540)	1:A:475:SER:H	1:A:475:SER:HB3	3	0.56	0.02	0.57
(1,2135)	1:A:392:GLN:HA	1:A:392:GLN:HG3	3	0.55	0.05	0.58
(1,53)	1:A:437:GLY:H	1:A:438:GLU:HG3	3	0.55	0.11	0.47
(1,2416)	1:A:447:ASP:HB3	1:A:448:HIS:H	3	0.53	0.16	0.62
(1,2156)	1:A:396:ASN:HB3	1:A:397:PHE:HE1	3	0.48	0.32	0.29
(1,2156)	1:A:396:ASN:HB3	1:A:397:PHE:HE2	3	0.48	0.32	0.29
(1,2238)	1:A:411:ARG:H	1:A:411:ARG:HB3	3	0.48	0.05	0.46
(1,212)	1:A:508:SER:H	1:A:508:SER:HB3	3	0.45	0.02	0.44
(1,1803)	1:A:529:LYS:HA	1:A:529:LYS:HE3	3	0.42	0.08	0.46
(1,559)	1:A:463:ARG:HB3	1:A:463:ARG:HE	3	0.41	0.2	0.44
(1,2482)	1:A:464:LEU:HA	1:A:467:HIS:HB3	3	0.4	0.13	0.49
(1,2754)	1:A:514:ASP:HB3	1:A:517:SER:HB3	3	0.37	0.05	0.36
(1,508)	1:A:403:ARG:HB3	1:A:404:ALA:H	3	0.34	0.04	0.35
(1,2146)	1:A:393:LYS:HG3	1:A:394:PHE:H	3	0.34	0.13	0.39
(1,1718)	1:A:536:ARG:HB3	1:A:536:ARG:HD3	3	0.34	0.01	0.35
(1,2163)	1:A:397:PHE:HB3	1:A:453:ILE:H	3	0.34	0.12	0.41
(1,1262)	1:A:527:THR:HG21	1:A:529:LYS:HG3	3	0.33	0.18	0.21
(1,1262)	1:A:527:THR:HG22	1:A:529:LYS:HG3	3	0.33	0.18	0.21
(1,1262)	1:A:527:THR:HG23	1:A:529:LYS:HG3	3	0.33	0.18	0.21
(1,1732)	1:A:541:ARG:HB3	1:A:541:ARG:HD3	3	0.33	0.25	0.19

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)	Median (Å)
(1,2760)	1:A:517:SER:HB3	1:A:518:GLN:H	3	0.3	0.1	0.37
(1,2433)	1:A:453:ILE:HG13	1:A:487:ILE:HD11	3	0.28	0.11	0.24
(1,2433)	1:A:453:ILE:HG13	1:A:487:ILE:HD12	3	0.28	0.11	0.24
(1,2433)	1:A:453:ILE:HG13	1:A:487:ILE:HD13	3	0.28	0.11	0.24
(1,2756)	1:A:515:GLU:HA	1:A:515:GLU:HG3	3	0.27	0.03	0.26
(1,2175)	1:A:398:VAL:HG11	1:A:427:PHE:HB3	3	0.25	0.17	0.15
(1,2175)	1:A:398:VAL:HG12	1:A:427:PHE:HB3	3	0.25	0.17	0.15
(1,2175)	1:A:398:VAL:HG13	1:A:427:PHE:HB3	3	0.25	0.17	0.15
(1,2175)	1:A:398:VAL:HG21	1:A:427:PHE:HB3	3	0.25	0.17	0.15
(1,2175)	1:A:398:VAL:HG22	1:A:427:PHE:HB3	3	0.25	0.17	0.15
(1,2175)	1:A:398:VAL:HG23	1:A:427:PHE:HB3	3	0.25	0.17	0.15
(1,2242)	1:A:411:ARG:HB3	1:A:412:VAL:H	3	0.25	0.0	0.25
(1,2406)	1:A:444:ASP:HB3	1:A:445:ALA:H	3	0.24	0.05	0.26
(1,2674)	1:A:496:PRO:HD3	1:A:516:HIS:HE1	3	0.24	0.07	0.26
(1,345)	1:A:467:HIS:H	1:A:467:HIS:HB3	3	0.23	0.02	0.22
(1,1000)	1:A:515:GLU:H	1:A:515:GLU:HB3	3	0.23	0.03	0.21
(1,606)	1:A:438:GLU:H	1:A:438:GLU:HG3	3	0.22	0.05	0.19
(1,172)	1:A:403:ARG:HB3	1:A:405:ASP:H	3	0.22	0.03	0.23
(1,2200)	1:A:402:ALA:HB1	1:A:460:PHE:HB3	3	0.21	0.12	0.13
(1,2200)	1:A:402:ALA:HB2	1:A:460:PHE:HB3	3	0.21	0.12	0.13
(1,2200)	1:A:402:ALA:HB3	1:A:460:PHE:HB3	3	0.21	0.12	0.13
(1,2008)	1:A:462:CYS:HA	1:A:465:SER:HB3	3	0.2	0.07	0.19
(1,2387)	1:A:442:LEU:HB3	1:A:443:GLN:H	3	0.2	0.06	0.23
(1,2203)	1:A:405:ASP:HB3	1:A:408:ILE:H	3	0.18	0.06	0.18
(1,80)	1:A:515:GLU:HB3	1:A:517:SER:H	3	0.16	0.02	0.17
(1,900)	1:A:449:SER:HB3	1:A:450:ALA:H	3	0.16	0.04	0.13
(1,2153)	1:A:395:TYR:HB3	1:A:424:GLY:HA2	3	0.14	0.02	0.15
(1,2153)	1:A:395:TYR:HB3	1:A:424:GLY:HA3	3	0.14	0.02	0.15
(1,2260)	1:A:415:LYS:HG3	1:A:415:LYS:HE3	3	0.13	0.03	0.12
(1,2731)	1:A:513:LEU:HB3	1:A:514:ASP:H	3	0.13	0.02	0.12
(1,238)	1:A:492:LEU:HG	1:A:493:GLU:H	3	0.12	0.01	0.11
(1,2410)	1:A:446:ILE:HG13	1:A:447:ASP:H	3	0.12	0.01	0.11
(1,1869)	1:A:491:PRO:HA	1:A:515:GLU:HA	3	0.12	0.0	0.12
(1,2076)	1:A:407:HIS:HB3	1:A:407:HIS:HD2	3	0.12	0.01	0.11
(1,1805)	1:A:526:ASN:HA	1:A:529:LYS:HG3	2	0.72	0.08	0.72
(1,1743)	1:A:479:ARG:HA	1:A:479:ARG:HD3	2	0.68	0.48	0.68
(1,2809)	1:A:529:LYS:HG3	1:A:530:PRO:HD3	2	0.66	0.0	0.66
(1,1986)	1:A:403:ARG:HA	1:A:403:ARG:HG3	2	0.62	0.0	0.62
(1,2841)	1:A:543:GLU:HB3	1:A:544:GLN:HE21	2	0.6	0.09	0.6
(1,2841)	1:A:543:GLU:HB3	1:A:544:GLN:HE22	2	0.6	0.09	0.6
(1,48)	1:A:515:GLU:HB3	1:A:516:HIS:H	2	0.48	0.01	0.48
(1,2401)	1:A:443:GLN:HG3	1:A:472:ALA:HB1	2	0.42	0.31	0.42

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)	Median (Å)
(1,2401)	1:A:443:GLN:HG3	1:A:472:ALA:HB2	2	0.42	0.31	0.42
(1,2401)	1:A:443:GLN:HG3	1:A:472:ALA:HB3	2	0.42	0.31	0.42
(1,1847)	1:A:387:GLU:HA	1:A:387:GLU:HG3	2	0.41	0.0	0.41
(1,2535)	1:A:473:MET:HA	1:A:473:MET:HG3	2	0.38	0.08	0.38
(1,2606)	1:A:490:LEU:H	1:A:513:LEU:HB3	2	0.38	0.18	0.38
(1,599)	1:A:403:ARG:HG3	1:A:403:ARG:HE	2	0.36	0.06	0.36
(1,2348)	1:A:430:ASP:HB3	1:A:433:VAL:HG11	2	0.36	0.13	0.36
(1,2348)	1:A:430:ASP:HB3	1:A:433:VAL:HG12	2	0.36	0.13	0.36
(1,2348)	1:A:430:ASP:HB3	1:A:433:VAL:HG13	2	0.36	0.13	0.36
(1,2348)	1:A:430:ASP:HB3	1:A:433:VAL:HG21	2	0.36	0.13	0.36
(1,2348)	1:A:430:ASP:HB3	1:A:433:VAL:HG22	2	0.36	0.13	0.36
(1,2348)	1:A:430:ASP:HB3	1:A:433:VAL:HG23	2	0.36	0.13	0.36
(1,361)	1:A:387:GLU:HG3	1:A:388:SER:H	2	0.35	0.02	0.35
(1,2724)	1:A:512:ARG:HB3	1:A:512:ARG:HE	2	0.34	0.11	0.34
(1,1473)	1:A:466:LEU:HB3	1:A:466:LEU:HD11	2	0.33	0.19	0.33
(1,1473)	1:A:466:LEU:HB3	1:A:466:LEU:HD12	2	0.33	0.19	0.33
(1,1473)	1:A:466:LEU:HB3	1:A:466:LEU:HD13	2	0.33	0.19	0.33
(1,1383)	1:A:462:CYS:HB3	1:A:503:THR:HG21	2	0.3	0.12	0.3
(1,1383)	1:A:462:CYS:HB3	1:A:503:THR:HG22	2	0.3	0.12	0.3
(1,1383)	1:A:462:CYS:HB3	1:A:503:THR:HG23	2	0.3	0.12	0.3
(1,2624)	1:A:490:LEU:HD11	1:A:514:ASP:HB3	2	0.29	0.15	0.29
(1,2624)	1:A:490:LEU:HD12	1:A:514:ASP:HB3	2	0.29	0.15	0.29
(1,2624)	1:A:490:LEU:HD13	1:A:514:ASP:HB3	2	0.29	0.15	0.29
(1,2624)	1:A:490:LEU:HD21	1:A:514:ASP:HB3	2	0.29	0.15	0.29
(1,2624)	1:A:490:LEU:HD22	1:A:514:ASP:HB3	2	0.29	0.15	0.29
(1,2624)	1:A:490:LEU:HD23	1:A:514:ASP:HB3	2	0.29	0.15	0.29
(1,2512)	1:A:468:GLN:HG3	1:A:469:VAL:H	2	0.26	0.04	0.26
(1,1725)	1:A:463:ARG:HB3	1:A:463:ARG:HD3	2	0.25	0.06	0.25
(1,1671)	1:A:438:GLU:HG3	1:A:439:LEU:H	2	0.24	0.11	0.24
(1,2240)	1:A:411:ARG:HA	1:A:411:ARG:HG3	2	0.24	0.04	0.24
(1,27)	1:A:480:GLN:HG3	1:A:481:GLY:H	2	0.24	0.02	0.24
(1,791)	1:A:540:TRP:H	1:A:540:TRP:HD1	2	0.23	0.0	0.23
(1,681)	1:A:479:ARG:HG3	1:A:479:ARG:HE	2	0.22	0.04	0.22
(1,2477)	1:A:463:ARG:H	1:A:463:ARG:HG3	2	0.18	0.02	0.18
(1,2604)	1:A:489:PHE:HE1	1:A:515:GLU:HG3	2	0.18	0.02	0.18
(1,2604)	1:A:489:PHE:HE2	1:A:515:GLU:HG3	2	0.18	0.02	0.18
(1,2418)	1:A:448:HIS:HB3	1:A:449:SER:H	2	0.18	0.04	0.18
(1,34)	1:A:466:LEU:HB3	1:A:470:ASN:HD22	2	0.18	0.03	0.18
(1,34)	1:A:466:LEU:HB3	1:A:470:ASN:HD21	2	0.18	0.03	0.18
(1,1040)	1:A:449:SER:HB3	1:A:452:ILE:HD11	2	0.18	0.06	0.18
(1,1040)	1:A:449:SER:HB3	1:A:452:ILE:HD12	2	0.18	0.06	0.18
(1,1040)	1:A:449:SER:HB3	1:A:452:ILE:HD13	2	0.18	0.06	0.18

Continued on next page...

Continued from previous page...

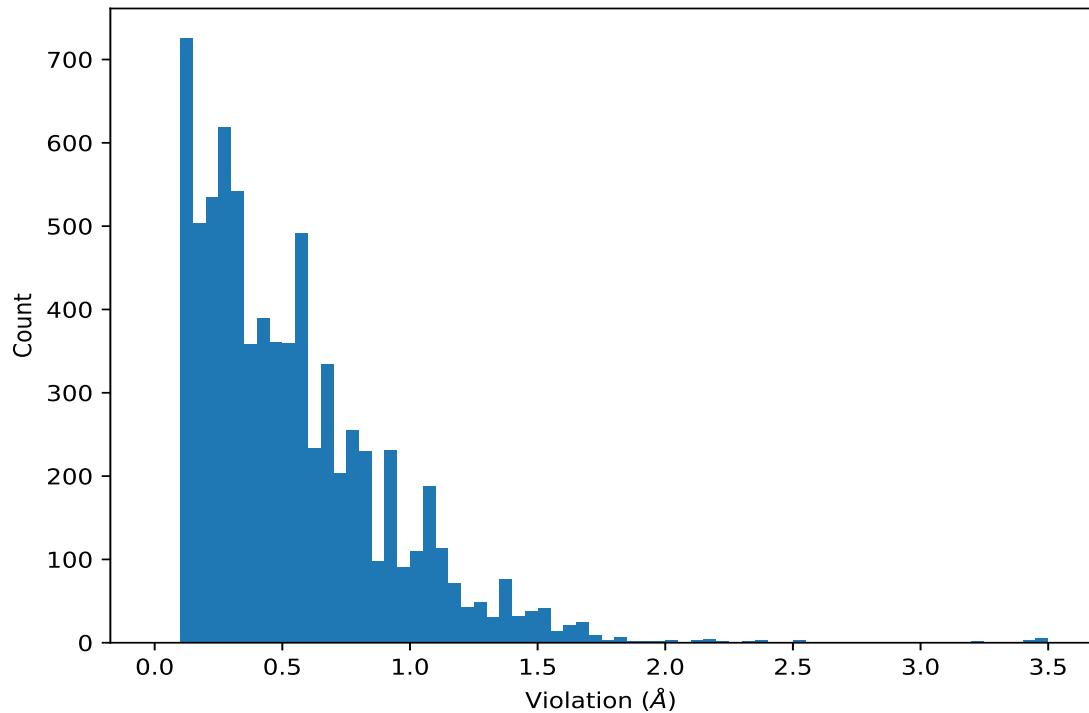
Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)	Median (Å)
(1,2147)	1:A:394:PHE:H	1:A:394:PHE:HB3	2	0.15	0.02	0.15
(1,2127)	1:A:531:HIS:HE1	1:A:532:ARG:HD3	2	0.15	0.02	0.15
(1,2545)	1:A:476:ASN:HB3	1:A:476:ASN:HD21	2	0.15	0.0	0.15
(1,2545)	1:A:476:ASN:HB3	1:A:476:ASN:HD22	2	0.15	0.0	0.15

¹Number of violated models, ²Standard deviation

9.5 All violated distance restraints [\(i\)](#)

9.5.1 Histogram : Distribution of distance violations [\(i\)](#)

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



9.5.2 Table : All distance violations [\(i\)](#)

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

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2557)	1:A:479:ARG:HH22	1:A:480:GLN:H	1	3.49
(1,2557)	1:A:479:ARG:HH22	1:A:480:GLN:H	2	3.49
(1,2557)	1:A:479:ARG:HH22	1:A:480:GLN:H	6	3.49
(1,2557)	1:A:479:ARG:HH22	1:A:480:GLN:H	16	3.47
(1,2557)	1:A:479:ARG:HH22	1:A:480:GLN:H	17	3.45
(1,2557)	1:A:479:ARG:HH22	1:A:480:GLN:H	20	3.45
(1,2557)	1:A:479:ARG:HH22	1:A:480:GLN:H	3	3.43
(1,2557)	1:A:479:ARG:HH22	1:A:480:GLN:H	11	3.43
(1,2557)	1:A:479:ARG:HH22	1:A:480:GLN:H	19	3.41
(1,2557)	1:A:479:ARG:HH22	1:A:480:GLN:H	12	3.4
(1,2557)	1:A:479:ARG:HH22	1:A:480:GLN:H	15	3.34
(1,2557)	1:A:479:ARG:HH22	1:A:480:GLN:H	4	3.21
(1,2557)	1:A:479:ARG:HH22	1:A:480:GLN:H	13	3.21
(1,2642)	1:A:492:LEU:HB3	1:A:493:GLU:HG3	14	2.8
(1,2642)	1:A:492:LEU:HB3	1:A:493:GLU:HG3	16	2.67
(1,2557)	1:A:479:ARG:HH22	1:A:480:GLN:H	7	2.63
(1,2642)	1:A:492:LEU:HB3	1:A:493:GLU:HG3	17	2.58
(1,2642)	1:A:492:LEU:HB3	1:A:493:GLU:HG3	10	2.52
(1,2642)	1:A:492:LEU:HB3	1:A:493:GLU:HG3	8	2.51
(1,2557)	1:A:479:ARG:HH22	1:A:480:GLN:H	9	2.5
(1,2642)	1:A:492:LEU:HB3	1:A:493:GLU:HG3	6	2.44
(1,2642)	1:A:492:LEU:HB3	1:A:493:GLU:HG3	12	2.37
(1,2642)	1:A:492:LEU:HB3	1:A:493:GLU:HG3	3	2.36
(1,2642)	1:A:492:LEU:HB3	1:A:493:GLU:HG3	13	2.36
(1,2642)	1:A:492:LEU:HB3	1:A:493:GLU:HG3	5	2.32
(1,2642)	1:A:492:LEU:HB3	1:A:493:GLU:HG3	19	2.32
(1,2642)	1:A:492:LEU:HB3	1:A:493:GLU:HG3	18	2.29
(1,2557)	1:A:479:ARG:HH22	1:A:480:GLN:H	14	2.24
(1,2642)	1:A:492:LEU:HB3	1:A:493:GLU:HG3	11	2.2
(1,2642)	1:A:492:LEU:HB3	1:A:493:GLU:HG3	9	2.19
(1,2642)	1:A:492:LEU:HB3	1:A:493:GLU:HG3	7	2.17
(1,2642)	1:A:492:LEU:HB3	1:A:493:GLU:HG3	2	2.16
(1,2642)	1:A:492:LEU:HB3	1:A:493:GLU:HG3	4	2.16
(1,2642)	1:A:492:LEU:HB3	1:A:493:GLU:HG3	1	2.12
(1,2642)	1:A:492:LEU:HB3	1:A:493:GLU:HG3	20	2.1
(1,2562)	1:A:480:GLN:HB3	1:A:482:SER:HB3	3	2.1
(1,1751)	1:A:488:PRO:HB3	1:A:512:ARG:HD3	10	2.07
(1,2562)	1:A:480:GLN:HB3	1:A:482:SER:HB3	4	2.05
(1,1578)	1:A:462:CYS:HB3	1:A:463:ARG:HB3	15	2.04
(1,2562)	1:A:480:GLN:HB3	1:A:482:SER:HB3	9	2.01
(1,2642)	1:A:492:LEU:HB3	1:A:493:GLU:HG3	15	1.99
(1,1578)	1:A:462:CYS:HB3	1:A:463:ARG:HB3	11	1.97
(1,1578)	1:A:462:CYS:HB3	1:A:463:ARG:HB3	2	1.92

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1578)	1:A:462:CYS:HB3	1:A:463:ARG:HB3	17	1.92
(1,1578)	1:A:462:CYS:HB3	1:A:463:ARG:HB3	8	1.9
(1,2562)	1:A:480:GLN:HB3	1:A:482:SER:HB3	18	1.88
(1,2130)	1:A:387:GLU:HB3	1:A:390:SER:HA	11	1.84
(1,858)	1:A:403:ARG:HG3	1:A:406:GLU:H	11	1.83
(1,858)	1:A:403:ARG:HG3	1:A:406:GLU:H	2	1.82
(1,858)	1:A:403:ARG:HG3	1:A:406:GLU:H	4	1.82
(1,1751)	1:A:488:PRO:HB3	1:A:512:ARG:HD3	1	1.82
(1,858)	1:A:403:ARG:HG3	1:A:406:GLU:H	15	1.81
(1,2562)	1:A:480:GLN:HB3	1:A:482:SER:HB3	16	1.8
(1,858)	1:A:403:ARG:HG3	1:A:406:GLU:H	12	1.78
(1,858)	1:A:403:ARG:HG3	1:A:406:GLU:H	19	1.78
(1,858)	1:A:403:ARG:HG3	1:A:406:GLU:H	1	1.76
(1,1751)	1:A:488:PRO:HB3	1:A:512:ARG:HD3	13	1.74
(1,338)	1:A:503:THR:H	1:A:505:SER:HB3	20	1.73
(1,2562)	1:A:480:GLN:HB3	1:A:482:SER:HB3	17	1.73
(1,1751)	1:A:488:PRO:HB3	1:A:512:ARG:HD3	11	1.73
(1,2546)	1:A:476:ASN:HB3	1:A:479:ARG:HG3	16	1.72
(1,858)	1:A:403:ARG:HG3	1:A:406:GLU:H	7	1.71
(1,858)	1:A:403:ARG:HG3	1:A:406:GLU:H	20	1.71
(1,1679)	1:A:519:ILE:HB	1:A:522:ARG:HB3	15	1.71
(1,1679)	1:A:519:ILE:HB	1:A:522:ARG:HB3	18	1.71
(1,858)	1:A:403:ARG:HG3	1:A:406:GLU:H	3	1.7
(1,1679)	1:A:519:ILE:HB	1:A:522:ARG:HB3	1	1.7
(1,1679)	1:A:519:ILE:HB	1:A:522:ARG:HB3	2	1.7
(1,1679)	1:A:519:ILE:HB	1:A:522:ARG:HB3	3	1.7
(1,1679)	1:A:519:ILE:HB	1:A:522:ARG:HB3	4	1.7
(1,1679)	1:A:519:ILE:HB	1:A:522:ARG:HB3	7	1.7
(1,1679)	1:A:519:ILE:HB	1:A:522:ARG:HB3	8	1.7
(1,1679)	1:A:519:ILE:HB	1:A:522:ARG:HB3	9	1.7
(1,1679)	1:A:519:ILE:HB	1:A:522:ARG:HB3	10	1.7
(1,1679)	1:A:519:ILE:HB	1:A:522:ARG:HB3	12	1.7
(1,1679)	1:A:519:ILE:HB	1:A:522:ARG:HB3	16	1.7
(1,1679)	1:A:519:ILE:HB	1:A:522:ARG:HB3	20	1.7
(1,678)	1:A:436:ARG:H	1:A:438:GLU:HG3	17	1.69
(1,338)	1:A:503:THR:H	1:A:505:SER:HB3	18	1.69
(1,1679)	1:A:519:ILE:HB	1:A:522:ARG:HB3	5	1.69
(1,1679)	1:A:519:ILE:HB	1:A:522:ARG:HB3	11	1.69
(1,1679)	1:A:519:ILE:HB	1:A:522:ARG:HB3	13	1.69
(1,1679)	1:A:519:ILE:HB	1:A:522:ARG:HB3	17	1.69
(1,1679)	1:A:519:ILE:HB	1:A:522:ARG:HB3	19	1.69
(1,1609)	1:A:394:PHE:HD1	1:A:537:LYS:HD3	20	1.69

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1609)	1:A:394:PHE:HD2	1:A:537:LYS:HD3	20	1.69
(1,1679)	1:A:519:ILE:HB	1:A:522:ARG:HB3	6	1.68
(1,1679)	1:A:519:ILE:HB	1:A:522:ARG:HB3	14	1.68
(1,1751)	1:A:488:PRO:HB3	1:A:512:ARG:HD3	19	1.67
(1,338)	1:A:503:THR:H	1:A:505:SER:HB3	13	1.66
(1,858)	1:A:403:ARG:HG3	1:A:406:GLU:H	9	1.65
(1,858)	1:A:403:ARG:HG3	1:A:406:GLU:H	17	1.65
(1,678)	1:A:436:ARG:H	1:A:438:GLU:HG3	9	1.65
(1,2562)	1:A:480:GLN:HB3	1:A:482:SER:HB3	11	1.65
(1,1791)	1:A:538:ALA:HA	1:A:541:ARG:HB3	13	1.65
(1,1751)	1:A:488:PRO:HB3	1:A:512:ARG:HD3	12	1.65
(1,1638)	1:A:539:MET:HA	1:A:542:LYS:HB3	15	1.65
(1,2263)	1:A:415:LYS:HE3	1:A:520:PHE:HZ	16	1.64
(1,2130)	1:A:387:GLU:HB3	1:A:390:SER:HA	6	1.64
(1,858)	1:A:403:ARG:HG3	1:A:406:GLU:H	8	1.63
(1,2562)	1:A:480:GLN:HB3	1:A:482:SER:HB3	12	1.63
(1,858)	1:A:403:ARG:HG3	1:A:406:GLU:H	16	1.62
(1,2263)	1:A:415:LYS:HE3	1:A:520:PHE:HZ	8	1.61
(1,830)	1:A:532:ARG:HD3	1:A:535:ALA:H	17	1.6
(1,2557)	1:A:479:ARG:HH22	1:A:480:GLN:H	10	1.6
(1,1540)	1:A:490:LEU:HD11	1:A:512:ARG:HD3	4	1.6
(1,1540)	1:A:490:LEU:HD12	1:A:512:ARG:HD3	4	1.6
(1,1540)	1:A:490:LEU:HD13	1:A:512:ARG:HD3	4	1.6
(1,1532)	1:A:490:LEU:HD21	1:A:512:ARG:HD3	15	1.6
(1,1532)	1:A:490:LEU:HD22	1:A:512:ARG:HD3	15	1.6
(1,1532)	1:A:490:LEU:HD23	1:A:512:ARG:HD3	15	1.6
(1,858)	1:A:403:ARG:HG3	1:A:406:GLU:H	18	1.59
(1,1610)	1:A:394:PHE:HE1	1:A:537:LYS:HD3	12	1.59
(1,1610)	1:A:394:PHE:HE2	1:A:537:LYS:HD3	12	1.59
(1,2562)	1:A:480:GLN:HB3	1:A:482:SER:HB3	13	1.58
(1,2562)	1:A:480:GLN:HB3	1:A:482:SER:HB3	6	1.57
(1,2546)	1:A:476:ASN:HB3	1:A:479:ARG:HG3	17	1.57
(1,621)	1:A:523:LYS:H	1:A:526:ASN:HB3	6	1.56
(1,621)	1:A:523:LYS:H	1:A:526:ASN:HB3	19	1.56
(1,2816)	1:A:533:LEU:H	1:A:534:GLN:HG3	6	1.56
(1,2609)	1:A:490:LEU:HB3	1:A:512:ARG:HD3	16	1.56
(1,2263)	1:A:415:LYS:HE3	1:A:520:PHE:HZ	14	1.56
(1,621)	1:A:523:LYS:H	1:A:526:ASN:HB3	15	1.55
(1,2546)	1:A:476:ASN:HB3	1:A:479:ARG:HG3	2	1.55
(1,1751)	1:A:488:PRO:HB3	1:A:512:ARG:HD3	15	1.55
(1,830)	1:A:532:ARG:HD3	1:A:535:ALA:H	9	1.54
(1,621)	1:A:523:LYS:H	1:A:526:ASN:HB3	12	1.54

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,621)	1:A:523:LYS:H	1:A:526:ASN:HB3	14	1.54
(1,621)	1:A:523:LYS:H	1:A:526:ASN:HB3	20	1.53
(1,469)	1:A:521:ALA:H	1:A:522:ARG:HB3	4	1.53
(1,469)	1:A:521:ALA:H	1:A:522:ARG:HB3	9	1.53
(1,469)	1:A:521:ALA:H	1:A:522:ARG:HB3	18	1.53
(1,1751)	1:A:488:PRO:HB3	1:A:512:ARG:HD3	6	1.53
(1,1638)	1:A:539:MET:HA	1:A:542:LYS:HB3	6	1.53
(1,754)	1:A:479:ARG:H	1:A:480:GLN:HG3	1	1.52
(1,746)	1:A:525:ALA:H	1:A:526:ASN:HB3	20	1.52
(1,731)	1:A:538:ALA:H	1:A:539:MET:HB3	20	1.52
(1,54)	1:A:436:ARG:HD3	1:A:437:GLY:H	1	1.52
(1,469)	1:A:521:ALA:H	1:A:522:ARG:HB3	2	1.52
(1,469)	1:A:521:ALA:H	1:A:522:ARG:HB3	3	1.52
(1,469)	1:A:521:ALA:H	1:A:522:ARG:HB3	6	1.52
(1,469)	1:A:521:ALA:H	1:A:522:ARG:HB3	7	1.52
(1,469)	1:A:521:ALA:H	1:A:522:ARG:HB3	12	1.52
(1,469)	1:A:521:ALA:H	1:A:522:ARG:HB3	15	1.52
(1,469)	1:A:521:ALA:H	1:A:522:ARG:HB3	20	1.52
(1,1609)	1:A:394:PHE:HD1	1:A:537:LYS:HD3	8	1.52
(1,1609)	1:A:394:PHE:HD2	1:A:537:LYS:HD3	8	1.52
(1,858)	1:A:403:ARG:HG3	1:A:406:GLU:H	5	1.51
(1,621)	1:A:523:LYS:H	1:A:526:ASN:HB3	2	1.51
(1,621)	1:A:523:LYS:H	1:A:526:ASN:HB3	5	1.51
(1,469)	1:A:521:ALA:H	1:A:522:ARG:HB3	11	1.51
(1,469)	1:A:521:ALA:H	1:A:522:ARG:HB3	16	1.51
(1,338)	1:A:503:THR:H	1:A:505:SER:HB3	4	1.51
(1,2643)	1:A:492:LEU:HG	1:A:515:GLU:HG3	2	1.51
(1,2263)	1:A:415:LYS:HE3	1:A:520:PHE:HZ	15	1.51
(1,1751)	1:A:488:PRO:HB3	1:A:512:ARG:HD3	7	1.51
(1,746)	1:A:525:ALA:H	1:A:526:ASN:HB3	12	1.5
(1,746)	1:A:525:ALA:H	1:A:526:ASN:HB3	15	1.5
(1,621)	1:A:523:LYS:H	1:A:526:ASN:HB3	3	1.5
(1,621)	1:A:523:LYS:H	1:A:526:ASN:HB3	16	1.5
(1,621)	1:A:523:LYS:H	1:A:526:ASN:HB3	17	1.5
(1,469)	1:A:521:ALA:H	1:A:522:ARG:HB3	1	1.5
(1,469)	1:A:521:ALA:H	1:A:522:ARG:HB3	8	1.5
(1,469)	1:A:521:ALA:H	1:A:522:ARG:HB3	13	1.5
(1,2643)	1:A:492:LEU:HG	1:A:515:GLU:HG3	8	1.5
(1,2643)	1:A:492:LEU:HG	1:A:515:GLU:HG3	20	1.5
(1,1751)	1:A:488:PRO:HB3	1:A:512:ARG:HD3	4	1.5
(1,731)	1:A:538:ALA:H	1:A:539:MET:HB3	6	1.49
(1,621)	1:A:523:LYS:H	1:A:526:ASN:HB3	8	1.49

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,621)	1:A:523:LYS:H	1:A:526:ASN:HB3	10	1.49
(1,621)	1:A:523:LYS:H	1:A:526:ASN:HB3	11	1.49
(1,469)	1:A:521:ALA:H	1:A:522:ARG:HB3	10	1.49
(1,469)	1:A:521:ALA:H	1:A:522:ARG:HB3	17	1.49
(1,358)	1:A:387:GLU:HG3	1:A:390:SER:H	10	1.49
(1,830)	1:A:532:ARG:HD3	1:A:535:ALA:H	18	1.48
(1,779)	1:A:518:GLN:HG3	1:A:520:PHE:H	17	1.48
(1,754)	1:A:479:ARG:H	1:A:480:GLN:HG3	14	1.48
(1,746)	1:A:525:ALA:H	1:A:526:ASN:HB3	17	1.48
(1,621)	1:A:523:LYS:H	1:A:526:ASN:HB3	9	1.48
(1,621)	1:A:523:LYS:H	1:A:526:ASN:HB3	13	1.48
(1,621)	1:A:523:LYS:H	1:A:526:ASN:HB3	18	1.48
(1,469)	1:A:521:ALA:H	1:A:522:ARG:HB3	19	1.48
(1,2643)	1:A:492:LEU:HG	1:A:515:GLU:HG3	3	1.48
(1,1540)	1:A:490:LEU:HD11	1:A:512:ARG:HD3	16	1.48
(1,1540)	1:A:490:LEU:HD12	1:A:512:ARG:HD3	16	1.48
(1,1540)	1:A:490:LEU:HD13	1:A:512:ARG:HD3	16	1.48
(1,746)	1:A:525:ALA:H	1:A:526:ASN:HB3	6	1.47
(1,54)	1:A:436:ARG:HD3	1:A:437:GLY:H	14	1.47
(1,469)	1:A:521:ALA:H	1:A:522:ARG:HB3	5	1.47
(1,469)	1:A:521:ALA:H	1:A:522:ARG:HB3	14	1.47
(1,387)	1:A:539:MET:H	1:A:540:TRP:HB3	15	1.47
(1,387)	1:A:539:MET:H	1:A:540:TRP:HB3	16	1.47
(1,2816)	1:A:533:LEU:H	1:A:534:GLN:HG3	18	1.47
(1,1578)	1:A:462:CYS:HB3	1:A:463:ARG:HB3	14	1.47
(1,1432)	1:A:462:CYS:HB3	1:A:506:LEU:HD21	17	1.47
(1,1432)	1:A:462:CYS:HB3	1:A:506:LEU:HD22	17	1.47
(1,1432)	1:A:462:CYS:HB3	1:A:506:LEU:HD23	17	1.47
(1,746)	1:A:525:ALA:H	1:A:526:ASN:HB3	1	1.46
(1,1731)	1:A:532:ARG:HD3	1:A:533:LEU:H	12	1.46
(1,1540)	1:A:490:LEU:HD11	1:A:512:ARG:HD3	13	1.46
(1,1540)	1:A:490:LEU:HD12	1:A:512:ARG:HD3	13	1.46
(1,1540)	1:A:490:LEU:HD13	1:A:512:ARG:HD3	13	1.46
(1,1432)	1:A:462:CYS:HB3	1:A:506:LEU:HD21	11	1.46
(1,1432)	1:A:462:CYS:HB3	1:A:506:LEU:HD22	11	1.46
(1,1432)	1:A:462:CYS:HB3	1:A:506:LEU:HD23	11	1.46
(1,779)	1:A:518:GLN:HG3	1:A:520:PHE:H	10	1.45
(1,746)	1:A:525:ALA:H	1:A:526:ASN:HB3	3	1.45
(1,746)	1:A:525:ALA:H	1:A:526:ASN:HB3	16	1.45
(1,621)	1:A:523:LYS:H	1:A:526:ASN:HB3	7	1.45
(1,2130)	1:A:387:GLU:HB3	1:A:390:SER:HA	5	1.45
(1,164)	1:A:465:SER:H	1:A:466:LEU:HB3	10	1.45

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1432)	1:A:462:CYS:HB3	1:A:506:LEU:HD21	15	1.45
(1,1432)	1:A:462:CYS:HB3	1:A:506:LEU:HD22	15	1.45
(1,1432)	1:A:462:CYS:HB3	1:A:506:LEU:HD23	15	1.45
(1,746)	1:A:525:ALA:H	1:A:526:ASN:HB3	10	1.44
(1,621)	1:A:523:LYS:H	1:A:526:ASN:HB3	1	1.44
(1,54)	1:A:436:ARG:HD3	1:A:437:GLY:H	19	1.44
(1,387)	1:A:539:MET:H	1:A:540:TRP:HB3	17	1.44
(1,1791)	1:A:538:ALA:HA	1:A:541:ARG:HB3	19	1.44
(1,1578)	1:A:462:CYS:HB3	1:A:463:ARG:HB3	10	1.44
(1,1432)	1:A:462:CYS:HB3	1:A:506:LEU:HD21	2	1.44
(1,1432)	1:A:462:CYS:HB3	1:A:506:LEU:HD22	2	1.44
(1,1432)	1:A:462:CYS:HB3	1:A:506:LEU:HD23	2	1.44
(1,746)	1:A:525:ALA:H	1:A:526:ASN:HB3	14	1.43
(1,621)	1:A:523:LYS:H	1:A:526:ASN:HB3	4	1.43
(1,54)	1:A:436:ARG:HD3	1:A:437:GLY:H	15	1.43
(1,2495)	1:A:466:LEU:HB3	1:A:467:HIS:HB3	10	1.43
(1,1751)	1:A:488:PRO:HB3	1:A:512:ARG:HD3	9	1.43
(1,1578)	1:A:462:CYS:HB3	1:A:463:ARG:HB3	20	1.43
(1,2687)	1:A:502:ASP:HB3	1:A:505:SER:HB3	13	1.42
(1,2130)	1:A:387:GLU:HB3	1:A:390:SER:HA	14	1.42
(1,1578)	1:A:462:CYS:HB3	1:A:463:ARG:HB3	18	1.42
(1,1578)	1:A:462:CYS:HB3	1:A:463:ARG:HB3	19	1.42
(1,387)	1:A:539:MET:H	1:A:540:TRP:HB3	6	1.41
(1,2074)	1:A:393:LYS:HD3	1:A:395:TYR:HE1	20	1.41
(1,2074)	1:A:393:LYS:HD3	1:A:395:TYR:HE2	20	1.41
(1,1578)	1:A:462:CYS:HB3	1:A:463:ARG:HB3	4	1.41
(1,746)	1:A:525:ALA:H	1:A:526:ASN:HB3	8	1.4
(1,746)	1:A:525:ALA:H	1:A:526:ASN:HB3	18	1.4
(1,555)	1:A:542:LYS:H	1:A:542:LYS:HE3	9	1.4
(1,2816)	1:A:533:LEU:H	1:A:534:GLN:HG3	11	1.4
(1,2643)	1:A:492:LEU:HG	1:A:515:GLU:HG3	12	1.4
(1,2590)	1:A:487:ILE:HG21	1:A:489:PHE:HB3	12	1.4
(1,2590)	1:A:487:ILE:HG22	1:A:489:PHE:HB3	12	1.4
(1,2590)	1:A:487:ILE:HG23	1:A:489:PHE:HB3	12	1.4
(1,2590)	1:A:487:ILE:HG21	1:A:489:PHE:HB3	17	1.4
(1,2590)	1:A:487:ILE:HG22	1:A:489:PHE:HB3	17	1.4
(1,2590)	1:A:487:ILE:HG23	1:A:489:PHE:HB3	17	1.4
(1,2412)	1:A:446:ILE:HG13	1:A:473:MET:HE1	14	1.4
(1,2412)	1:A:446:ILE:HG13	1:A:473:MET:HE2	14	1.4
(1,2412)	1:A:446:ILE:HG13	1:A:473:MET:HE3	14	1.4
(1,2226)	1:A:408:ILE:HG21	1:A:494:SER:HB3	9	1.4
(1,2226)	1:A:408:ILE:HG22	1:A:494:SER:HB3	9	1.4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2226)	1:A:408:ILE:HG23	1:A:494:SER:HB3	9	1.4
(1,746)	1:A:525:ALA:H	1:A:526:ASN:HB3	2	1.39
(1,746)	1:A:525:ALA:H	1:A:526:ASN:HB3	5	1.39
(1,731)	1:A:538:ALA:H	1:A:539:MET:HB3	9	1.39
(1,731)	1:A:538:ALA:H	1:A:539:MET:HB3	17	1.39
(1,2816)	1:A:533:LEU:H	1:A:534:GLN:HG3	20	1.39
(1,205)	1:A:482:SER:HB3	1:A:485:CYS:H	5	1.39
(1,1578)	1:A:462:CYS:HB3	1:A:463:ARG:HB3	7	1.39
(1,1578)	1:A:462:CYS:HB3	1:A:463:ARG:HB3	16	1.39
(1,746)	1:A:525:ALA:H	1:A:526:ASN:HB3	7	1.38
(1,338)	1:A:503:THR:H	1:A:505:SER:HB3	11	1.38
(1,2807)	1:A:529:LYS:HB3	1:A:529:LYS:HE3	15	1.38
(1,2412)	1:A:446:ILE:HG13	1:A:473:MET:HE1	12	1.38
(1,2412)	1:A:446:ILE:HG13	1:A:473:MET:HE2	12	1.38
(1,2412)	1:A:446:ILE:HG13	1:A:473:MET:HE3	12	1.38
(1,2007)	1:A:462:CYS:HA	1:A:466:LEU:HB3	10	1.38
(1,1751)	1:A:488:PRO:HB3	1:A:512:ARG:HD3	16	1.38
(1,1745)	1:A:479:ARG:HD3	1:A:479:ARG:HH22	7	1.38
(1,1638)	1:A:539:MET:HA	1:A:542:LYS:HB3	5	1.38
(1,1532)	1:A:490:LEU:HD21	1:A:512:ARG:HD3	9	1.38
(1,1532)	1:A:490:LEU:HD22	1:A:512:ARG:HD3	9	1.38
(1,1532)	1:A:490:LEU:HD23	1:A:512:ARG:HD3	9	1.38
(1,830)	1:A:532:ARG:HD3	1:A:535:ALA:H	12	1.37
(1,779)	1:A:518:GLN:HG3	1:A:520:PHE:H	19	1.37
(1,746)	1:A:525:ALA:H	1:A:526:ASN:HB3	4	1.37
(1,746)	1:A:525:ALA:H	1:A:526:ASN:HB3	9	1.37
(1,746)	1:A:525:ALA:H	1:A:526:ASN:HB3	11	1.37
(1,555)	1:A:542:LYS:H	1:A:542:LYS:HE3	14	1.37
(1,2590)	1:A:487:ILE:HG21	1:A:489:PHE:HB3	10	1.37
(1,2590)	1:A:487:ILE:HG22	1:A:489:PHE:HB3	10	1.37
(1,2590)	1:A:487:ILE:HG23	1:A:489:PHE:HB3	10	1.37
(1,2481)	1:A:463:ARG:HE	1:A:502:ASP:HB3	4	1.37
(1,2398)	1:A:443:GLN:HB3	1:A:446:ILE:HG21	6	1.37
(1,2398)	1:A:443:GLN:HB3	1:A:446:ILE:HG22	6	1.37
(1,2398)	1:A:443:GLN:HB3	1:A:446:ILE:HG23	6	1.37
(1,1745)	1:A:479:ARG:HD3	1:A:479:ARG:HH22	4	1.37
(1,1745)	1:A:479:ARG:HD3	1:A:479:ARG:HH22	6	1.37
(1,1745)	1:A:479:ARG:HD3	1:A:479:ARG:HH22	10	1.37
(1,1745)	1:A:479:ARG:HD3	1:A:479:ARG:HH22	12	1.37
(1,1745)	1:A:479:ARG:HD3	1:A:479:ARG:HH22	16	1.37
(1,1578)	1:A:462:CYS:HB3	1:A:463:ARG:HB3	1	1.37
(1,779)	1:A:518:GLN:HG3	1:A:520:PHE:H	11	1.36

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,555)	1:A:542:LYS:H	1:A:542:LYS:HE3	16	1.36
(1,338)	1:A:503:THR:H	1:A:505:SER:HB3	15	1.36
(1,2590)	1:A:487:ILE:HG21	1:A:489:PHE:HB3	3	1.36
(1,2590)	1:A:487:ILE:HG22	1:A:489:PHE:HB3	3	1.36
(1,2590)	1:A:487:ILE:HG23	1:A:489:PHE:HB3	3	1.36
(1,1638)	1:A:539:MET:HA	1:A:542:LYS:HB3	8	1.36
(1,1432)	1:A:462:CYS:HB3	1:A:506:LEU:HD21	8	1.36
(1,1432)	1:A:462:CYS:HB3	1:A:506:LEU:HD22	8	1.36
(1,1432)	1:A:462:CYS:HB3	1:A:506:LEU:HD23	8	1.36
(1,2590)	1:A:487:ILE:HG21	1:A:489:PHE:HB3	4	1.35
(1,2590)	1:A:487:ILE:HG22	1:A:489:PHE:HB3	4	1.35
(1,2590)	1:A:487:ILE:HG23	1:A:489:PHE:HB3	4	1.35
(1,2481)	1:A:463:ARG:HE	1:A:502:ASP:HB3	15	1.35
(1,1745)	1:A:479:ARG:HD3	1:A:479:ARG:HH22	14	1.35
(1,1745)	1:A:479:ARG:HD3	1:A:479:ARG:HH22	15	1.35
(1,1638)	1:A:539:MET:HA	1:A:542:LYS:HB3	18	1.35
(1,1609)	1:A:394:PHE:HD1	1:A:537:LYS:HD3	18	1.35
(1,1609)	1:A:394:PHE:HD2	1:A:537:LYS:HD3	18	1.35
(1,779)	1:A:518:GLN:HG3	1:A:520:PHE:H	20	1.34
(1,2680)	1:A:499:LEU:HB3	1:A:500:SER:HB3	12	1.34
(1,2546)	1:A:476:ASN:HB3	1:A:479:ARG:HG3	14	1.34
(1,1890)	1:A:431:PHE:HA	1:A:432:GLN:HG3	11	1.34
(1,1638)	1:A:539:MET:HA	1:A:542:LYS:HB3	7	1.34
(1,1591)	1:A:531:HIS:HA	1:A:534:GLN:HB3	4	1.34
(1,754)	1:A:479:ARG:H	1:A:480:GLN:HG3	5	1.33
(1,555)	1:A:542:LYS:H	1:A:542:LYS:HE3	3	1.33
(1,2729)	1:A:513:LEU:HA	1:A:523:LYS:HE3	15	1.33
(1,2590)	1:A:487:ILE:HG21	1:A:489:PHE:HB3	14	1.33
(1,2590)	1:A:487:ILE:HG22	1:A:489:PHE:HB3	14	1.33
(1,2590)	1:A:487:ILE:HG23	1:A:489:PHE:HB3	14	1.33
(1,1751)	1:A:488:PRO:HB3	1:A:512:ARG:HD3	3	1.33
(1,1745)	1:A:479:ARG:HD3	1:A:479:ARG:HH22	5	1.33
(1,1745)	1:A:479:ARG:HD3	1:A:479:ARG:HH22	8	1.33
(1,1578)	1:A:462:CYS:HB3	1:A:463:ARG:HB3	5	1.33
(1,1578)	1:A:462:CYS:HB3	1:A:463:ARG:HB3	12	1.33
(1,830)	1:A:532:ARG:HD3	1:A:535:ALA:H	14	1.32
(1,358)	1:A:387:GLU:HG3	1:A:390:SER:H	2	1.32
(1,2816)	1:A:533:LEU:H	1:A:534:GLN:HG3	13	1.32
(1,1638)	1:A:539:MET:HA	1:A:542:LYS:HB3	9	1.32
(1,1611)	1:A:537:LYS:HD3	1:A:538:ALA:H	13	1.32
(1,1578)	1:A:462:CYS:HB3	1:A:463:ARG:HB3	6	1.32
(1,731)	1:A:538:ALA:H	1:A:539:MET:HB3	2	1.31

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2680)	1:A:499:LEU:HB3	1:A:500:SER:HB3	3	1.31
(1,2562)	1:A:480:GLN:HB3	1:A:482:SER:HB3	8	1.31
(1,2680)	1:A:499:LEU:HB3	1:A:500:SER:HB3	6	1.3
(1,2412)	1:A:446:ILE:HG13	1:A:473:MET:HE1	4	1.3
(1,2412)	1:A:446:ILE:HG13	1:A:473:MET:HE2	4	1.3
(1,2412)	1:A:446:ILE:HG13	1:A:473:MET:HE3	4	1.3
(1,1731)	1:A:532:ARG:HD3	1:A:533:LEU:H	10	1.3
(1,756)	1:A:479:ARG:H	1:A:479:ARG:HD3	14	1.29
(1,731)	1:A:538:ALA:H	1:A:539:MET:HB3	7	1.29
(1,2680)	1:A:499:LEU:HB3	1:A:500:SER:HB3	9	1.29
(1,2611)	1:A:490:LEU:HG	1:A:494:SER:HB3	7	1.29
(1,2590)	1:A:487:ILE:HG21	1:A:489:PHE:HB3	19	1.29
(1,2590)	1:A:487:ILE:HG22	1:A:489:PHE:HB3	19	1.29
(1,2590)	1:A:487:ILE:HG23	1:A:489:PHE:HB3	19	1.29
(1,2562)	1:A:480:GLN:HB3	1:A:482:SER:HB3	2	1.29
(1,2479)	1:A:463:ARG:HD3	1:A:464:LEU:H	15	1.29
(1,186)	1:A:507:LEU:H	1:A:508:SER:HB3	1	1.29
(1,1751)	1:A:488:PRO:HB3	1:A:512:ARG:HD3	2	1.29
(1,1731)	1:A:532:ARG:HD3	1:A:533:LEU:H	17	1.29
(1,754)	1:A:479:ARG:H	1:A:480:GLN:HG3	2	1.28
(1,746)	1:A:525:ALA:H	1:A:526:ASN:HB3	13	1.28
(1,731)	1:A:538:ALA:H	1:A:539:MET:HB3	18	1.28
(1,2590)	1:A:487:ILE:HG21	1:A:489:PHE:HB3	9	1.28
(1,2590)	1:A:487:ILE:HG22	1:A:489:PHE:HB3	9	1.28
(1,2590)	1:A:487:ILE:HG23	1:A:489:PHE:HB3	9	1.28
(1,2412)	1:A:446:ILE:HG13	1:A:473:MET:HE1	11	1.28
(1,2412)	1:A:446:ILE:HG13	1:A:473:MET:HE2	11	1.28
(1,2412)	1:A:446:ILE:HG13	1:A:473:MET:HE3	11	1.28
(1,1890)	1:A:431:PHE:HA	1:A:432:GLN:HG3	16	1.28
(1,186)	1:A:507:LEU:H	1:A:508:SER:HB3	3	1.28
(1,1600)	1:A:393:LYS:H	1:A:393:LYS:HD3	20	1.28
(1,754)	1:A:479:ARG:H	1:A:480:GLN:HG3	16	1.27
(1,746)	1:A:525:ALA:H	1:A:526:ASN:HB3	19	1.27
(1,2591)	1:A:487:ILE:HG21	1:A:513:LEU:HB3	17	1.27
(1,2591)	1:A:487:ILE:HG22	1:A:513:LEU:HB3	17	1.27
(1,2591)	1:A:487:ILE:HG23	1:A:513:LEU:HB3	17	1.27
(1,1751)	1:A:488:PRO:HB3	1:A:512:ARG:HD3	20	1.27
(1,1731)	1:A:532:ARG:HD3	1:A:533:LEU:H	8	1.27
(1,891)	1:A:393:LYS:H	1:A:393:LYS:HE3	15	1.26
(1,830)	1:A:532:ARG:HD3	1:A:535:ALA:H	5	1.26
(1,2680)	1:A:499:LEU:HB3	1:A:500:SER:HB3	8	1.26
(1,2590)	1:A:487:ILE:HG21	1:A:489:PHE:HB3	13	1.26

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2590)	1:A:487:ILE:HG22	1:A:489:PHE:HB3	13	1.26
(1,2590)	1:A:487:ILE:HG23	1:A:489:PHE:HB3	13	1.26
(1,2473)	1:A:458:SER:HB3	1:A:459:ASN:HA	3	1.26
(1,2473)	1:A:458:SER:HB3	1:A:459:ASN:HA	19	1.26
(1,2590)	1:A:487:ILE:HG21	1:A:489:PHE:HB3	6	1.25
(1,2590)	1:A:487:ILE:HG22	1:A:489:PHE:HB3	6	1.25
(1,2590)	1:A:487:ILE:HG23	1:A:489:PHE:HB3	6	1.25
(1,2590)	1:A:487:ILE:HG21	1:A:489:PHE:HB3	18	1.25
(1,2590)	1:A:487:ILE:HG22	1:A:489:PHE:HB3	18	1.25
(1,2590)	1:A:487:ILE:HG23	1:A:489:PHE:HB3	18	1.25
(1,2473)	1:A:458:SER:HB3	1:A:459:ASN:HA	13	1.25
(1,2473)	1:A:458:SER:HB3	1:A:459:ASN:HA	17	1.25
(1,1731)	1:A:532:ARG:HD3	1:A:533:LEU:H	9	1.25
(1,1656)	1:A:432:GLN:HG3	1:A:433:VAL:H	9	1.25
(1,731)	1:A:538:ALA:H	1:A:539:MET:HB3	5	1.24
(1,731)	1:A:538:ALA:H	1:A:539:MET:HB3	10	1.24
(1,731)	1:A:538:ALA:H	1:A:539:MET:HB3	16	1.24
(1,2562)	1:A:480:GLN:HB3	1:A:482:SER:HB3	14	1.24
(1,2473)	1:A:458:SER:HB3	1:A:459:ASN:HA	4	1.24
(1,2473)	1:A:458:SER:HB3	1:A:459:ASN:HA	10	1.24
(1,2473)	1:A:458:SER:HB3	1:A:459:ASN:HA	12	1.24
(1,2412)	1:A:446:ILE:HG13	1:A:473:MET:HE1	20	1.24
(1,2412)	1:A:446:ILE:HG13	1:A:473:MET:HE2	20	1.24
(1,2412)	1:A:446:ILE:HG13	1:A:473:MET:HE3	20	1.24
(1,1789)	1:A:483:PRO:HG3	1:A:484:ASP:HA	14	1.24
(1,1591)	1:A:531:HIS:HA	1:A:534:GLN:HB3	12	1.24
(1,397)	1:A:536:ARG:H	1:A:536:ARG:HD3	17	1.23
(1,2473)	1:A:458:SER:HB3	1:A:459:ASN:HA	11	1.23
(1,731)	1:A:538:ALA:H	1:A:539:MET:HB3	11	1.22
(1,679)	1:A:436:ARG:H	1:A:436:ARG:HD3	14	1.22
(1,2807)	1:A:529:LYS:HB3	1:A:529:LYS:HE3	2	1.22
(1,2621)	1:A:490:LEU:HD11	1:A:512:ARG:HD3	16	1.22
(1,2621)	1:A:490:LEU:HD12	1:A:512:ARG:HD3	16	1.22
(1,2621)	1:A:490:LEU:HD13	1:A:512:ARG:HD3	16	1.22
(1,2621)	1:A:490:LEU:HD21	1:A:512:ARG:HD3	16	1.22
(1,2621)	1:A:490:LEU:HD22	1:A:512:ARG:HD3	16	1.22
(1,2621)	1:A:490:LEU:HD23	1:A:512:ARG:HD3	16	1.22
(1,2473)	1:A:458:SER:HB3	1:A:459:ASN:HA	2	1.22
(1,2350)	1:A:431:PHE:HA	1:A:432:GLN:HB3	10	1.22
(1,165)	1:A:463:ARG:HB3	1:A:465:SER:H	5	1.22
(1,165)	1:A:463:ARG:HB3	1:A:465:SER:H	16	1.22
(1,731)	1:A:538:ALA:H	1:A:539:MET:HB3	1	1.21

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,731)	1:A:538:ALA:H	1:A:539:MET:HB3	3	1.21
(1,511)	1:A:403:ARG:HD3	1:A:404:ALA:H	18	1.21
(1,2816)	1:A:533:LEU:H	1:A:534:GLN:HG3	17	1.21
(1,2680)	1:A:499:LEU:HB3	1:A:500:SER:HB3	2	1.21
(1,2680)	1:A:499:LEU:HB3	1:A:500:SER:HB3	16	1.21
(1,2485)	1:A:464:LEU:HD11	1:A:467:HIS:HB3	18	1.21
(1,2485)	1:A:464:LEU:HD12	1:A:467:HIS:HB3	18	1.21
(1,2485)	1:A:464:LEU:HD13	1:A:467:HIS:HB3	18	1.21
(1,2473)	1:A:458:SER:HB3	1:A:459:ASN:HA	20	1.21
(1,2412)	1:A:446:ILE:HG13	1:A:473:MET:HE1	1	1.21
(1,2412)	1:A:446:ILE:HG13	1:A:473:MET:HE2	1	1.21
(1,2412)	1:A:446:ILE:HG13	1:A:473:MET:HE3	1	1.21
(1,2350)	1:A:431:PHE:HA	1:A:432:GLN:HB3	12	1.21
(1,1789)	1:A:483:PRO:HG3	1:A:484:ASP:HA	5	1.21
(1,1638)	1:A:539:MET:HA	1:A:542:LYS:HB3	20	1.21
(1,653)	1:A:479:ARG:HD3	1:A:480:GLN:H	8	1.2
(1,387)	1:A:539:MET:H	1:A:540:TRP:HB3	3	1.2
(1,2827)	1:A:537:LYS:HG3	1:A:537:LYS:HE3	2	1.2
(1,2634)	1:A:491:PRO:HG3	1:A:494:SER:H	17	1.2
(1,2479)	1:A:463:ARG:HD3	1:A:464:LEU:H	8	1.2
(1,186)	1:A:507:LEU:H	1:A:508:SER:HB3	9	1.2
(1,1843)	1:A:502:ASP:HA	1:A:505:SER:HB3	13	1.2
(1,1752)	1:A:512:ARG:HD3	1:A:512:ARG:HH22	14	1.2
(1,1731)	1:A:532:ARG:HD3	1:A:533:LEU:H	18	1.2
(1,1638)	1:A:539:MET:HA	1:A:542:LYS:HB3	19	1.2
(1,754)	1:A:479:ARG:H	1:A:480:GLN:HG3	18	1.19
(1,2848)	1:A:544:GLN:HG3	1:A:545:ASP:H	14	1.19
(1,2590)	1:A:487:ILE:HG21	1:A:489:PHE:HB3	15	1.19
(1,2590)	1:A:487:ILE:HG22	1:A:489:PHE:HB3	15	1.19
(1,2590)	1:A:487:ILE:HG23	1:A:489:PHE:HB3	15	1.19
(1,2473)	1:A:458:SER:HB3	1:A:459:ASN:HA	7	1.19
(1,2257)	1:A:415:LYS:H	1:A:415:LYS:HE3	17	1.19
(1,1791)	1:A:538:ALA:HA	1:A:541:ARG:HB3	4	1.19
(1,1752)	1:A:512:ARG:HD3	1:A:512:ARG:HH22	18	1.19
(1,830)	1:A:532:ARG:HD3	1:A:535:ALA:H	20	1.18
(1,754)	1:A:479:ARG:H	1:A:480:GLN:HG3	4	1.18
(1,731)	1:A:538:ALA:H	1:A:539:MET:HB3	12	1.18
(1,2807)	1:A:529:LYS:HB3	1:A:529:LYS:HE3	11	1.18
(1,2807)	1:A:529:LYS:HB3	1:A:529:LYS:HE3	13	1.18
(1,2634)	1:A:491:PRO:HG3	1:A:494:SER:H	4	1.18
(1,2546)	1:A:476:ASN:HB3	1:A:479:ARG:HG3	7	1.18
(1,2473)	1:A:458:SER:HB3	1:A:459:ASN:HA	15	1.18

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2263)	1:A:415:LYS:HE3	1:A:520:PHE:HZ	10	1.18
(1,1789)	1:A:483:PRO:HG3	1:A:484:ASP:HA	1	1.18
(1,1789)	1:A:483:PRO:HG3	1:A:484:ASP:HA	15	1.18
(1,1789)	1:A:483:PRO:HG3	1:A:484:ASP:HA	19	1.18
(1,1705)	1:A:393:LYS:HE3	1:A:395:TYR:HE1	8	1.18
(1,1705)	1:A:393:LYS:HE3	1:A:395:TYR:HE2	8	1.18
(1,1599)	1:A:393:LYS:HD3	1:A:395:TYR:HD1	3	1.18
(1,1599)	1:A:393:LYS:HD3	1:A:395:TYR:HD2	3	1.18
(1,1136)	1:A:473:MET:HE1	1:A:482:SER:HB3	5	1.18
(1,1136)	1:A:473:MET:HE2	1:A:482:SER:HB3	5	1.18
(1,1136)	1:A:473:MET:HE3	1:A:482:SER:HB3	5	1.18
(1,2816)	1:A:533:LEU:H	1:A:534:GLN:HG3	16	1.17
(1,2633)	1:A:491:PRO:HG3	1:A:493:GLU:H	4	1.17
(1,2464)	1:A:456:LEU:HB3	1:A:490:LEU:HD11	2	1.17
(1,2464)	1:A:456:LEU:HB3	1:A:490:LEU:HD12	2	1.17
(1,2464)	1:A:456:LEU:HB3	1:A:490:LEU:HD13	2	1.17
(1,2464)	1:A:456:LEU:HB3	1:A:490:LEU:HD21	2	1.17
(1,2464)	1:A:456:LEU:HB3	1:A:490:LEU:HD22	2	1.17
(1,2464)	1:A:456:LEU:HB3	1:A:490:LEU:HD23	2	1.17
(1,2130)	1:A:387:GLU:HB3	1:A:390:SER:HA	1	1.17
(1,1753)	1:A:512:ARG:H	1:A:512:ARG:HD3	3	1.17
(1,1715)	1:A:529:LYS:HG3	1:A:529:LYS:HE3	19	1.17
(1,1540)	1:A:490:LEU:HD11	1:A:512:ARG:HD3	6	1.17
(1,1540)	1:A:490:LEU:HD12	1:A:512:ARG:HD3	6	1.17
(1,1540)	1:A:490:LEU:HD13	1:A:512:ARG:HD3	6	1.17
(1,1532)	1:A:490:LEU:HD21	1:A:512:ARG:HD3	12	1.17
(1,1532)	1:A:490:LEU:HD22	1:A:512:ARG:HD3	12	1.17
(1,1532)	1:A:490:LEU:HD23	1:A:512:ARG:HD3	12	1.17
(1,754)	1:A:479:ARG:H	1:A:480:GLN:HG3	17	1.16
(1,2848)	1:A:544:GLN:HG3	1:A:545:ASP:H	19	1.16
(1,2835)	1:A:541:ARG:HB3	1:A:541:ARG:HD3	4	1.16
(1,2807)	1:A:529:LYS:HB3	1:A:529:LYS:HE3	4	1.16
(1,2807)	1:A:529:LYS:HB3	1:A:529:LYS:HE3	7	1.16
(1,2807)	1:A:529:LYS:HB3	1:A:529:LYS:HE3	17	1.16
(1,2680)	1:A:499:LEU:HB3	1:A:500:SER:HB3	17	1.16
(1,2634)	1:A:491:PRO:HG3	1:A:494:SER:H	18	1.16
(1,2609)	1:A:490:LEU:HB3	1:A:512:ARG:HD3	6	1.16
(1,2590)	1:A:487:ILE:HG21	1:A:489:PHE:HB3	20	1.16
(1,2590)	1:A:487:ILE:HG22	1:A:489:PHE:HB3	20	1.16
(1,2590)	1:A:487:ILE:HG23	1:A:489:PHE:HB3	20	1.16
(1,2263)	1:A:415:LYS:HE3	1:A:520:PHE:HZ	17	1.16
(1,1791)	1:A:538:ALA:HA	1:A:541:ARG:HB3	6	1.16

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1791)	1:A:538:ALA:HA	1:A:541:ARG:HB3	11	1.16
(1,1789)	1:A:483:PRO:HG3	1:A:484:ASP:HA	2	1.16
(1,1743)	1:A:479:ARG:HA	1:A:479:ARG:HD3	14	1.16
(1,891)	1:A:393:LYS:H	1:A:393:LYS:HE3	13	1.15
(1,2829)	1:A:538:ALA:HB1	1:A:539:MET:HG3	15	1.15
(1,2829)	1:A:538:ALA:HB2	1:A:539:MET:HG3	15	1.15
(1,2829)	1:A:538:ALA:HB3	1:A:539:MET:HG3	15	1.15
(1,2816)	1:A:533:LEU:H	1:A:534:GLN:HG3	9	1.15
(1,2816)	1:A:533:LEU:H	1:A:534:GLN:HG3	10	1.15
(1,2621)	1:A:490:LEU:HD11	1:A:512:ARG:HD3	13	1.15
(1,2621)	1:A:490:LEU:HD12	1:A:512:ARG:HD3	13	1.15
(1,2621)	1:A:490:LEU:HD13	1:A:512:ARG:HD3	13	1.15
(1,2621)	1:A:490:LEU:HD21	1:A:512:ARG:HD3	13	1.15
(1,2621)	1:A:490:LEU:HD22	1:A:512:ARG:HD3	13	1.15
(1,2621)	1:A:490:LEU:HD23	1:A:512:ARG:HD3	13	1.15
(1,2464)	1:A:456:LEU:HB3	1:A:490:LEU:HD11	11	1.15
(1,2464)	1:A:456:LEU:HB3	1:A:490:LEU:HD12	11	1.15
(1,2464)	1:A:456:LEU:HB3	1:A:490:LEU:HD13	11	1.15
(1,2464)	1:A:456:LEU:HB3	1:A:490:LEU:HD21	11	1.15
(1,2464)	1:A:456:LEU:HB3	1:A:490:LEU:HD22	11	1.15
(1,2464)	1:A:456:LEU:HB3	1:A:490:LEU:HD23	11	1.15
(1,1789)	1:A:483:PRO:HG3	1:A:484:ASP:HA	9	1.15
(1,1656)	1:A:432:GLN:HG3	1:A:433:VAL:H	18	1.15
(1,1610)	1:A:394:PHE:HE1	1:A:537:LYS:HD3	10	1.15
(1,1610)	1:A:394:PHE:HE2	1:A:537:LYS:HD3	10	1.15
(1,1591)	1:A:531:HIS:HA	1:A:534:GLN:HB3	14	1.15
(1,830)	1:A:532:ARG:HD3	1:A:535:ALA:H	10	1.14
(1,653)	1:A:479:ARG:HD3	1:A:480:GLN:H	5	1.14
(1,54)	1:A:436:ARG:HD3	1:A:437:GLY:H	7	1.14
(1,2848)	1:A:544:GLN:HG3	1:A:545:ASP:H	2	1.14
(1,2729)	1:A:513:LEU:HA	1:A:523:LYS:HE3	9	1.14
(1,2464)	1:A:456:LEU:HB3	1:A:490:LEU:HD11	20	1.14
(1,2464)	1:A:456:LEU:HB3	1:A:490:LEU:HD12	20	1.14
(1,2464)	1:A:456:LEU:HB3	1:A:490:LEU:HD13	20	1.14
(1,2464)	1:A:456:LEU:HB3	1:A:490:LEU:HD21	20	1.14
(1,2464)	1:A:456:LEU:HB3	1:A:490:LEU:HD22	20	1.14
(1,2464)	1:A:456:LEU:HB3	1:A:490:LEU:HD23	20	1.14
(1,2412)	1:A:446:ILE:HG13	1:A:473:MET:HE1	17	1.14
(1,2412)	1:A:446:ILE:HG13	1:A:473:MET:HE2	17	1.14
(1,2412)	1:A:446:ILE:HG13	1:A:473:MET:HE3	17	1.14
(1,1964)	1:A:540:TRP:HA	1:A:541:ARG:HB3	6	1.14
(1,1656)	1:A:432:GLN:HG3	1:A:433:VAL:H	4	1.14

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1604)	1:A:542:LYS:HA	1:A:542:LYS:HD3	16	1.14
(1,806)	1:A:434:HIS:H	1:A:438:GLU:HG3	17	1.13
(1,449)	1:A:543:GLU:HB3	1:A:544:GLN:H	6	1.13
(1,449)	1:A:543:GLU:HB3	1:A:544:GLN:H	19	1.13
(1,2830)	1:A:538:ALA:HB1	1:A:541:ARG:HD3	14	1.13
(1,2830)	1:A:538:ALA:HB2	1:A:541:ARG:HD3	14	1.13
(1,2830)	1:A:538:ALA:HB3	1:A:541:ARG:HD3	14	1.13
(1,2807)	1:A:529:LYS:HB3	1:A:529:LYS:HE3	8	1.13
(1,2807)	1:A:529:LYS:HB3	1:A:529:LYS:HE3	18	1.13
(1,2634)	1:A:491:PRO:HG3	1:A:494:SER:H	14	1.13
(1,2562)	1:A:480:GLN:HB3	1:A:482:SER:HB3	10	1.13
(1,2495)	1:A:466:LEU:HB3	1:A:467:HIS:HB3	17	1.13
(1,2350)	1:A:431:PHE:HA	1:A:432:GLN:HB3	1	1.13
(1,2341)	1:A:428:CYS:HA	1:A:429:GLU:HB3	5	1.13
(1,1964)	1:A:540:TRP:HA	1:A:541:ARG:HB3	9	1.13
(1,1964)	1:A:540:TRP:HA	1:A:541:ARG:HB3	17	1.13
(1,1752)	1:A:512:ARG:HD3	1:A:512:ARG:HH22	2	1.13
(1,1678)	1:A:519:ILE:HB	1:A:522:ARG:HG3	19	1.13
(1,54)	1:A:436:ARG:HD3	1:A:437:GLY:H	16	1.12
(1,2145)	1:A:393:LYS:HG3	1:A:393:LYS:HE3	5	1.12
(1,2007)	1:A:462:CYS:HA	1:A:466:LEU:HB3	18	1.12
(1,1964)	1:A:540:TRP:HA	1:A:541:ARG:HB3	7	1.12
(1,1964)	1:A:540:TRP:HA	1:A:541:ARG:HB3	13	1.12
(1,1964)	1:A:540:TRP:HA	1:A:541:ARG:HB3	15	1.12
(1,1789)	1:A:483:PRO:HG3	1:A:484:ASP:HA	13	1.12
(1,1753)	1:A:512:ARG:H	1:A:512:ARG:HD3	11	1.12
(1,1625)	1:A:514:ASP:HA	1:A:515:GLU:HB3	10	1.12
(1,891)	1:A:393:LYS:H	1:A:393:LYS:HE3	19	1.11
(1,653)	1:A:479:ARG:HD3	1:A:480:GLN:H	18	1.11
(1,387)	1:A:539:MET:H	1:A:540:TRP:HB3	1	1.11
(1,2807)	1:A:529:LYS:HB3	1:A:529:LYS:HE3	5	1.11
(1,2680)	1:A:499:LEU:HB3	1:A:500:SER:HB3	10	1.11
(1,2634)	1:A:491:PRO:HG3	1:A:494:SER:H	6	1.11
(1,2495)	1:A:466:LEU:HB3	1:A:467:HIS:HB3	1	1.11
(1,2226)	1:A:408:ILE:HG21	1:A:494:SER:HB3	13	1.11
(1,2226)	1:A:408:ILE:HG22	1:A:494:SER:HB3	13	1.11
(1,2226)	1:A:408:ILE:HG23	1:A:494:SER:HB3	13	1.11
(1,1789)	1:A:483:PRO:HG3	1:A:484:ASP:HA	3	1.11
(1,1789)	1:A:483:PRO:HG3	1:A:484:ASP:HA	10	1.11
(1,1678)	1:A:519:ILE:HB	1:A:522:ARG:HG3	12	1.11
(1,1678)	1:A:519:ILE:HB	1:A:522:ARG:HG3	20	1.11
(1,1595)	1:A:470:ASN:H	1:A:471:GLN:HB3	10	1.11

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,945)	1:A:462:CYS:H	1:A:463:ARG:HB3	15	1.1
(1,858)	1:A:403:ARG:HG3	1:A:406:GLU:H	13	1.1
(1,830)	1:A:532:ARG:HD3	1:A:535:ALA:H	3	1.1
(1,806)	1:A:434:HIS:H	1:A:438:GLU:HG3	9	1.1
(1,754)	1:A:479:ARG:H	1:A:480:GLN:HG3	10	1.1
(1,51)	1:A:436:ARG:HG3	1:A:437:GLY:H	5	1.1
(1,51)	1:A:436:ARG:HG3	1:A:437:GLY:H	7	1.1
(1,2848)	1:A:544:GLN:HG3	1:A:545:ASP:H	3	1.1
(1,2842)	1:A:544:GLN:H	1:A:544:GLN:HG3	3	1.1
(1,2757)	1:A:515:GLU:HG3	1:A:516:HIS:H	16	1.1
(1,2479)	1:A:463:ARG:HD3	1:A:464:LEU:H	6	1.1
(1,2412)	1:A:446:ILE:HG13	1:A:473:MET:HE1	7	1.1
(1,2412)	1:A:446:ILE:HG13	1:A:473:MET:HE2	7	1.1
(1,2412)	1:A:446:ILE:HG13	1:A:473:MET:HE3	7	1.1
(1,1843)	1:A:502:ASP:HA	1:A:505:SER:HB3	18	1.1
(1,1753)	1:A:512:ARG:H	1:A:512:ARG:HD3	19	1.1
(1,1705)	1:A:393:LYS:HE3	1:A:395:TYR:HE1	6	1.1
(1,1705)	1:A:393:LYS:HE3	1:A:395:TYR:HE2	6	1.1
(1,1678)	1:A:519:ILE:HB	1:A:522:ARG:HG3	5	1.1
(1,1678)	1:A:519:ILE:HB	1:A:522:ARG:HG3	9	1.1
(1,1678)	1:A:519:ILE:HB	1:A:522:ARG:HG3	10	1.1
(1,1678)	1:A:519:ILE:HB	1:A:522:ARG:HG3	17	1.1
(1,1595)	1:A:470:ASN:H	1:A:471:GLN:HB3	16	1.1
(1,1591)	1:A:531:HIS:HA	1:A:534:GLN:HB3	3	1.1
(1,1163)	1:A:525:ALA:HB1	1:A:526:ASN:HB3	6	1.1
(1,1163)	1:A:525:ALA:HB2	1:A:526:ASN:HB3	6	1.1
(1,1163)	1:A:525:ALA:HB3	1:A:526:ASN:HB3	6	1.1
(1,1163)	1:A:525:ALA:HB1	1:A:526:ASN:HB3	9	1.1
(1,1163)	1:A:525:ALA:HB2	1:A:526:ASN:HB3	9	1.1
(1,1163)	1:A:525:ALA:HB3	1:A:526:ASN:HB3	9	1.1
(1,1163)	1:A:525:ALA:HB1	1:A:526:ASN:HB3	18	1.1
(1,1163)	1:A:525:ALA:HB2	1:A:526:ASN:HB3	18	1.1
(1,1163)	1:A:525:ALA:HB3	1:A:526:ASN:HB3	18	1.1
(1,830)	1:A:532:ARG:HD3	1:A:535:ALA:H	2	1.09
(1,830)	1:A:532:ARG:HD3	1:A:535:ALA:H	7	1.09
(1,754)	1:A:479:ARG:H	1:A:480:GLN:HG3	3	1.09
(1,387)	1:A:539:MET:H	1:A:540:TRP:HB3	14	1.09
(1,2807)	1:A:529:LYS:HB3	1:A:529:LYS:HE3	1	1.09
(1,2729)	1:A:513:LEU:HA	1:A:523:LYS:HE3	10	1.09
(1,2473)	1:A:458:SER:HB3	1:A:459:ASN:HA	18	1.09
(1,2257)	1:A:415:LYS:H	1:A:415:LYS:HE3	11	1.09
(1,2226)	1:A:408:ILE:HG21	1:A:494:SER:HB3	2	1.09

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2226)	1:A:408:ILE:HG22	1:A:494:SER:HB3	2	1.09
(1,2226)	1:A:408:ILE:HG23	1:A:494:SER:HB3	2	1.09
(1,2226)	1:A:408:ILE:HG21	1:A:494:SER:HB3	11	1.09
(1,2226)	1:A:408:ILE:HG22	1:A:494:SER:HB3	11	1.09
(1,2226)	1:A:408:ILE:HG23	1:A:494:SER:HB3	11	1.09
(1,2139)	1:A:392:GLN:HG3	1:A:393:LYS:H	4	1.09
(1,1843)	1:A:502:ASP:HA	1:A:505:SER:HB3	4	1.09
(1,1789)	1:A:483:PRO:HG3	1:A:484:ASP:HA	4	1.09
(1,1789)	1:A:483:PRO:HG3	1:A:484:ASP:HA	18	1.09
(1,1789)	1:A:483:PRO:HG3	1:A:484:ASP:HA	20	1.09
(1,1678)	1:A:519:ILE:HB	1:A:522:ARG:HG3	11	1.09
(1,1678)	1:A:519:ILE:HB	1:A:522:ARG:HG3	14	1.09
(1,1678)	1:A:519:ILE:HB	1:A:522:ARG:HG3	15	1.09
(1,1638)	1:A:539:MET:HA	1:A:542:LYS:HB3	3	1.09
(1,1638)	1:A:539:MET:HA	1:A:542:LYS:HB3	4	1.09
(1,1638)	1:A:539:MET:HA	1:A:542:LYS:HB3	17	1.09
(1,1540)	1:A:490:LEU:HD11	1:A:512:ARG:HD3	18	1.09
(1,1540)	1:A:490:LEU:HD12	1:A:512:ARG:HD3	18	1.09
(1,1540)	1:A:490:LEU:HD13	1:A:512:ARG:HD3	18	1.09
(1,1163)	1:A:525:ALA:HB1	1:A:526:ASN:HB3	2	1.09
(1,1163)	1:A:525:ALA:HB2	1:A:526:ASN:HB3	2	1.09
(1,1163)	1:A:525:ALA:HB3	1:A:526:ASN:HB3	2	1.09
(1,1163)	1:A:525:ALA:HB1	1:A:526:ASN:HB3	3	1.09
(1,1163)	1:A:525:ALA:HB2	1:A:526:ASN:HB3	3	1.09
(1,1163)	1:A:525:ALA:HB3	1:A:526:ASN:HB3	3	1.09
(1,1163)	1:A:525:ALA:HB1	1:A:526:ASN:HB3	4	1.09
(1,1163)	1:A:525:ALA:HB2	1:A:526:ASN:HB3	4	1.09
(1,1163)	1:A:525:ALA:HB3	1:A:526:ASN:HB3	4	1.09
(1,1163)	1:A:525:ALA:HB1	1:A:526:ASN:HB3	7	1.09
(1,1163)	1:A:525:ALA:HB2	1:A:526:ASN:HB3	7	1.09
(1,1163)	1:A:525:ALA:HB3	1:A:526:ASN:HB3	7	1.09
(1,1163)	1:A:525:ALA:HB1	1:A:526:ASN:HB3	8	1.09
(1,1163)	1:A:525:ALA:HB2	1:A:526:ASN:HB3	8	1.09
(1,1163)	1:A:525:ALA:HB3	1:A:526:ASN:HB3	8	1.09
(1,1163)	1:A:525:ALA:HB1	1:A:526:ASN:HB3	10	1.09
(1,1163)	1:A:525:ALA:HB2	1:A:526:ASN:HB3	10	1.09
(1,1163)	1:A:525:ALA:HB3	1:A:526:ASN:HB3	10	1.09
(1,1163)	1:A:525:ALA:HB1	1:A:526:ASN:HB3	14	1.09
(1,1163)	1:A:525:ALA:HB2	1:A:526:ASN:HB3	14	1.09
(1,1163)	1:A:525:ALA:HB3	1:A:526:ASN:HB3	14	1.09
(1,731)	1:A:538:ALA:H	1:A:539:MET:HB3	13	1.08
(1,51)	1:A:436:ARG:HG3	1:A:437:GLY:H	16	1.08

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,39)	1:A:435:GLY:H	1:A:438:GLU:HG3	17	1.08
(1,2807)	1:A:529:LYS:HB3	1:A:529:LYS:HE3	9	1.08
(1,2807)	1:A:529:LYS:HB3	1:A:529:LYS:HE3	10	1.08
(1,2683)	1:A:501:SER:H	1:A:502:ASP:HB3	19	1.08
(1,2680)	1:A:499:LEU:HB3	1:A:500:SER:HB3	19	1.08
(1,2350)	1:A:431:PHE:HA	1:A:432:GLN:HB3	14	1.08
(1,2264)	1:A:415:LYS:HE3	1:A:521:ALA:HB1	1	1.08
(1,2264)	1:A:415:LYS:HE3	1:A:521:ALA:HB2	1	1.08
(1,2264)	1:A:415:LYS:HE3	1:A:521:ALA:HB3	1	1.08
(1,1988)	1:A:403:ARG:HA	1:A:403:ARG:HD3	2	1.08
(1,1789)	1:A:483:PRO:HG3	1:A:484:ASP:HA	11	1.08
(1,1731)	1:A:532:ARG:HD3	1:A:533:LEU:H	14	1.08
(1,1678)	1:A:519:ILE:HB	1:A:522:ARG:HG3	1	1.08
(1,1678)	1:A:519:ILE:HB	1:A:522:ARG:HG3	2	1.08
(1,1678)	1:A:519:ILE:HB	1:A:522:ARG:HG3	3	1.08
(1,1678)	1:A:519:ILE:HB	1:A:522:ARG:HG3	8	1.08
(1,1638)	1:A:539:MET:HA	1:A:542:LYS:HB3	1	1.08
(1,1595)	1:A:470:ASN:H	1:A:471:GLN:HB3	15	1.08
(1,1235)	1:A:450:ALA:HB1	1:A:536:ARG:HD3	11	1.08
(1,1235)	1:A:450:ALA:HB2	1:A:536:ARG:HD3	11	1.08
(1,1235)	1:A:450:ALA:HB3	1:A:536:ARG:HD3	11	1.08
(1,1163)	1:A:525:ALA:HB1	1:A:526:ASN:HB3	11	1.08
(1,1163)	1:A:525:ALA:HB2	1:A:526:ASN:HB3	11	1.08
(1,1163)	1:A:525:ALA:HB3	1:A:526:ASN:HB3	11	1.08
(1,1163)	1:A:525:ALA:HB1	1:A:526:ASN:HB3	16	1.08
(1,1163)	1:A:525:ALA:HB2	1:A:526:ASN:HB3	16	1.08
(1,1163)	1:A:525:ALA:HB3	1:A:526:ASN:HB3	16	1.08
(1,945)	1:A:462:CYS:H	1:A:463:ARG:HB3	18	1.07
(1,754)	1:A:479:ARG:H	1:A:480:GLN:HG3	9	1.07
(1,511)	1:A:403:ARG:HD3	1:A:404:ALA:H	17	1.07
(1,51)	1:A:436:ARG:HG3	1:A:437:GLY:H	10	1.07
(1,2848)	1:A:544:GLN:HG3	1:A:545:ASP:H	11	1.07
(1,2807)	1:A:529:LYS:HB3	1:A:529:LYS:HE3	16	1.07
(1,2609)	1:A:490:LEU:HB3	1:A:512:ARG:HD3	13	1.07
(1,2257)	1:A:415:LYS:H	1:A:415:LYS:HE3	10	1.07
(1,2226)	1:A:408:ILE:HG21	1:A:494:SER:HB3	20	1.07
(1,2226)	1:A:408:ILE:HG22	1:A:494:SER:HB3	20	1.07
(1,2226)	1:A:408:ILE:HG23	1:A:494:SER:HB3	20	1.07
(1,2133)	1:A:392:GLN:H	1:A:392:GLN:HB3	7	1.07
(1,2029)	1:A:389:SER:H	1:A:390:SER:HB3	12	1.07
(1,1789)	1:A:483:PRO:HG3	1:A:484:ASP:HA	6	1.07
(1,1678)	1:A:519:ILE:HB	1:A:522:ARG:HG3	6	1.07

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1678)	1:A:519:ILE:HB	1:A:522:ARG:HG3	16	1.07
(1,1610)	1:A:394:PHE:HE1	1:A:537:LYS:HD3	15	1.07
(1,1610)	1:A:394:PHE:HE2	1:A:537:LYS:HD3	15	1.07
(1,1610)	1:A:394:PHE:HE1	1:A:537:LYS:HD3	16	1.07
(1,1610)	1:A:394:PHE:HE2	1:A:537:LYS:HD3	16	1.07
(1,1600)	1:A:393:LYS:H	1:A:393:LYS:HD3	6	1.07
(1,1595)	1:A:470:ASN:H	1:A:471:GLN:HB3	9	1.07
(1,1595)	1:A:470:ASN:H	1:A:471:GLN:HB3	17	1.07
(1,1591)	1:A:531:HIS:HA	1:A:534:GLN:HB3	8	1.07
(1,1540)	1:A:490:LEU:HD11	1:A:512:ARG:HD3	10	1.07
(1,1540)	1:A:490:LEU:HD12	1:A:512:ARG:HD3	10	1.07
(1,1540)	1:A:490:LEU:HD13	1:A:512:ARG:HD3	10	1.07
(1,1163)	1:A:525:ALA:HB1	1:A:526:ASN:HB3	12	1.07
(1,1163)	1:A:525:ALA:HB2	1:A:526:ASN:HB3	12	1.07
(1,1163)	1:A:525:ALA:HB3	1:A:526:ASN:HB3	12	1.07
(1,1163)	1:A:525:ALA:HB1	1:A:526:ASN:HB3	13	1.07
(1,1163)	1:A:525:ALA:HB2	1:A:526:ASN:HB3	13	1.07
(1,1163)	1:A:525:ALA:HB3	1:A:526:ASN:HB3	13	1.07
(1,1163)	1:A:525:ALA:HB1	1:A:526:ASN:HB3	17	1.07
(1,1163)	1:A:525:ALA:HB2	1:A:526:ASN:HB3	17	1.07
(1,1163)	1:A:525:ALA:HB3	1:A:526:ASN:HB3	17	1.07
(1,891)	1:A:393:LYS:H	1:A:393:LYS:HE3	12	1.06
(1,731)	1:A:538:ALA:H	1:A:539:MET:HB3	14	1.06
(1,51)	1:A:436:ARG:HG3	1:A:437:GLY:H	17	1.06
(1,2609)	1:A:490:LEU:HB3	1:A:512:ARG:HD3	12	1.06
(1,2591)	1:A:487:ILE:HG21	1:A:513:LEU:HB3	5	1.06
(1,2591)	1:A:487:ILE:HG22	1:A:513:LEU:HB3	5	1.06
(1,2591)	1:A:487:ILE:HG23	1:A:513:LEU:HB3	5	1.06
(1,2590)	1:A:487:ILE:HG21	1:A:489:PHE:HB3	7	1.06
(1,2590)	1:A:487:ILE:HG22	1:A:489:PHE:HB3	7	1.06
(1,2590)	1:A:487:ILE:HG23	1:A:489:PHE:HB3	7	1.06
(1,2590)	1:A:487:ILE:HG21	1:A:489:PHE:HB3	16	1.06
(1,2590)	1:A:487:ILE:HG22	1:A:489:PHE:HB3	16	1.06
(1,2590)	1:A:487:ILE:HG23	1:A:489:PHE:HB3	16	1.06
(1,2464)	1:A:456:LEU:HB3	1:A:490:LEU:HD11	8	1.06
(1,2464)	1:A:456:LEU:HB3	1:A:490:LEU:HD12	8	1.06
(1,2464)	1:A:456:LEU:HB3	1:A:490:LEU:HD13	8	1.06
(1,2464)	1:A:456:LEU:HB3	1:A:490:LEU:HD21	8	1.06
(1,2464)	1:A:456:LEU:HB3	1:A:490:LEU:HD22	8	1.06
(1,2464)	1:A:456:LEU:HB3	1:A:490:LEU:HD23	8	1.06
(1,2226)	1:A:408:ILE:HG21	1:A:494:SER:HB3	6	1.06
(1,2226)	1:A:408:ILE:HG22	1:A:494:SER:HB3	6	1.06

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2226)	1:A:408:ILE:HG23	1:A:494:SER:HB3	6	1.06
(1,2074)	1:A:393:LYS:HD3	1:A:395:TYR:HE1	9	1.06
(1,2074)	1:A:393:LYS:HD3	1:A:395:TYR:HE2	9	1.06
(1,1964)	1:A:540:TRP:HA	1:A:541:ARG:HB3	2	1.06
(1,1964)	1:A:540:TRP:HA	1:A:541:ARG:HB3	14	1.06
(1,1925)	1:A:427:PHE:HA	1:A:428:CYS:HB3	14	1.06
(1,1890)	1:A:431:PHE:HA	1:A:432:GLN:HG3	19	1.06
(1,1789)	1:A:483:PRO:HG3	1:A:484:ASP:HA	16	1.06
(1,1753)	1:A:512:ARG:H	1:A:512:ARG:HD3	1	1.06
(1,1678)	1:A:519:ILE:HB	1:A:522:ARG:HG3	4	1.06
(1,1678)	1:A:519:ILE:HB	1:A:522:ARG:HG3	7	1.06
(1,1678)	1:A:519:ILE:HB	1:A:522:ARG:HG3	13	1.06
(1,1656)	1:A:432:GLN:HG3	1:A:433:VAL:H	8	1.06
(1,1163)	1:A:525:ALA:HB1	1:A:526:ASN:HB3	1	1.06
(1,1163)	1:A:525:ALA:HB2	1:A:526:ASN:HB3	1	1.06
(1,1163)	1:A:525:ALA:HB3	1:A:526:ASN:HB3	1	1.06
(1,1163)	1:A:525:ALA:HB1	1:A:526:ASN:HB3	5	1.06
(1,1163)	1:A:525:ALA:HB2	1:A:526:ASN:HB3	5	1.06
(1,1163)	1:A:525:ALA:HB3	1:A:526:ASN:HB3	5	1.06
(1,1163)	1:A:525:ALA:HB1	1:A:526:ASN:HB3	19	1.06
(1,1163)	1:A:525:ALA:HB2	1:A:526:ASN:HB3	19	1.06
(1,1163)	1:A:525:ALA:HB3	1:A:526:ASN:HB3	19	1.06
(1,756)	1:A:479:ARG:H	1:A:479:ARG:HD3	18	1.05
(1,280)	1:A:527:THR:H	1:A:529:LYS:HG3	14	1.05
(1,2680)	1:A:499:LEU:HB3	1:A:500:SER:HB3	1	1.05
(1,2412)	1:A:446:ILE:HG13	1:A:473:MET:HE1	3	1.05
(1,2412)	1:A:446:ILE:HG13	1:A:473:MET:HE2	3	1.05
(1,2412)	1:A:446:ILE:HG13	1:A:473:MET:HE3	3	1.05
(1,2398)	1:A:443:GLN:HB3	1:A:446:ILE:HG21	20	1.05
(1,2398)	1:A:443:GLN:HB3	1:A:446:ILE:HG22	20	1.05
(1,2398)	1:A:443:GLN:HB3	1:A:446:ILE:HG23	20	1.05
(1,2341)	1:A:428:CYS:HA	1:A:429:GLU:HB3	13	1.05
(1,2264)	1:A:415:LYS:HE3	1:A:521:ALA:HB1	15	1.05
(1,2264)	1:A:415:LYS:HE3	1:A:521:ALA:HB2	15	1.05
(1,2264)	1:A:415:LYS:HE3	1:A:521:ALA:HB3	15	1.05
(1,2130)	1:A:387:GLU:HB3	1:A:390:SER:HA	8	1.05
(1,2074)	1:A:393:LYS:HD3	1:A:395:TYR:HE1	15	1.05
(1,2074)	1:A:393:LYS:HD3	1:A:395:TYR:HE2	15	1.05
(1,2007)	1:A:462:CYS:HA	1:A:466:LEU:HB3	1	1.05
(1,1964)	1:A:540:TRP:HA	1:A:541:ARG:HB3	3	1.05
(1,1964)	1:A:540:TRP:HA	1:A:541:ARG:HB3	4	1.05
(1,1964)	1:A:540:TRP:HA	1:A:541:ARG:HB3	11	1.05

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1789)	1:A:483:PRO:HG3	1:A:484:ASP:HA	8	1.05
(1,1789)	1:A:483:PRO:HG3	1:A:484:ASP:HA	12	1.05
(1,1789)	1:A:483:PRO:HG3	1:A:484:ASP:HA	17	1.05
(1,1678)	1:A:519:ILE:HB	1:A:522:ARG:HG3	18	1.05
(1,1163)	1:A:525:ALA:HB1	1:A:526:ASN:HB3	15	1.05
(1,1163)	1:A:525:ALA:HB2	1:A:526:ASN:HB3	15	1.05
(1,1163)	1:A:525:ALA:HB3	1:A:526:ASN:HB3	15	1.05
(1,1090)	1:A:518:GLN:HG3	1:A:519:ILE:HD11	17	1.05
(1,1090)	1:A:518:GLN:HG3	1:A:519:ILE:HD12	17	1.05
(1,1090)	1:A:518:GLN:HG3	1:A:519:ILE:HD13	17	1.05
(1,1010)	1:A:454:LEU:HB3	1:A:489:PHE:H	10	1.05
(1,555)	1:A:542:LYS:H	1:A:542:LYS:HE3	4	1.04
(1,523)	1:A:529:LYS:H	1:A:529:LYS:HE3	10	1.04
(1,2807)	1:A:529:LYS:HB3	1:A:529:LYS:HE3	6	1.04
(1,2683)	1:A:501:SER:H	1:A:502:ASP:HB3	10	1.04
(1,2464)	1:A:456:LEU:HB3	1:A:490:LEU:HD11	12	1.04
(1,2464)	1:A:456:LEU:HB3	1:A:490:LEU:HD12	12	1.04
(1,2464)	1:A:456:LEU:HB3	1:A:490:LEU:HD13	12	1.04
(1,2464)	1:A:456:LEU:HB3	1:A:490:LEU:HD21	12	1.04
(1,2464)	1:A:456:LEU:HB3	1:A:490:LEU:HD22	12	1.04
(1,2464)	1:A:456:LEU:HB3	1:A:490:LEU:HD23	12	1.04
(1,2350)	1:A:431:PHE:HA	1:A:432:GLN:HB3	16	1.04
(1,1964)	1:A:540:TRP:HA	1:A:541:ARG:HB3	19	1.04
(1,1950)	1:A:474:MET:HB3	1:A:475:SER:HA	3	1.04
(1,1753)	1:A:512:ARG:H	1:A:512:ARG:HD3	7	1.04
(1,1617)	1:A:415:LYS:H	1:A:415:LYS:HD3	19	1.04
(1,1595)	1:A:470:ASN:H	1:A:471:GLN:HB3	19	1.04
(1,1591)	1:A:531:HIS:HA	1:A:534:GLN:HB3	15	1.04
(1,1163)	1:A:525:ALA:HB1	1:A:526:ASN:HB3	20	1.04
(1,1163)	1:A:525:ALA:HB2	1:A:526:ASN:HB3	20	1.04
(1,1163)	1:A:525:ALA:HB3	1:A:526:ASN:HB3	20	1.04
(1,1010)	1:A:454:LEU:HB3	1:A:489:PHE:H	11	1.04
(1,678)	1:A:436:ARG:H	1:A:438:GLU:HG3	2	1.03
(1,2729)	1:A:513:LEU:HA	1:A:523:LYS:HE3	13	1.03
(1,2683)	1:A:501:SER:H	1:A:502:ASP:HB3	3	1.03
(1,2683)	1:A:501:SER:H	1:A:502:ASP:HB3	18	1.03
(1,2464)	1:A:456:LEU:HB3	1:A:490:LEU:HD11	1	1.03
(1,2464)	1:A:456:LEU:HB3	1:A:490:LEU:HD12	1	1.03
(1,2464)	1:A:456:LEU:HB3	1:A:490:LEU:HD13	1	1.03
(1,2464)	1:A:456:LEU:HB3	1:A:490:LEU:HD21	1	1.03
(1,2464)	1:A:456:LEU:HB3	1:A:490:LEU:HD22	1	1.03
(1,2464)	1:A:456:LEU:HB3	1:A:490:LEU:HD23	1	1.03

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2226)	1:A:408:ILE:HG21	1:A:494:SER:HB3	1	1.03
(1,2226)	1:A:408:ILE:HG22	1:A:494:SER:HB3	1	1.03
(1,2226)	1:A:408:ILE:HG23	1:A:494:SER:HB3	1	1.03
(1,1990)	1:A:505:SER:HA	1:A:508:SER:HB3	4	1.03
(1,1890)	1:A:431:PHE:HA	1:A:432:GLN:HG3	14	1.03
(1,1638)	1:A:539:MET:HA	1:A:542:LYS:HB3	14	1.03
(1,1625)	1:A:514:ASP:HA	1:A:515:GLU:HB3	6	1.03
(1,1591)	1:A:531:HIS:HA	1:A:534:GLN:HB3	1	1.03
(1,1577)	1:A:456:LEU:HG	1:A:462:CYS:HB3	13	1.03
(1,1532)	1:A:490:LEU:HD21	1:A:512:ARG:HD3	16	1.03
(1,1532)	1:A:490:LEU:HD22	1:A:512:ARG:HD3	16	1.03
(1,1532)	1:A:490:LEU:HD23	1:A:512:ARG:HD3	16	1.03
(1,1200)	1:A:532:ARG:HD3	1:A:535:ALA:HB1	2	1.03
(1,1200)	1:A:532:ARG:HD3	1:A:535:ALA:HB2	2	1.03
(1,1200)	1:A:532:ARG:HD3	1:A:535:ALA:HB3	2	1.03
(1,1090)	1:A:518:GLN:HG3	1:A:519:ILE:HD11	10	1.03
(1,1090)	1:A:518:GLN:HG3	1:A:519:ILE:HD12	10	1.03
(1,1090)	1:A:518:GLN:HG3	1:A:519:ILE:HD13	10	1.03
(1,1010)	1:A:454:LEU:HB3	1:A:489:PHE:H	8	1.03
(1,806)	1:A:434:HIS:H	1:A:438:GLU:HG3	19	1.02
(1,358)	1:A:387:GLU:HG3	1:A:390:SER:H	12	1.02
(1,2848)	1:A:544:GLN:HG3	1:A:545:ASP:H	16	1.02
(1,2683)	1:A:501:SER:H	1:A:502:ASP:HB3	9	1.02
(1,2683)	1:A:501:SER:H	1:A:502:ASP:HB3	17	1.02
(1,2634)	1:A:491:PRO:HG3	1:A:494:SER:H	10	1.02
(1,2621)	1:A:490:LEU:HD11	1:A:512:ARG:HD3	12	1.02
(1,2621)	1:A:490:LEU:HD12	1:A:512:ARG:HD3	12	1.02
(1,2621)	1:A:490:LEU:HD13	1:A:512:ARG:HD3	12	1.02
(1,2621)	1:A:490:LEU:HD21	1:A:512:ARG:HD3	12	1.02
(1,2621)	1:A:490:LEU:HD22	1:A:512:ARG:HD3	12	1.02
(1,2621)	1:A:490:LEU:HD23	1:A:512:ARG:HD3	12	1.02
(1,2609)	1:A:490:LEU:HB3	1:A:512:ARG:HD3	10	1.02
(1,2479)	1:A:463:ARG:HD3	1:A:464:LEU:H	5	1.02
(1,2412)	1:A:446:ILE:HG13	1:A:473:MET:HE1	6	1.02
(1,2412)	1:A:446:ILE:HG13	1:A:473:MET:HE2	6	1.02
(1,2412)	1:A:446:ILE:HG13	1:A:473:MET:HE3	6	1.02
(1,2257)	1:A:415:LYS:H	1:A:415:LYS:HE3	19	1.02
(1,2226)	1:A:408:ILE:HG21	1:A:494:SER:HB3	5	1.02
(1,2226)	1:A:408:ILE:HG22	1:A:494:SER:HB3	5	1.02
(1,2226)	1:A:408:ILE:HG23	1:A:494:SER:HB3	5	1.02
(1,1950)	1:A:474:MET:HB3	1:A:475:SER:HA	8	1.02
(1,1625)	1:A:514:ASP:HA	1:A:515:GLU:HB3	14	1.02

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1595)	1:A:470:ASN:H	1:A:471:GLN:HB3	3	1.02
(1,555)	1:A:542:LYS:H	1:A:542:LYS:HE3	5	1.01
(1,387)	1:A:539:MET:H	1:A:540:TRP:HB3	10	1.01
(1,2683)	1:A:501:SER:H	1:A:502:ASP:HB3	12	1.01
(1,2658)	1:A:493:GLU:HG3	1:A:494:SER:H	17	1.01
(1,2609)	1:A:490:LEU:HB3	1:A:512:ARG:HD3	15	1.01
(1,2590)	1:A:487:ILE:HG21	1:A:489:PHE:HB3	5	1.01
(1,2590)	1:A:487:ILE:HG22	1:A:489:PHE:HB3	5	1.01
(1,2590)	1:A:487:ILE:HG23	1:A:489:PHE:HB3	5	1.01
(1,2412)	1:A:446:ILE:HG13	1:A:473:MET:HE1	8	1.01
(1,2412)	1:A:446:ILE:HG13	1:A:473:MET:HE2	8	1.01
(1,2412)	1:A:446:ILE:HG13	1:A:473:MET:HE3	8	1.01
(1,2350)	1:A:431:PHE:HA	1:A:432:GLN:HB3	15	1.01
(1,1950)	1:A:474:MET:HB3	1:A:475:SER:HA	15	1.01
(1,1925)	1:A:427:PHE:HA	1:A:428:CYS:HB3	9	1.01
(1,1843)	1:A:502:ASP:HA	1:A:505:SER:HB3	20	1.01
(1,1789)	1:A:483:PRO:HG3	1:A:484:ASP:HA	7	1.01
(1,1768)	1:A:461:ASP:HA	1:A:462:CYS:HB3	18	1.01
(1,1595)	1:A:470:ASN:H	1:A:471:GLN:HB3	13	1.01
(1,1090)	1:A:518:GLN:HG3	1:A:519:ILE:HD11	11	1.01
(1,1090)	1:A:518:GLN:HG3	1:A:519:ILE:HD12	11	1.01
(1,1090)	1:A:518:GLN:HG3	1:A:519:ILE:HD13	11	1.01
(1,830)	1:A:532:ARG:HD3	1:A:535:ALA:H	15	1.0
(1,555)	1:A:542:LYS:H	1:A:542:LYS:HE3	8	1.0
(1,449)	1:A:543:GLU:HB3	1:A:544:GLN:H	3	1.0
(1,2683)	1:A:501:SER:H	1:A:502:ASP:HB3	4	1.0
(1,2634)	1:A:491:PRO:HG3	1:A:494:SER:H	12	1.0
(1,1950)	1:A:474:MET:HB3	1:A:475:SER:HA	5	1.0
(1,1925)	1:A:427:PHE:HA	1:A:428:CYS:HB3	19	1.0
(1,1638)	1:A:539:MET:HA	1:A:542:LYS:HB3	2	1.0
(1,1332)	1:A:398:VAL:HG11	1:A:449:SER:HB3	13	1.0
(1,1332)	1:A:398:VAL:HG12	1:A:449:SER:HB3	13	1.0
(1,1332)	1:A:398:VAL:HG13	1:A:449:SER:HB3	13	1.0
(1,1090)	1:A:518:GLN:HG3	1:A:519:ILE:HD11	20	1.0
(1,1090)	1:A:518:GLN:HG3	1:A:519:ILE:HD12	20	1.0
(1,1090)	1:A:518:GLN:HG3	1:A:519:ILE:HD13	20	1.0
(1,1010)	1:A:454:LEU:HB3	1:A:489:PHE:H	14	1.0
(1,600)	1:A:403:ARG:HB3	1:A:403:ARG:HE	14	0.99
(1,51)	1:A:436:ARG:HG3	1:A:437:GLY:H	18	0.99
(1,397)	1:A:536:ARG:H	1:A:536:ARG:HD3	10	0.99
(1,2848)	1:A:544:GLN:HG3	1:A:545:ASP:H	17	0.99
(1,265)	1:A:482:SER:H	1:A:482:SER:HB3	3	0.99

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2633)	1:A:491:PRO:HG3	1:A:493:GLU:H	18	0.99
(1,2350)	1:A:431:PHE:HA	1:A:432:GLN:HB3	2	0.99
(1,1950)	1:A:474:MET:HB3	1:A:475:SER:HA	6	0.99
(1,1950)	1:A:474:MET:HB3	1:A:475:SER:HA	9	0.99
(1,1200)	1:A:532:ARG:HD3	1:A:535:ALA:HB1	5	0.99
(1,1200)	1:A:532:ARG:HD3	1:A:535:ALA:HB2	5	0.99
(1,1200)	1:A:532:ARG:HD3	1:A:535:ALA:HB3	5	0.99
(1,754)	1:A:479:ARG:H	1:A:480:GLN:HG3	12	0.98
(1,2807)	1:A:529:LYS:HB3	1:A:529:LYS:HE3	20	0.98
(1,2729)	1:A:513:LEU:HA	1:A:523:LYS:HE3	19	0.98
(1,2634)	1:A:491:PRO:HG3	1:A:494:SER:H	19	0.98
(1,2546)	1:A:476:ASN:HB3	1:A:479:ARG:HG3	9	0.98
(1,2264)	1:A:415:LYS:HE3	1:A:521:ALA:HB1	8	0.98
(1,2264)	1:A:415:LYS:HE3	1:A:521:ALA:HB2	8	0.98
(1,2264)	1:A:415:LYS:HE3	1:A:521:ALA:HB3	8	0.98
(1,2133)	1:A:392:GLN:H	1:A:392:GLN:HB3	14	0.98
(1,2133)	1:A:392:GLN:H	1:A:392:GLN:HB3	20	0.98
(1,1890)	1:A:431:PHE:HA	1:A:432:GLN:HG3	17	0.98
(1,1768)	1:A:461:ASP:HA	1:A:462:CYS:HB3	1	0.98
(1,1768)	1:A:461:ASP:HA	1:A:462:CYS:HB3	6	0.98
(1,1768)	1:A:461:ASP:HA	1:A:462:CYS:HB3	16	0.98
(1,1753)	1:A:512:ARG:H	1:A:512:ARG:HD3	2	0.98
(1,1010)	1:A:454:LEU:HB3	1:A:489:PHE:H	2	0.98
(1,679)	1:A:436:ARG:H	1:A:436:ARG:HD3	19	0.97
(1,449)	1:A:543:GLU:HB3	1:A:544:GLN:H	20	0.97
(1,39)	1:A:435:GLY:H	1:A:438:GLU:HG3	15	0.97
(1,2838)	1:A:542:LYS:HG3	1:A:542:LYS:HE3	14	0.97
(1,2683)	1:A:501:SER:H	1:A:502:ASP:HB3	1	0.97
(1,2683)	1:A:501:SER:H	1:A:502:ASP:HB3	6	0.97
(1,2683)	1:A:501:SER:H	1:A:502:ASP:HB3	14	0.97
(1,2683)	1:A:501:SER:H	1:A:502:ASP:HB3	15	0.97
(1,2634)	1:A:491:PRO:HG3	1:A:494:SER:H	5	0.97
(1,2590)	1:A:487:ILE:HG21	1:A:489:PHE:HB3	8	0.97
(1,2590)	1:A:487:ILE:HG22	1:A:489:PHE:HB3	8	0.97
(1,2590)	1:A:487:ILE:HG23	1:A:489:PHE:HB3	8	0.97
(1,25)	1:A:479:ARG:HG3	1:A:481:GLY:H	2	0.97
(1,2265)	1:A:415:LYS:HE3	1:A:524:VAL:HG11	14	0.97
(1,2265)	1:A:415:LYS:HE3	1:A:524:VAL:HG12	14	0.97
(1,2265)	1:A:415:LYS:HE3	1:A:524:VAL:HG13	14	0.97
(1,2265)	1:A:415:LYS:HE3	1:A:524:VAL:HG21	14	0.97
(1,2265)	1:A:415:LYS:HE3	1:A:524:VAL:HG22	14	0.97
(1,2265)	1:A:415:LYS:HE3	1:A:524:VAL:HG23	14	0.97

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2226)	1:A:408:ILE:HG21	1:A:494:SER:HB3	10	0.97
(1,2226)	1:A:408:ILE:HG22	1:A:494:SER:HB3	10	0.97
(1,2226)	1:A:408:ILE:HG23	1:A:494:SER:HB3	10	0.97
(1,2130)	1:A:387:GLU:HB3	1:A:390:SER:HA	20	0.97
(1,2126)	1:A:529:LYS:HE3	1:A:531:HIS:HE1	3	0.97
(1,2007)	1:A:462:CYS:HA	1:A:466:LEU:HB3	14	0.97
(1,1950)	1:A:474:MET:HB3	1:A:475:SER:HA	12	0.97
(1,186)	1:A:507:LEU:H	1:A:508:SER:HB3	4	0.97
(1,1768)	1:A:461:ASP:HA	1:A:462:CYS:HB3	7	0.97
(1,1768)	1:A:461:ASP:HA	1:A:462:CYS:HB3	12	0.97
(1,1768)	1:A:461:ASP:HA	1:A:462:CYS:HB3	20	0.97
(1,1540)	1:A:490:LEU:HD11	1:A:512:ARG:HD3	14	0.97
(1,1540)	1:A:490:LEU:HD12	1:A:512:ARG:HD3	14	0.97
(1,1540)	1:A:490:LEU:HD13	1:A:512:ARG:HD3	14	0.97
(1,1432)	1:A:462:CYS:HB3	1:A:506:LEU:HD21	20	0.97
(1,1432)	1:A:462:CYS:HB3	1:A:506:LEU:HD22	20	0.97
(1,1432)	1:A:462:CYS:HB3	1:A:506:LEU:HD23	20	0.97
(1,1200)	1:A:532:ARG:HD3	1:A:535:ALA:HB1	20	0.97
(1,1200)	1:A:532:ARG:HD3	1:A:535:ALA:HB2	20	0.97
(1,1200)	1:A:532:ARG:HD3	1:A:535:ALA:HB3	20	0.97
(1,1090)	1:A:518:GLN:HG3	1:A:519:ILE:HD11	19	0.97
(1,1090)	1:A:518:GLN:HG3	1:A:519:ILE:HD12	19	0.97
(1,1090)	1:A:518:GLN:HG3	1:A:519:ILE:HD13	19	0.97
(1,561)	1:A:543:GLU:HB3	1:A:545:ASP:H	6	0.96
(1,51)	1:A:436:ARG:HG3	1:A:437:GLY:H	14	0.96
(1,2834)	1:A:541:ARG:HA	1:A:541:ARG:HD3	20	0.96
(1,2807)	1:A:529:LYS:HB3	1:A:529:LYS:HE3	3	0.96
(1,2683)	1:A:501:SER:H	1:A:502:ASP:HB3	8	0.96
(1,2683)	1:A:501:SER:H	1:A:502:ASP:HB3	11	0.96
(1,2658)	1:A:493:GLU:HG3	1:A:494:SER:H	14	0.96
(1,265)	1:A:482:SER:H	1:A:482:SER:HB3	7	0.96
(1,1950)	1:A:474:MET:HB3	1:A:475:SER:HA	4	0.96
(1,1950)	1:A:474:MET:HB3	1:A:475:SER:HA	11	0.96
(1,1950)	1:A:474:MET:HB3	1:A:475:SER:HA	18	0.96
(1,1950)	1:A:474:MET:HB3	1:A:475:SER:HA	19	0.96
(1,1950)	1:A:474:MET:HB3	1:A:475:SER:HA	20	0.96
(1,1776)	1:A:496:PRO:HB3	1:A:497:ALA:HA	4	0.96
(1,1776)	1:A:496:PRO:HB3	1:A:497:ALA:HA	14	0.96
(1,1776)	1:A:496:PRO:HB3	1:A:497:ALA:HA	15	0.96
(1,1768)	1:A:461:ASP:HA	1:A:462:CYS:HB3	4	0.96
(1,1768)	1:A:461:ASP:HA	1:A:462:CYS:HB3	5	0.96
(1,1768)	1:A:461:ASP:HA	1:A:462:CYS:HB3	10	0.96

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1768)	1:A:461:ASP:HA	1:A:462:CYS:HB3	14	0.96
(1,1768)	1:A:461:ASP:HA	1:A:462:CYS:HB3	19	0.96
(1,679)	1:A:436:ARG:H	1:A:436:ARG:HD3	7	0.95
(1,449)	1:A:543:GLU:HB3	1:A:544:GLN:H	10	0.95
(1,2848)	1:A:544:GLN:HG3	1:A:545:ASP:H	20	0.95
(1,2834)	1:A:541:ARG:HA	1:A:541:ARG:HD3	8	0.95
(1,2830)	1:A:538:ALA:HB1	1:A:541:ARG:HD3	15	0.95
(1,2830)	1:A:538:ALA:HB2	1:A:541:ARG:HD3	15	0.95
(1,2830)	1:A:538:ALA:HB3	1:A:541:ARG:HD3	15	0.95
(1,2807)	1:A:529:LYS:HB3	1:A:529:LYS:HE3	12	0.95
(1,2591)	1:A:487:ILE:HG21	1:A:513:LEU:HB3	14	0.95
(1,2591)	1:A:487:ILE:HG22	1:A:513:LEU:HB3	14	0.95
(1,2591)	1:A:487:ILE:HG23	1:A:513:LEU:HB3	14	0.95
(1,2546)	1:A:476:ASN:HB3	1:A:479:ARG:HG3	3	0.95
(1,2398)	1:A:443:GLN:HB3	1:A:446:ILE:HG21	1	0.95
(1,2398)	1:A:443:GLN:HB3	1:A:446:ILE:HG22	1	0.95
(1,2398)	1:A:443:GLN:HB3	1:A:446:ILE:HG23	1	0.95
(1,2007)	1:A:462:CYS:HA	1:A:466:LEU:HB3	11	0.95
(1,1950)	1:A:474:MET:HB3	1:A:475:SER:HA	2	0.95
(1,1950)	1:A:474:MET:HB3	1:A:475:SER:HA	10	0.95
(1,1950)	1:A:474:MET:HB3	1:A:475:SER:HA	14	0.95
(1,1843)	1:A:502:ASP:HA	1:A:505:SER:HB3	11	0.95
(1,1705)	1:A:393:LYS:HE3	1:A:395:TYR:HE1	2	0.95
(1,1705)	1:A:393:LYS:HE3	1:A:395:TYR:HE2	2	0.95
(1,165)	1:A:463:ARG:HB3	1:A:465:SER:H	8	0.95
(1,1617)	1:A:415:LYS:H	1:A:415:LYS:HD3	9	0.95
(1,1617)	1:A:415:LYS:H	1:A:415:LYS:HD3	11	0.95
(1,754)	1:A:479:ARG:H	1:A:480:GLN:HG3	11	0.94
(1,641)	1:A:501:SER:HB3	1:A:502:ASP:H	7	0.94
(1,620)	1:A:522:ARG:HB3	1:A:523:LYS:H	4	0.94
(1,620)	1:A:522:ARG:HB3	1:A:523:LYS:H	18	0.94
(1,51)	1:A:436:ARG:HG3	1:A:437:GLY:H	1	0.94
(1,387)	1:A:539:MET:H	1:A:540:TRP:HB3	20	0.94
(1,2834)	1:A:541:ARG:HA	1:A:541:ARG:HD3	18	0.94
(1,2683)	1:A:501:SER:H	1:A:502:ASP:HB3	5	0.94
(1,2658)	1:A:493:GLU:HG3	1:A:494:SER:H	10	0.94
(1,2464)	1:A:456:LEU:HB3	1:A:490:LEU:HD11	4	0.94
(1,2464)	1:A:456:LEU:HB3	1:A:490:LEU:HD12	4	0.94
(1,2464)	1:A:456:LEU:HB3	1:A:490:LEU:HD13	4	0.94
(1,2464)	1:A:456:LEU:HB3	1:A:490:LEU:HD21	4	0.94
(1,2464)	1:A:456:LEU:HB3	1:A:490:LEU:HD22	4	0.94
(1,2464)	1:A:456:LEU:HB3	1:A:490:LEU:HD23	4	0.94

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2398)	1:A:443:GLN:HB3	1:A:446:ILE:HG21	4	0.94
(1,2398)	1:A:443:GLN:HB3	1:A:446:ILE:HG22	4	0.94
(1,2398)	1:A:443:GLN:HB3	1:A:446:ILE:HG23	4	0.94
(1,2226)	1:A:408:ILE:HG21	1:A:494:SER:HB3	18	0.94
(1,2226)	1:A:408:ILE:HG22	1:A:494:SER:HB3	18	0.94
(1,2226)	1:A:408:ILE:HG23	1:A:494:SER:HB3	18	0.94
(1,2225)	1:A:408:ILE:HG21	1:A:493:GLU:HB3	7	0.94
(1,2225)	1:A:408:ILE:HG22	1:A:493:GLU:HB3	7	0.94
(1,2225)	1:A:408:ILE:HG23	1:A:493:GLU:HB3	7	0.94
(1,2156)	1:A:396:ASN:HB3	1:A:397:PHE:HE1	9	0.94
(1,2156)	1:A:396:ASN:HB3	1:A:397:PHE:HE2	9	0.94
(1,2052)	1:A:462:CYS:HB3	1:A:503:THR:HA	15	0.94
(1,1925)	1:A:427:PHE:HA	1:A:428:CYS:HB3	13	0.94
(1,1776)	1:A:496:PRO:HB3	1:A:497:ALA:HA	6	0.94
(1,1776)	1:A:496:PRO:HB3	1:A:497:ALA:HA	16	0.94
(1,1776)	1:A:496:PRO:HB3	1:A:497:ALA:HA	17	0.94
(1,1776)	1:A:496:PRO:HB3	1:A:497:ALA:HA	18	0.94
(1,1638)	1:A:539:MET:HA	1:A:542:LYS:HB3	11	0.94
(1,1617)	1:A:415:LYS:H	1:A:415:LYS:HD3	13	0.94
(1,1200)	1:A:532:ARG:HD3	1:A:535:ALA:HB1	9	0.94
(1,1200)	1:A:532:ARG:HD3	1:A:535:ALA:HB2	9	0.94
(1,1200)	1:A:532:ARG:HD3	1:A:535:ALA:HB3	9	0.94
(1,620)	1:A:522:ARG:HB3	1:A:523:LYS:H	7	0.93
(1,2729)	1:A:513:LEU:HA	1:A:523:LYS:HE3	12	0.93
(1,2634)	1:A:491:PRO:HG3	1:A:494:SER:H	15	0.93
(1,2633)	1:A:491:PRO:HG3	1:A:493:GLU:H	12	0.93
(1,2495)	1:A:466:LEU:HB3	1:A:467:HIS:HB3	18	0.93
(1,2464)	1:A:456:LEU:HB3	1:A:490:LEU:HD11	9	0.93
(1,2464)	1:A:456:LEU:HB3	1:A:490:LEU:HD12	9	0.93
(1,2464)	1:A:456:LEU:HB3	1:A:490:LEU:HD13	9	0.93
(1,2464)	1:A:456:LEU:HB3	1:A:490:LEU:HD21	9	0.93
(1,2464)	1:A:456:LEU:HB3	1:A:490:LEU:HD22	9	0.93
(1,2464)	1:A:456:LEU:HB3	1:A:490:LEU:HD23	9	0.93
(1,2350)	1:A:431:PHE:HA	1:A:432:GLN:HB3	8	0.93
(1,1950)	1:A:474:MET:HB3	1:A:475:SER:HA	13	0.93
(1,1950)	1:A:474:MET:HB3	1:A:475:SER:HA	16	0.93
(1,1950)	1:A:474:MET:HB3	1:A:475:SER:HA	17	0.93
(1,1776)	1:A:496:PRO:HB3	1:A:497:ALA:HA	1	0.93
(1,1776)	1:A:496:PRO:HB3	1:A:497:ALA:HA	3	0.93
(1,1776)	1:A:496:PRO:HB3	1:A:497:ALA:HA	5	0.93
(1,1776)	1:A:496:PRO:HB3	1:A:497:ALA:HA	9	0.93
(1,1776)	1:A:496:PRO:HB3	1:A:497:ALA:HA	10	0.93

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1776)	1:A:496:PRO:HB3	1:A:497:ALA:HA	20	0.93
(1,1638)	1:A:539:MET:HA	1:A:542:LYS:HB3	10	0.93
(1,1432)	1:A:462:CYS:HB3	1:A:506:LEU:HD21	14	0.93
(1,1432)	1:A:462:CYS:HB3	1:A:506:LEU:HD22	14	0.93
(1,1432)	1:A:462:CYS:HB3	1:A:506:LEU:HD23	14	0.93
(1,945)	1:A:462:CYS:H	1:A:463:ARG:HB3	16	0.92
(1,620)	1:A:522:ARG:HB3	1:A:523:LYS:H	9	0.92
(1,620)	1:A:522:ARG:HB3	1:A:523:LYS:H	11	0.92
(1,620)	1:A:522:ARG:HB3	1:A:523:LYS:H	13	0.92
(1,620)	1:A:522:ARG:HB3	1:A:523:LYS:H	15	0.92
(1,2848)	1:A:544:GLN:HG3	1:A:545:ASP:H	5	0.92
(1,2827)	1:A:537:LYS:HG3	1:A:537:LYS:HE3	19	0.92
(1,2816)	1:A:533:LEU:H	1:A:534:GLN:HG3	7	0.92
(1,2729)	1:A:513:LEU:HA	1:A:523:LYS:HE3	11	0.92
(1,265)	1:A:482:SER:H	1:A:482:SER:HB3	9	0.92
(1,2634)	1:A:491:PRO:HG3	1:A:494:SER:H	2	0.92
(1,2621)	1:A:490:LEU:HD11	1:A:512:ARG:HD3	10	0.92
(1,2621)	1:A:490:LEU:HD12	1:A:512:ARG:HD3	10	0.92
(1,2621)	1:A:490:LEU:HD13	1:A:512:ARG:HD3	10	0.92
(1,2621)	1:A:490:LEU:HD21	1:A:512:ARG:HD3	10	0.92
(1,2621)	1:A:490:LEU:HD22	1:A:512:ARG:HD3	10	0.92
(1,2621)	1:A:490:LEU:HD23	1:A:512:ARG:HD3	10	0.92
(1,2464)	1:A:456:LEU:HB3	1:A:490:LEU:HD11	15	0.92
(1,2464)	1:A:456:LEU:HB3	1:A:490:LEU:HD12	15	0.92
(1,2464)	1:A:456:LEU:HB3	1:A:490:LEU:HD13	15	0.92
(1,2464)	1:A:456:LEU:HB3	1:A:490:LEU:HD21	15	0.92
(1,2464)	1:A:456:LEU:HB3	1:A:490:LEU:HD22	15	0.92
(1,2464)	1:A:456:LEU:HB3	1:A:490:LEU:HD23	15	0.92
(1,2464)	1:A:456:LEU:HB3	1:A:490:LEU:HD11	18	0.92
(1,2464)	1:A:456:LEU:HB3	1:A:490:LEU:HD12	18	0.92
(1,2464)	1:A:456:LEU:HB3	1:A:490:LEU:HD13	18	0.92
(1,2464)	1:A:456:LEU:HB3	1:A:490:LEU:HD21	18	0.92
(1,2464)	1:A:456:LEU:HB3	1:A:490:LEU:HD22	18	0.92
(1,2464)	1:A:456:LEU:HB3	1:A:490:LEU:HD23	18	0.92
(1,1950)	1:A:474:MET:HB3	1:A:475:SER:HA	1	0.92
(1,1776)	1:A:496:PRO:HB3	1:A:497:ALA:HA	2	0.92
(1,1776)	1:A:496:PRO:HB3	1:A:497:ALA:HA	7	0.92
(1,1776)	1:A:496:PRO:HB3	1:A:497:ALA:HA	8	0.92
(1,1776)	1:A:496:PRO:HB3	1:A:497:ALA:HA	11	0.92
(1,1776)	1:A:496:PRO:HB3	1:A:497:ALA:HA	12	0.92
(1,1776)	1:A:496:PRO:HB3	1:A:497:ALA:HA	13	0.92
(1,1776)	1:A:496:PRO:HB3	1:A:497:ALA:HA	19	0.92

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1617)	1:A:415:LYS:H	1:A:415:LYS:HD3	4	0.92
(1,1605)	1:A:539:MET:HA	1:A:542:LYS:HD3	11	0.92
(1,1599)	1:A:393:LYS:HD3	1:A:395:TYR:HD1	14	0.92
(1,1599)	1:A:393:LYS:HD3	1:A:395:TYR:HD2	14	0.92
(1,1595)	1:A:470:ASN:H	1:A:471:GLN:HB3	2	0.92
(1,1595)	1:A:470:ASN:H	1:A:471:GLN:HB3	6	0.92
(1,1532)	1:A:490:LEU:HD21	1:A:512:ARG:HD3	13	0.92
(1,1532)	1:A:490:LEU:HD22	1:A:512:ARG:HD3	13	0.92
(1,1532)	1:A:490:LEU:HD23	1:A:512:ARG:HD3	13	0.92
(1,1432)	1:A:462:CYS:HB3	1:A:506:LEU:HD21	18	0.92
(1,1432)	1:A:462:CYS:HB3	1:A:506:LEU:HD22	18	0.92
(1,1432)	1:A:462:CYS:HB3	1:A:506:LEU:HD23	18	0.92
(1,1235)	1:A:450:ALA:HB1	1:A:536:ARG:HD3	2	0.92
(1,1235)	1:A:450:ALA:HB2	1:A:536:ARG:HD3	2	0.92
(1,1235)	1:A:450:ALA:HB3	1:A:536:ARG:HD3	2	0.92
(1,1200)	1:A:532:ARG:HD3	1:A:535:ALA:HB1	17	0.92
(1,1200)	1:A:532:ARG:HD3	1:A:535:ALA:HB2	17	0.92
(1,1200)	1:A:532:ARG:HD3	1:A:535:ALA:HB3	17	0.92
(1,1010)	1:A:454:LEU:HB3	1:A:489:PHE:H	5	0.92
(1,830)	1:A:532:ARG:HD3	1:A:535:ALA:H	8	0.91
(1,679)	1:A:436:ARG:H	1:A:436:ARG:HD3	16	0.91
(1,620)	1:A:522:ARG:HB3	1:A:523:LYS:H	1	0.91
(1,620)	1:A:522:ARG:HB3	1:A:523:LYS:H	2	0.91
(1,620)	1:A:522:ARG:HB3	1:A:523:LYS:H	8	0.91
(1,620)	1:A:522:ARG:HB3	1:A:523:LYS:H	16	0.91
(1,620)	1:A:522:ARG:HB3	1:A:523:LYS:H	20	0.91
(1,555)	1:A:542:LYS:H	1:A:542:LYS:HE3	6	0.91
(1,397)	1:A:536:ARG:H	1:A:536:ARG:HD3	9	0.91
(1,2729)	1:A:513:LEU:HA	1:A:523:LYS:HE3	2	0.91
(1,2634)	1:A:491:PRO:HG3	1:A:494:SER:H	1	0.91
(1,2634)	1:A:491:PRO:HG3	1:A:494:SER:H	13	0.91
(1,2621)	1:A:490:LEU:HD11	1:A:512:ARG:HD3	6	0.91
(1,2621)	1:A:490:LEU:HD12	1:A:512:ARG:HD3	6	0.91
(1,2621)	1:A:490:LEU:HD13	1:A:512:ARG:HD3	6	0.91
(1,2621)	1:A:490:LEU:HD21	1:A:512:ARG:HD3	6	0.91
(1,2621)	1:A:490:LEU:HD22	1:A:512:ARG:HD3	6	0.91
(1,2621)	1:A:490:LEU:HD23	1:A:512:ARG:HD3	6	0.91
(1,2481)	1:A:463:ARG:HE	1:A:502:ASP:HB3	14	0.91
(1,2480)	1:A:463:ARG:HD3	1:A:506:LEU:HD21	14	0.91
(1,2480)	1:A:463:ARG:HD3	1:A:506:LEU:HD22	14	0.91
(1,2480)	1:A:463:ARG:HD3	1:A:506:LEU:HD23	14	0.91
(1,2265)	1:A:415:LYS:HE3	1:A:524:VAL:HG11	16	0.91

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2265)	1:A:415:LYS:HE3	1:A:524:VAL:HG12	16	0.91
(1,2265)	1:A:415:LYS:HE3	1:A:524:VAL:HG13	16	0.91
(1,2265)	1:A:415:LYS:HE3	1:A:524:VAL:HG21	16	0.91
(1,2265)	1:A:415:LYS:HE3	1:A:524:VAL:HG22	16	0.91
(1,2265)	1:A:415:LYS:HE3	1:A:524:VAL:HG23	16	0.91
(1,2226)	1:A:408:ILE:HG21	1:A:494:SER:HB3	3	0.91
(1,2226)	1:A:408:ILE:HG22	1:A:494:SER:HB3	3	0.91
(1,2226)	1:A:408:ILE:HG23	1:A:494:SER:HB3	3	0.91
(1,2226)	1:A:408:ILE:HG21	1:A:494:SER:HB3	15	0.91
(1,2226)	1:A:408:ILE:HG22	1:A:494:SER:HB3	15	0.91
(1,2226)	1:A:408:ILE:HG23	1:A:494:SER:HB3	15	0.91
(1,2126)	1:A:529:LYS:HE3	1:A:531:HIS:HE1	16	0.91
(1,2122)	1:A:529:LYS:HG3	1:A:531:HIS:HE1	16	0.91
(1,1704)	1:A:393:LYS:HA	1:A:393:LYS:HE3	19	0.91
(1,1600)	1:A:393:LYS:H	1:A:393:LYS:HD3	17	0.91
(1,1595)	1:A:470:ASN:H	1:A:471:GLN:HB3	5	0.91
(1,129)	1:A:505:SER:H	1:A:505:SER:HB3	4	0.91
(1,1200)	1:A:532:ARG:HD3	1:A:535:ALA:HB1	7	0.91
(1,1200)	1:A:532:ARG:HD3	1:A:535:ALA:HB2	7	0.91
(1,1200)	1:A:532:ARG:HD3	1:A:535:ALA:HB3	7	0.91
(1,1010)	1:A:454:LEU:HB3	1:A:489:PHE:H	6	0.91
(1,530)	1:A:522:ARG:H	1:A:522:ARG:HB3	1	0.9
(1,530)	1:A:522:ARG:H	1:A:522:ARG:HB3	2	0.9
(1,530)	1:A:522:ARG:H	1:A:522:ARG:HB3	3	0.9
(1,530)	1:A:522:ARG:H	1:A:522:ARG:HB3	4	0.9
(1,530)	1:A:522:ARG:H	1:A:522:ARG:HB3	6	0.9
(1,530)	1:A:522:ARG:H	1:A:522:ARG:HB3	7	0.9
(1,530)	1:A:522:ARG:H	1:A:522:ARG:HB3	8	0.9
(1,530)	1:A:522:ARG:H	1:A:522:ARG:HB3	9	0.9
(1,530)	1:A:522:ARG:H	1:A:522:ARG:HB3	11	0.9
(1,530)	1:A:522:ARG:H	1:A:522:ARG:HB3	13	0.9
(1,530)	1:A:522:ARG:H	1:A:522:ARG:HB3	14	0.9
(1,530)	1:A:522:ARG:H	1:A:522:ARG:HB3	15	0.9
(1,530)	1:A:522:ARG:H	1:A:522:ARG:HB3	16	0.9
(1,530)	1:A:522:ARG:H	1:A:522:ARG:HB3	17	0.9
(1,530)	1:A:522:ARG:H	1:A:522:ARG:HB3	18	0.9
(1,368)	1:A:389:SER:H	1:A:389:SER:HB3	19	0.9
(1,2834)	1:A:541:ARG:HA	1:A:541:ARG:HD3	10	0.9
(1,2827)	1:A:537:LYS:HG3	1:A:537:LYS:HE3	8	0.9
(1,2827)	1:A:537:LYS:HG3	1:A:537:LYS:HE3	12	0.9
(1,2729)	1:A:513:LEU:HA	1:A:523:LYS:HE3	20	0.9
(1,2682)	1:A:500:SER:HB3	1:A:501:SER:H	18	0.9

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,265)	1:A:482:SER:H	1:A:482:SER:HB3	6	0.9
(1,265)	1:A:482:SER:H	1:A:482:SER:HB3	12	0.9
(1,2634)	1:A:491:PRO:HG3	1:A:494:SER:H	9	0.9
(1,2634)	1:A:491:PRO:HG3	1:A:494:SER:H	16	0.9
(1,25)	1:A:479:ARG:HG3	1:A:481:GLY:H	17	0.9
(1,2398)	1:A:443:GLN:HB3	1:A:446:ILE:HG21	2	0.9
(1,2398)	1:A:443:GLN:HB3	1:A:446:ILE:HG22	2	0.9
(1,2398)	1:A:443:GLN:HB3	1:A:446:ILE:HG23	2	0.9
(1,2341)	1:A:428:CYS:HA	1:A:429:GLU:HB3	15	0.9
(1,2264)	1:A:415:LYS:HE3	1:A:521:ALA:HB1	16	0.9
(1,2264)	1:A:415:LYS:HE3	1:A:521:ALA:HB2	16	0.9
(1,2264)	1:A:415:LYS:HE3	1:A:521:ALA:HB3	16	0.9
(1,2257)	1:A:415:LYS:H	1:A:415:LYS:HE3	18	0.9
(1,2074)	1:A:393:LYS:HD3	1:A:395:TYR:HE1	4	0.9
(1,2074)	1:A:393:LYS:HD3	1:A:395:TYR:HE2	4	0.9
(1,1950)	1:A:474:MET:HB3	1:A:475:SER:HA	7	0.9
(1,1617)	1:A:415:LYS:H	1:A:415:LYS:HD3	5	0.9
(1,1617)	1:A:415:LYS:H	1:A:415:LYS:HD3	20	0.9
(1,1200)	1:A:532:ARG:HD3	1:A:535:ALA:HB1	3	0.9
(1,1200)	1:A:532:ARG:HD3	1:A:535:ALA:HB2	3	0.9
(1,1200)	1:A:532:ARG:HD3	1:A:535:ALA:HB3	3	0.9
(1,108)	1:A:526:ASN:HD21	1:A:529:LYS:HE3	14	0.9
(1,108)	1:A:526:ASN:HD22	1:A:529:LYS:HE3	14	0.9
(1,676)	1:A:436:ARG:H	1:A:436:ARG:HG3	16	0.89
(1,620)	1:A:522:ARG:HB3	1:A:523:LYS:H	3	0.89
(1,530)	1:A:522:ARG:H	1:A:522:ARG:HB3	5	0.89
(1,530)	1:A:522:ARG:H	1:A:522:ARG:HB3	10	0.89
(1,530)	1:A:522:ARG:H	1:A:522:ARG:HB3	12	0.89
(1,530)	1:A:522:ARG:H	1:A:522:ARG:HB3	19	0.89
(1,530)	1:A:522:ARG:H	1:A:522:ARG:HB3	20	0.89
(1,524)	1:A:529:LYS:H	1:A:532:ARG:HD3	6	0.89
(1,2590)	1:A:487:ILE:HG21	1:A:489:PHE:HB3	2	0.89
(1,2590)	1:A:487:ILE:HG22	1:A:489:PHE:HB3	2	0.89
(1,2590)	1:A:487:ILE:HG23	1:A:489:PHE:HB3	2	0.89
(1,2074)	1:A:393:LYS:HD3	1:A:395:TYR:HE1	7	0.89
(1,2074)	1:A:393:LYS:HD3	1:A:395:TYR:HE2	7	0.89
(1,1925)	1:A:427:PHE:HA	1:A:428:CYS:HB3	18	0.89
(1,1595)	1:A:470:ASN:H	1:A:471:GLN:HB3	18	0.89
(1,1576)	1:A:462:CYS:HB3	1:A:506:LEU:HD11	8	0.89
(1,1576)	1:A:462:CYS:HB3	1:A:506:LEU:HD12	8	0.89
(1,1576)	1:A:462:CYS:HB3	1:A:506:LEU:HD13	8	0.89
(1,1432)	1:A:462:CYS:HB3	1:A:506:LEU:HD21	7	0.89

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1432)	1:A:462:CYS:HB3	1:A:506:LEU:HD22	7	0.89
(1,1432)	1:A:462:CYS:HB3	1:A:506:LEU:HD23	7	0.89
(1,1010)	1:A:454:LEU:HB3	1:A:489:PHE:H	7	0.89
(1,620)	1:A:522:ARG:HB3	1:A:523:LYS:H	12	0.88
(1,620)	1:A:522:ARG:HB3	1:A:523:LYS:H	19	0.88
(1,524)	1:A:529:LYS:H	1:A:532:ARG:HD3	1	0.88
(1,2634)	1:A:491:PRO:HG3	1:A:494:SER:H	8	0.88
(1,2591)	1:A:487:ILE:HG21	1:A:513:LEU:HB3	6	0.88
(1,2591)	1:A:487:ILE:HG22	1:A:513:LEU:HB3	6	0.88
(1,2591)	1:A:487:ILE:HG23	1:A:513:LEU:HB3	6	0.88
(1,2547)	1:A:476:ASN:HB3	1:A:480:GLN:H	1	0.88
(1,25)	1:A:479:ARG:HG3	1:A:481:GLY:H	16	0.88
(1,2263)	1:A:415:LYS:HE3	1:A:520:PHE:HZ	11	0.88
(1,2226)	1:A:408:ILE:HG21	1:A:494:SER:HB3	8	0.88
(1,2226)	1:A:408:ILE:HG22	1:A:494:SER:HB3	8	0.88
(1,2226)	1:A:408:ILE:HG23	1:A:494:SER:HB3	8	0.88
(1,1890)	1:A:431:PHE:HA	1:A:432:GLN:HG3	8	0.88
(1,1617)	1:A:415:LYS:H	1:A:415:LYS:HD3	2	0.88
(1,1599)	1:A:393:LYS:HD3	1:A:395:TYR:HD1	9	0.88
(1,1599)	1:A:393:LYS:HD3	1:A:395:TYR:HD2	9	0.88
(1,129)	1:A:505:SER:H	1:A:505:SER:HB3	15	0.88
(1,636)	1:A:463:ARG:HB3	1:A:464:LEU:H	5	0.87
(1,620)	1:A:522:ARG:HB3	1:A:523:LYS:H	17	0.87
(1,523)	1:A:529:LYS:H	1:A:529:LYS:HE3	2	0.87
(1,358)	1:A:387:GLU:HG3	1:A:390:SER:H	20	0.87
(1,2838)	1:A:542:LYS:HG3	1:A:542:LYS:HE3	5	0.87
(1,2838)	1:A:542:LYS:HG3	1:A:542:LYS:HE3	8	0.87
(1,2757)	1:A:515:GLU:HG3	1:A:516:HIS:H	13	0.87
(1,2658)	1:A:493:GLU:HG3	1:A:494:SER:H	4	0.87
(1,2239)	1:A:411:ARG:H	1:A:411:ARG:HD3	16	0.87
(1,1617)	1:A:415:LYS:H	1:A:415:LYS:HD3	3	0.87
(1,1600)	1:A:393:LYS:H	1:A:393:LYS:HD3	19	0.87
(1,1576)	1:A:462:CYS:HB3	1:A:506:LEU:HD11	15	0.87
(1,1576)	1:A:462:CYS:HB3	1:A:506:LEU:HD12	15	0.87
(1,1576)	1:A:462:CYS:HB3	1:A:506:LEU:HD13	15	0.87
(1,1432)	1:A:462:CYS:HB3	1:A:506:LEU:HD21	5	0.87
(1,1432)	1:A:462:CYS:HB3	1:A:506:LEU:HD22	5	0.87
(1,1432)	1:A:462:CYS:HB3	1:A:506:LEU:HD23	5	0.87
(1,1432)	1:A:462:CYS:HB3	1:A:506:LEU:HD21	10	0.87
(1,1432)	1:A:462:CYS:HB3	1:A:506:LEU:HD22	10	0.87
(1,1432)	1:A:462:CYS:HB3	1:A:506:LEU:HD23	10	0.87
(1,129)	1:A:505:SER:H	1:A:505:SER:HB3	20	0.87

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,891)	1:A:393:LYS:H	1:A:393:LYS:HE3	5	0.86
(1,620)	1:A:522:ARG:HB3	1:A:523:LYS:H	5	0.86
(1,620)	1:A:522:ARG:HB3	1:A:523:LYS:H	6	0.86
(1,620)	1:A:522:ARG:HB3	1:A:523:LYS:H	14	0.86
(1,265)	1:A:482:SER:H	1:A:482:SER:HB3	13	0.86
(1,2634)	1:A:491:PRO:HG3	1:A:494:SER:H	3	0.86
(1,2634)	1:A:491:PRO:HG3	1:A:494:SER:H	11	0.86
(1,2633)	1:A:491:PRO:HG3	1:A:493:GLU:H	16	0.86
(1,2609)	1:A:490:LEU:HB3	1:A:512:ARG:HD3	9	0.86
(1,254)	1:A:483:PRO:HG3	1:A:484:ASP:H	3	0.86
(1,254)	1:A:483:PRO:HG3	1:A:484:ASP:H	9	0.86
(1,2481)	1:A:463:ARG:HE	1:A:502:ASP:HB3	3	0.86
(1,2464)	1:A:456:LEU:HB3	1:A:490:LEU:HD11	3	0.86
(1,2464)	1:A:456:LEU:HB3	1:A:490:LEU:HD12	3	0.86
(1,2464)	1:A:456:LEU:HB3	1:A:490:LEU:HD13	3	0.86
(1,2464)	1:A:456:LEU:HB3	1:A:490:LEU:HD21	3	0.86
(1,2464)	1:A:456:LEU:HB3	1:A:490:LEU:HD22	3	0.86
(1,2464)	1:A:456:LEU:HB3	1:A:490:LEU:HD23	3	0.86
(1,2239)	1:A:411:ARG:H	1:A:411:ARG:HD3	4	0.86
(1,2122)	1:A:529:LYS:HG3	1:A:531:HIS:HE1	1	0.86
(1,2122)	1:A:529:LYS:HG3	1:A:531:HIS:HE1	18	0.86
(1,2007)	1:A:462:CYS:HA	1:A:466:LEU:HB3	17	0.86
(1,1617)	1:A:415:LYS:H	1:A:415:LYS:HD3	18	0.86
(1,1605)	1:A:539:MET:HA	1:A:542:LYS:HD3	12	0.86
(1,1595)	1:A:470:ASN:H	1:A:471:GLN:HB3	1	0.86
(1,1576)	1:A:462:CYS:HB3	1:A:506:LEU:HD11	20	0.86
(1,1576)	1:A:462:CYS:HB3	1:A:506:LEU:HD12	20	0.86
(1,1576)	1:A:462:CYS:HB3	1:A:506:LEU:HD13	20	0.86
(1,1540)	1:A:490:LEU:HD11	1:A:512:ARG:HD3	12	0.86
(1,1540)	1:A:490:LEU:HD12	1:A:512:ARG:HD3	12	0.86
(1,1540)	1:A:490:LEU:HD13	1:A:512:ARG:HD3	12	0.86
(1,1432)	1:A:462:CYS:HB3	1:A:506:LEU:HD21	4	0.86
(1,1432)	1:A:462:CYS:HB3	1:A:506:LEU:HD22	4	0.86
(1,1432)	1:A:462:CYS:HB3	1:A:506:LEU:HD23	4	0.86
(1,1136)	1:A:473:MET:HE1	1:A:482:SER:HB3	3	0.86
(1,1136)	1:A:473:MET:HE2	1:A:482:SER:HB3	3	0.86
(1,1136)	1:A:473:MET:HE3	1:A:482:SER:HB3	3	0.86
(1,891)	1:A:393:LYS:H	1:A:393:LYS:HE3	7	0.85
(1,830)	1:A:532:ARG:HD3	1:A:535:ALA:H	16	0.85
(1,756)	1:A:479:ARG:H	1:A:479:ARG:HD3	5	0.85
(1,51)	1:A:436:ARG:HG3	1:A:437:GLY:H	19	0.85
(1,2634)	1:A:491:PRO:HG3	1:A:494:SER:H	20	0.85

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2591)	1:A:487:ILE:HG21	1:A:513:LEU:HB3	10	0.85
(1,2591)	1:A:487:ILE:HG22	1:A:513:LEU:HB3	10	0.85
(1,2591)	1:A:487:ILE:HG23	1:A:513:LEU:HB3	10	0.85
(1,2590)	1:A:487:ILE:HG21	1:A:489:PHE:HB3	1	0.85
(1,2590)	1:A:487:ILE:HG22	1:A:489:PHE:HB3	1	0.85
(1,2590)	1:A:487:ILE:HG23	1:A:489:PHE:HB3	1	0.85
(1,254)	1:A:483:PRO:HG3	1:A:484:ASP:H	2	0.85
(1,254)	1:A:483:PRO:HG3	1:A:484:ASP:H	4	0.85
(1,254)	1:A:483:PRO:HG3	1:A:484:ASP:H	5	0.85
(1,2239)	1:A:411:ARG:H	1:A:411:ARG:HD3	10	0.85
(1,2226)	1:A:408:ILE:HG21	1:A:494:SER:HB3	16	0.85
(1,2226)	1:A:408:ILE:HG22	1:A:494:SER:HB3	16	0.85
(1,2226)	1:A:408:ILE:HG23	1:A:494:SER:HB3	16	0.85
(1,2148)	1:A:395:TYR:HA	1:A:396:ASN:HB3	19	0.85
(1,2126)	1:A:529:LYS:HE3	1:A:531:HIS:HE1	11	0.85
(1,2122)	1:A:529:LYS:HG3	1:A:531:HIS:HE1	9	0.85
(1,2122)	1:A:529:LYS:HG3	1:A:531:HIS:HE1	10	0.85
(1,1617)	1:A:415:LYS:H	1:A:415:LYS:HD3	6	0.85
(1,1609)	1:A:394:PHE:HD1	1:A:537:LYS:HD3	12	0.85
(1,1609)	1:A:394:PHE:HD2	1:A:537:LYS:HD3	12	0.85
(1,1608)	1:A:534:GLN:HA	1:A:537:LYS:HD3	3	0.85
(1,1595)	1:A:470:ASN:H	1:A:471:GLN:HB3	7	0.85
(1,1576)	1:A:462:CYS:HB3	1:A:506:LEU:HD11	2	0.85
(1,1576)	1:A:462:CYS:HB3	1:A:506:LEU:HD12	2	0.85
(1,1576)	1:A:462:CYS:HB3	1:A:506:LEU:HD13	2	0.85
(1,1010)	1:A:454:LEU:HB3	1:A:489:PHE:H	12	0.85
(1,806)	1:A:434:HIS:H	1:A:438:GLU:HG3	13	0.84
(1,641)	1:A:501:SER:HB3	1:A:502:ASP:H	15	0.84
(1,620)	1:A:522:ARG:HB3	1:A:523:LYS:H	10	0.84
(1,523)	1:A:529:LYS:H	1:A:529:LYS:HE3	19	0.84
(1,511)	1:A:403:ARG:HD3	1:A:404:ALA:H	14	0.84
(1,2700)	1:A:509:GLY:H	1:A:510:LEU:HB3	17	0.84
(1,2658)	1:A:493:GLU:HG3	1:A:494:SER:H	16	0.84
(1,265)	1:A:482:SER:H	1:A:482:SER:HB3	18	0.84
(1,2562)	1:A:480:GLN:HB3	1:A:482:SER:HB3	15	0.84
(1,254)	1:A:483:PRO:HG3	1:A:484:ASP:H	1	0.84
(1,254)	1:A:483:PRO:HG3	1:A:484:ASP:H	6	0.84
(1,254)	1:A:483:PRO:HG3	1:A:484:ASP:H	7	0.84
(1,254)	1:A:483:PRO:HG3	1:A:484:ASP:H	8	0.84
(1,254)	1:A:483:PRO:HG3	1:A:484:ASP:H	10	0.84
(1,254)	1:A:483:PRO:HG3	1:A:484:ASP:H	11	0.84
(1,254)	1:A:483:PRO:HG3	1:A:484:ASP:H	12	0.84

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,254)	1:A:483:PRO:HG3	1:A:484:ASP:H	13	0.84
(1,254)	1:A:483:PRO:HG3	1:A:484:ASP:H	14	0.84
(1,254)	1:A:483:PRO:HG3	1:A:484:ASP:H	15	0.84
(1,254)	1:A:483:PRO:HG3	1:A:484:ASP:H	16	0.84
(1,254)	1:A:483:PRO:HG3	1:A:484:ASP:H	17	0.84
(1,254)	1:A:483:PRO:HG3	1:A:484:ASP:H	18	0.84
(1,254)	1:A:483:PRO:HG3	1:A:484:ASP:H	19	0.84
(1,254)	1:A:483:PRO:HG3	1:A:484:ASP:H	20	0.84
(1,2480)	1:A:463:ARG:HD3	1:A:506:LEU:HD21	2	0.84
(1,2480)	1:A:463:ARG:HD3	1:A:506:LEU:HD22	2	0.84
(1,2480)	1:A:463:ARG:HD3	1:A:506:LEU:HD23	2	0.84
(1,2332)	1:A:422:PRO:HG3	1:A:423:ASP:H	5	0.84
(1,2226)	1:A:408:ILE:HG21	1:A:494:SER:HB3	19	0.84
(1,2226)	1:A:408:ILE:HG22	1:A:494:SER:HB3	19	0.84
(1,2226)	1:A:408:ILE:HG23	1:A:494:SER:HB3	19	0.84
(1,2133)	1:A:392:GLN:H	1:A:392:GLN:HB3	18	0.84
(1,2126)	1:A:529:LYS:HE3	1:A:531:HIS:HE1	1	0.84
(1,2122)	1:A:529:LYS:HG3	1:A:531:HIS:HE1	8	0.84
(1,2020)	1:A:504:ALA:HB1	1:A:505:SER:HB3	15	0.84
(1,2020)	1:A:504:ALA:HB2	1:A:505:SER:HB3	15	0.84
(1,2020)	1:A:504:ALA:HB3	1:A:505:SER:HB3	15	0.84
(1,1794)	1:A:534:GLN:HB3	1:A:535:ALA:HA	7	0.84
(1,1794)	1:A:534:GLN:HB3	1:A:535:ALA:HA	10	0.84
(1,1709)	1:A:542:LYS:HB3	1:A:542:LYS:HE3	16	0.84
(1,1432)	1:A:462:CYS:HB3	1:A:506:LEU:HD21	12	0.84
(1,1432)	1:A:462:CYS:HB3	1:A:506:LEU:HD22	12	0.84
(1,1432)	1:A:462:CYS:HB3	1:A:506:LEU:HD23	12	0.84
(1,1200)	1:A:532:ARG:HD3	1:A:535:ALA:HB1	13	0.84
(1,1200)	1:A:532:ARG:HD3	1:A:535:ALA:HB2	13	0.84
(1,1200)	1:A:532:ARG:HD3	1:A:535:ALA:HB3	13	0.84
(1,1136)	1:A:473:MET:HE1	1:A:482:SER:HB3	12	0.84
(1,1136)	1:A:473:MET:HE2	1:A:482:SER:HB3	12	0.84
(1,1136)	1:A:473:MET:HE3	1:A:482:SER:HB3	12	0.84
(1,1121)	1:A:536:ARG:HD3	1:A:539:MET:HE1	9	0.84
(1,1121)	1:A:536:ARG:HD3	1:A:539:MET:HE2	9	0.84
(1,1121)	1:A:536:ARG:HD3	1:A:539:MET:HE3	9	0.84
(1,1010)	1:A:454:LEU:HB3	1:A:489:PHE:H	17	0.84
(1,676)	1:A:436:ARG:H	1:A:436:ARG:HG3	14	0.83
(1,449)	1:A:543:GLU:HB3	1:A:544:GLN:H	14	0.83
(1,2827)	1:A:537:LYS:HG3	1:A:537:LYS:HE3	10	0.83
(1,2784)	1:A:523:LYS:HG3	1:A:524:VAL:H	15	0.83
(1,2784)	1:A:523:LYS:HG3	1:A:524:VAL:H	20	0.83

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2633)	1:A:491:PRO:HG3	1:A:493:GLU:H	7	0.83
(1,2621)	1:A:490:LEU:HD11	1:A:512:ARG:HD3	8	0.83
(1,2621)	1:A:490:LEU:HD12	1:A:512:ARG:HD3	8	0.83
(1,2621)	1:A:490:LEU:HD13	1:A:512:ARG:HD3	8	0.83
(1,2621)	1:A:490:LEU:HD21	1:A:512:ARG:HD3	8	0.83
(1,2621)	1:A:490:LEU:HD22	1:A:512:ARG:HD3	8	0.83
(1,2621)	1:A:490:LEU:HD23	1:A:512:ARG:HD3	8	0.83
(1,25)	1:A:479:ARG:HG3	1:A:481:GLY:H	6	0.83
(1,2464)	1:A:456:LEU:HB3	1:A:490:LEU:HD11	19	0.83
(1,2464)	1:A:456:LEU:HB3	1:A:490:LEU:HD12	19	0.83
(1,2464)	1:A:456:LEU:HB3	1:A:490:LEU:HD13	19	0.83
(1,2464)	1:A:456:LEU:HB3	1:A:490:LEU:HD21	19	0.83
(1,2464)	1:A:456:LEU:HB3	1:A:490:LEU:HD22	19	0.83
(1,2464)	1:A:456:LEU:HB3	1:A:490:LEU:HD23	19	0.83
(1,2265)	1:A:415:LYS:HE3	1:A:524:VAL:HG11	8	0.83
(1,2265)	1:A:415:LYS:HE3	1:A:524:VAL:HG12	8	0.83
(1,2265)	1:A:415:LYS:HE3	1:A:524:VAL:HG13	8	0.83
(1,2265)	1:A:415:LYS:HE3	1:A:524:VAL:HG21	8	0.83
(1,2265)	1:A:415:LYS:HE3	1:A:524:VAL:HG22	8	0.83
(1,2265)	1:A:415:LYS:HE3	1:A:524:VAL:HG23	8	0.83
(1,2263)	1:A:415:LYS:HE3	1:A:520:PHE:HZ	18	0.83
(1,2148)	1:A:395:TYR:HA	1:A:396:ASN:HB3	17	0.83
(1,1843)	1:A:502:ASP:HA	1:A:505:SER:HB3	15	0.83
(1,1794)	1:A:534:GLN:HB3	1:A:535:ALA:HA	16	0.83
(1,1715)	1:A:529:LYS:HG3	1:A:529:LYS:HE3	10	0.83
(1,165)	1:A:463:ARG:HB3	1:A:465:SER:H	19	0.83
(1,1540)	1:A:490:LEU:HD11	1:A:512:ARG:HD3	17	0.83
(1,1540)	1:A:490:LEU:HD12	1:A:512:ARG:HD3	17	0.83
(1,1540)	1:A:490:LEU:HD13	1:A:512:ARG:HD3	17	0.83
(1,129)	1:A:505:SER:H	1:A:505:SER:HB3	18	0.83
(1,1188)	1:A:538:ALA:HB1	1:A:539:MET:HB3	5	0.83
(1,1188)	1:A:538:ALA:HB2	1:A:539:MET:HB3	5	0.83
(1,1188)	1:A:538:ALA:HB3	1:A:539:MET:HB3	5	0.83
(1,1121)	1:A:536:ARG:HD3	1:A:539:MET:HE1	18	0.83
(1,1121)	1:A:536:ARG:HD3	1:A:539:MET:HE2	18	0.83
(1,1121)	1:A:536:ARG:HD3	1:A:539:MET:HE3	18	0.83
(1,561)	1:A:543:GLU:HB3	1:A:545:ASP:H	3	0.82
(1,561)	1:A:543:GLU:HB3	1:A:545:ASP:H	18	0.82
(1,449)	1:A:543:GLU:HB3	1:A:544:GLN:H	8	0.82
(1,2842)	1:A:544:GLN:H	1:A:544:GLN:HG3	14	0.82
(1,2661)	1:A:495:SER:H	1:A:495:SER:HB3	14	0.82
(1,2661)	1:A:495:SER:H	1:A:495:SER:HB3	17	0.82

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2658)	1:A:493:GLU:HG3	1:A:494:SER:H	19	0.82
(1,2596)	1:A:488:PRO:HG3	1:A:489:PHE:H	2	0.82
(1,2596)	1:A:488:PRO:HG3	1:A:489:PHE:H	8	0.82
(1,2596)	1:A:488:PRO:HG3	1:A:489:PHE:H	11	0.82
(1,2596)	1:A:488:PRO:HG3	1:A:489:PHE:H	15	0.82
(1,2596)	1:A:488:PRO:HG3	1:A:489:PHE:H	16	0.82
(1,2596)	1:A:488:PRO:HG3	1:A:489:PHE:H	18	0.82
(1,2596)	1:A:488:PRO:HG3	1:A:489:PHE:H	20	0.82
(1,2562)	1:A:480:GLN:HB3	1:A:482:SER:HB3	7	0.82
(1,2499)	1:A:466:LEU:HD11	1:A:467:HIS:HB3	17	0.82
(1,2499)	1:A:466:LEU:HD12	1:A:467:HIS:HB3	17	0.82
(1,2499)	1:A:466:LEU:HD13	1:A:467:HIS:HB3	17	0.82
(1,2499)	1:A:466:LEU:HD21	1:A:467:HIS:HB3	17	0.82
(1,2499)	1:A:466:LEU:HD22	1:A:467:HIS:HB3	17	0.82
(1,2499)	1:A:466:LEU:HD23	1:A:467:HIS:HB3	17	0.82
(1,2464)	1:A:456:LEU:HB3	1:A:490:LEU:HD11	5	0.82
(1,2464)	1:A:456:LEU:HB3	1:A:490:LEU:HD12	5	0.82
(1,2464)	1:A:456:LEU:HB3	1:A:490:LEU:HD13	5	0.82
(1,2464)	1:A:456:LEU:HB3	1:A:490:LEU:HD21	5	0.82
(1,2464)	1:A:456:LEU:HB3	1:A:490:LEU:HD22	5	0.82
(1,2464)	1:A:456:LEU:HB3	1:A:490:LEU:HD23	5	0.82
(1,2332)	1:A:422:PRO:HG3	1:A:423:ASP:H	4	0.82
(1,2265)	1:A:415:LYS:HE3	1:A:524:VAL:HG11	10	0.82
(1,2265)	1:A:415:LYS:HE3	1:A:524:VAL:HG12	10	0.82
(1,2265)	1:A:415:LYS:HE3	1:A:524:VAL:HG13	10	0.82
(1,2265)	1:A:415:LYS:HE3	1:A:524:VAL:HG21	10	0.82
(1,2265)	1:A:415:LYS:HE3	1:A:524:VAL:HG22	10	0.82
(1,2265)	1:A:415:LYS:HE3	1:A:524:VAL:HG23	10	0.82
(1,2239)	1:A:411:ARG:H	1:A:411:ARG:HD3	5	0.82
(1,2148)	1:A:395:TYR:HA	1:A:396:ASN:HB3	1	0.82
(1,2148)	1:A:395:TYR:HA	1:A:396:ASN:HB3	7	0.82
(1,2133)	1:A:392:GLN:H	1:A:392:GLN:HB3	4	0.82
(1,2122)	1:A:529:LYS:HG3	1:A:531:HIS:HE1	3	0.82
(1,1794)	1:A:534:GLN:HB3	1:A:535:ALA:HA	9	0.82
(1,1794)	1:A:534:GLN:HB3	1:A:535:ALA:HA	13	0.82
(1,1432)	1:A:462:CYS:HB3	1:A:506:LEU:HD21	1	0.82
(1,1432)	1:A:462:CYS:HB3	1:A:506:LEU:HD22	1	0.82
(1,1432)	1:A:462:CYS:HB3	1:A:506:LEU:HD23	1	0.82
(1,641)	1:A:501:SER:HB3	1:A:502:ASP:H	8	0.81
(1,641)	1:A:501:SER:HB3	1:A:502:ASP:H	13	0.81
(1,449)	1:A:543:GLU:HB3	1:A:544:GLN:H	18	0.81
(1,2837)	1:A:542:LYS:HA	1:A:542:LYS:HG3	11	0.81

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2784)	1:A:523:LYS:HG3	1:A:524:VAL:H	9	0.81
(1,2784)	1:A:523:LYS:HG3	1:A:524:VAL:H	12	0.81
(1,2661)	1:A:495:SER:H	1:A:495:SER:HB3	6	0.81
(1,2658)	1:A:493:GLU:HG3	1:A:494:SER:H	5	0.81
(1,2596)	1:A:488:PRO:HG3	1:A:489:PHE:H	1	0.81
(1,2596)	1:A:488:PRO:HG3	1:A:489:PHE:H	3	0.81
(1,2596)	1:A:488:PRO:HG3	1:A:489:PHE:H	4	0.81
(1,2596)	1:A:488:PRO:HG3	1:A:489:PHE:H	5	0.81
(1,2596)	1:A:488:PRO:HG3	1:A:489:PHE:H	6	0.81
(1,2596)	1:A:488:PRO:HG3	1:A:489:PHE:H	7	0.81
(1,2596)	1:A:488:PRO:HG3	1:A:489:PHE:H	9	0.81
(1,2596)	1:A:488:PRO:HG3	1:A:489:PHE:H	13	0.81
(1,2596)	1:A:488:PRO:HG3	1:A:489:PHE:H	14	0.81
(1,2596)	1:A:488:PRO:HG3	1:A:489:PHE:H	17	0.81
(1,2596)	1:A:488:PRO:HG3	1:A:489:PHE:H	19	0.81
(1,2481)	1:A:463:ARG:HE	1:A:502:ASP:HB3	17	0.81
(1,1794)	1:A:534:GLN:HB3	1:A:535:ALA:HA	6	0.81
(1,1794)	1:A:534:GLN:HB3	1:A:535:ALA:HA	17	0.81
(1,1794)	1:A:534:GLN:HB3	1:A:535:ALA:HA	18	0.81
(1,1794)	1:A:534:GLN:HB3	1:A:535:ALA:HA	20	0.81
(1,1752)	1:A:512:ARG:HD3	1:A:512:ARG:HH22	3	0.81
(1,1745)	1:A:479:ARG:HD3	1:A:479:ARG:HH22	3	0.81
(1,1745)	1:A:479:ARG:HD3	1:A:479:ARG:HH22	20	0.81
(1,165)	1:A:463:ARG:HB3	1:A:465:SER:H	15	0.81
(1,165)	1:A:463:ARG:HB3	1:A:465:SER:H	20	0.81
(1,1595)	1:A:470:ASN:H	1:A:471:GLN:HB3	8	0.81
(1,129)	1:A:505:SER:H	1:A:505:SER:HB3	13	0.81
(1,579)	1:A:532:ARG:HB3	1:A:533:LEU:H	12	0.8
(1,387)	1:A:539:MET:H	1:A:540:TRP:HB3	8	0.8
(1,2842)	1:A:544:GLN:H	1:A:544:GLN:HG3	2	0.8
(1,2816)	1:A:533:LEU:H	1:A:534:GLN:HG3	19	0.8
(1,2658)	1:A:493:GLU:HG3	1:A:494:SER:H	18	0.8
(1,2632)	1:A:491:PRO:HB3	1:A:494:SER:H	9	0.8
(1,2632)	1:A:491:PRO:HB3	1:A:494:SER:H	18	0.8
(1,2609)	1:A:490:LEU:HB3	1:A:512:ARG:HD3	4	0.8
(1,2596)	1:A:488:PRO:HG3	1:A:489:PHE:H	10	0.8
(1,2479)	1:A:463:ARG:HD3	1:A:464:LEU:H	17	0.8
(1,2357)	1:A:432:GLN:HB3	1:A:433:VAL:H	20	0.8
(1,2334)	1:A:422:PRO:HD3	1:A:423:ASP:H	5	0.8
(1,2148)	1:A:395:TYR:HA	1:A:396:ASN:HB3	18	0.8
(1,2122)	1:A:529:LYS:HG3	1:A:531:HIS:HE1	6	0.8
(1,2122)	1:A:529:LYS:HG3	1:A:531:HIS:HE1	13	0.8

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1794)	1:A:534:GLN:HB3	1:A:535:ALA:HA	11	0.8
(1,1794)	1:A:534:GLN:HB3	1:A:535:ALA:HA	19	0.8
(1,1745)	1:A:479:ARG:HD3	1:A:479:ARG:HH22	1	0.8
(1,1745)	1:A:479:ARG:HD3	1:A:479:ARG:HH22	17	0.8
(1,1595)	1:A:470:ASN:H	1:A:471:GLN:HB3	20	0.8
(1,1532)	1:A:490:LEU:HD21	1:A:512:ARG:HD3	8	0.8
(1,1532)	1:A:490:LEU:HD22	1:A:512:ARG:HD3	8	0.8
(1,1532)	1:A:490:LEU:HD23	1:A:512:ARG:HD3	8	0.8
(1,129)	1:A:505:SER:H	1:A:505:SER:HB3	11	0.8
(1,1200)	1:A:532:ARG:HD3	1:A:535:ALA:HB1	15	0.8
(1,1200)	1:A:532:ARG:HD3	1:A:535:ALA:HB2	15	0.8
(1,1200)	1:A:532:ARG:HD3	1:A:535:ALA:HB3	15	0.8
(1,105)	1:A:522:ARG:HG3	1:A:526:ASN:HD22	6	0.8
(1,105)	1:A:522:ARG:HG3	1:A:526:ASN:HD22	14	0.8
(1,1010)	1:A:454:LEU:HB3	1:A:489:PHE:H	15	0.8
(1,676)	1:A:436:ARG:H	1:A:436:ARG:HG3	19	0.79
(1,641)	1:A:501:SER:HB3	1:A:502:ASP:H	11	0.79
(1,561)	1:A:543:GLU:HB3	1:A:545:ASP:H	10	0.79
(1,561)	1:A:543:GLU:HB3	1:A:545:ASP:H	12	0.79
(1,51)	1:A:436:ARG:HG3	1:A:437:GLY:H	12	0.79
(1,2837)	1:A:542:LYS:HA	1:A:542:LYS:HG3	12	0.79
(1,2784)	1:A:523:LYS:HG3	1:A:524:VAL:H	3	0.79
(1,2710)	1:A:511:VAL:HA	1:A:512:ARG:HB3	20	0.79
(1,2683)	1:A:501:SER:H	1:A:502:ASP:HB3	20	0.79
(1,2658)	1:A:493:GLU:HG3	1:A:494:SER:H	3	0.79
(1,2632)	1:A:491:PRO:HB3	1:A:494:SER:H	10	0.79
(1,2596)	1:A:488:PRO:HG3	1:A:489:PHE:H	12	0.79
(1,2562)	1:A:480:GLN:HB3	1:A:482:SER:HB3	20	0.79
(1,25)	1:A:479:ARG:HG3	1:A:481:GLY:H	13	0.79
(1,2499)	1:A:466:LEU:HD11	1:A:467:HIS:HB3	10	0.79
(1,2499)	1:A:466:LEU:HD12	1:A:467:HIS:HB3	10	0.79
(1,2499)	1:A:466:LEU:HD13	1:A:467:HIS:HB3	10	0.79
(1,2499)	1:A:466:LEU:HD21	1:A:467:HIS:HB3	10	0.79
(1,2499)	1:A:466:LEU:HD22	1:A:467:HIS:HB3	10	0.79
(1,2499)	1:A:466:LEU:HD23	1:A:467:HIS:HB3	10	0.79
(1,2496)	1:A:466:LEU:HB3	1:A:469:VAL:HG11	17	0.79
(1,2496)	1:A:466:LEU:HB3	1:A:469:VAL:HG12	17	0.79
(1,2496)	1:A:466:LEU:HB3	1:A:469:VAL:HG13	17	0.79
(1,2496)	1:A:466:LEU:HB3	1:A:469:VAL:HG21	17	0.79
(1,2496)	1:A:466:LEU:HB3	1:A:469:VAL:HG22	17	0.79
(1,2496)	1:A:466:LEU:HB3	1:A:469:VAL:HG23	17	0.79
(1,2334)	1:A:422:PRO:HD3	1:A:423:ASP:H	4	0.79

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2332)	1:A:422:PRO:HG3	1:A:423:ASP:H	1	0.79
(1,2257)	1:A:415:LYS:H	1:A:415:LYS:HE3	9	0.79
(1,2126)	1:A:529:LYS:HE3	1:A:531:HIS:HE1	13	0.79
(1,1805)	1:A:526:ASN:HA	1:A:529:LYS:HG3	19	0.79
(1,1745)	1:A:479:ARG:HD3	1:A:479:ARG:HH22	18	0.79
(1,1716)	1:A:529:LYS:HB3	1:A:529:LYS:HE3	15	0.79
(1,1704)	1:A:393:LYS:HA	1:A:393:LYS:HE3	13	0.79
(1,1660)	1:A:518:GLN:HA	1:A:518:GLN:HG3	11	0.79
(1,1660)	1:A:518:GLN:HA	1:A:518:GLN:HG3	20	0.79
(1,1659)	1:A:480:GLN:HA	1:A:480:GLN:HG3	1	0.79
(1,1659)	1:A:480:GLN:HA	1:A:480:GLN:HG3	2	0.79
(1,1659)	1:A:480:GLN:HA	1:A:480:GLN:HG3	10	0.79
(1,1659)	1:A:480:GLN:HA	1:A:480:GLN:HG3	11	0.79
(1,1659)	1:A:480:GLN:HA	1:A:480:GLN:HG3	16	0.79
(1,1659)	1:A:480:GLN:HA	1:A:480:GLN:HG3	18	0.79
(1,1577)	1:A:456:LEU:HG	1:A:462:CYS:HB3	9	0.79
(1,1200)	1:A:532:ARG:HD3	1:A:535:ALA:HB1	18	0.79
(1,1200)	1:A:532:ARG:HD3	1:A:535:ALA:HB2	18	0.79
(1,1200)	1:A:532:ARG:HD3	1:A:535:ALA:HB3	18	0.79
(1,105)	1:A:522:ARG:HG3	1:A:526:ASN:HD22	7	0.79
(1,945)	1:A:462:CYS:H	1:A:463:ARG:HB3	6	0.78
(1,756)	1:A:479:ARG:H	1:A:479:ARG:HD3	8	0.78
(1,397)	1:A:536:ARG:H	1:A:536:ARG:HD3	6	0.78
(1,2842)	1:A:544:GLN:H	1:A:544:GLN:HG3	16	0.78
(1,2784)	1:A:523:LYS:HG3	1:A:524:VAL:H	2	0.78
(1,2784)	1:A:523:LYS:HG3	1:A:524:VAL:H	11	0.78
(1,2784)	1:A:523:LYS:HG3	1:A:524:VAL:H	14	0.78
(1,2784)	1:A:523:LYS:HG3	1:A:524:VAL:H	18	0.78
(1,2729)	1:A:513:LEU:HA	1:A:523:LYS:HE3	6	0.78
(1,2710)	1:A:511:VAL:HA	1:A:512:ARG:HB3	3	0.78
(1,2710)	1:A:511:VAL:HA	1:A:512:ARG:HB3	19	0.78
(1,2661)	1:A:495:SER:H	1:A:495:SER:HB3	2	0.78
(1,2661)	1:A:495:SER:H	1:A:495:SER:HB3	7	0.78
(1,2661)	1:A:495:SER:H	1:A:495:SER:HB3	10	0.78
(1,2661)	1:A:495:SER:H	1:A:495:SER:HB3	13	0.78
(1,2658)	1:A:493:GLU:HG3	1:A:494:SER:H	6	0.78
(1,2658)	1:A:493:GLU:HG3	1:A:494:SER:H	8	0.78
(1,2658)	1:A:493:GLU:HG3	1:A:494:SER:H	12	0.78
(1,2632)	1:A:491:PRO:HB3	1:A:494:SER:H	15	0.78
(1,2499)	1:A:466:LEU:HD11	1:A:467:HIS:HB3	1	0.78
(1,2499)	1:A:466:LEU:HD12	1:A:467:HIS:HB3	1	0.78
(1,2499)	1:A:466:LEU:HD13	1:A:467:HIS:HB3	1	0.78

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2499)	1:A:466:LEU:HD21	1:A:467:HIS:HB3	1	0.78
(1,2499)	1:A:466:LEU:HD22	1:A:467:HIS:HB3	1	0.78
(1,2499)	1:A:466:LEU:HD23	1:A:467:HIS:HB3	1	0.78
(1,2481)	1:A:463:ARG:HE	1:A:502:ASP:HB3	20	0.78
(1,2332)	1:A:422:PRO:HG3	1:A:423:ASP:H	2	0.78
(1,2263)	1:A:415:LYS:HE3	1:A:520:PHE:HZ	9	0.78
(1,2148)	1:A:395:TYR:HA	1:A:396:ASN:HB3	12	0.78
(1,2144)	1:A:393:LYS:HB3	1:A:393:LYS:HE3	5	0.78
(1,2133)	1:A:392:GLN:H	1:A:392:GLN:HB3	12	0.78
(1,2122)	1:A:529:LYS:HG3	1:A:531:HIS:HE1	11	0.78
(1,1745)	1:A:479:ARG:HD3	1:A:479:ARG:HH22	9	0.78
(1,1731)	1:A:532:ARG:HD3	1:A:533:LEU:H	16	0.78
(1,1660)	1:A:518:GLN:HA	1:A:518:GLN:HG3	10	0.78
(1,1660)	1:A:518:GLN:HA	1:A:518:GLN:HG3	17	0.78
(1,1660)	1:A:518:GLN:HA	1:A:518:GLN:HG3	19	0.78
(1,1659)	1:A:480:GLN:HA	1:A:480:GLN:HG3	5	0.78
(1,1659)	1:A:480:GLN:HA	1:A:480:GLN:HG3	12	0.78
(1,1605)	1:A:539:MET:HA	1:A:542:LYS:HD3	3	0.78
(1,1591)	1:A:531:HIS:HA	1:A:534:GLN:HB3	2	0.78
(1,1200)	1:A:532:ARG:HD3	1:A:535:ALA:HB1	14	0.78
(1,1200)	1:A:532:ARG:HD3	1:A:535:ALA:HB2	14	0.78
(1,1200)	1:A:532:ARG:HD3	1:A:535:ALA:HB3	14	0.78
(1,105)	1:A:522:ARG:HG3	1:A:526:ASN:HD22	1	0.78
(1,105)	1:A:522:ARG:HG3	1:A:526:ASN:HD22	2	0.78
(1,830)	1:A:532:ARG:HD3	1:A:535:ALA:H	13	0.77
(1,641)	1:A:501:SER:HB3	1:A:502:ASP:H	19	0.77
(1,449)	1:A:543:GLU:HB3	1:A:544:GLN:H	13	0.77
(1,2848)	1:A:544:GLN:HG3	1:A:545:ASP:H	6	0.77
(1,2842)	1:A:544:GLN:H	1:A:544:GLN:HG3	20	0.77
(1,2838)	1:A:542:LYS:HG3	1:A:542:LYS:HE3	4	0.77
(1,2837)	1:A:542:LYS:HA	1:A:542:LYS:HG3	3	0.77
(1,2830)	1:A:538:ALA:HB1	1:A:541:ARG:HD3	12	0.77
(1,2830)	1:A:538:ALA:HB2	1:A:541:ARG:HD3	12	0.77
(1,2830)	1:A:538:ALA:HB3	1:A:541:ARG:HD3	12	0.77
(1,2784)	1:A:523:LYS:HG3	1:A:524:VAL:H	4	0.77
(1,2784)	1:A:523:LYS:HG3	1:A:524:VAL:H	16	0.77
(1,2729)	1:A:513:LEU:HA	1:A:523:LYS:HE3	14	0.77
(1,2661)	1:A:495:SER:H	1:A:495:SER:HB3	1	0.77
(1,2661)	1:A:495:SER:H	1:A:495:SER:HB3	8	0.77
(1,2633)	1:A:491:PRO:HG3	1:A:493:GLU:H	17	0.77
(1,2632)	1:A:491:PRO:HB3	1:A:494:SER:H	1	0.77
(1,2632)	1:A:491:PRO:HB3	1:A:494:SER:H	6	0.77

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2632)	1:A:491:PRO:HB3	1:A:494:SER:H	14	0.77
(1,2632)	1:A:491:PRO:HB3	1:A:494:SER:H	17	0.77
(1,2499)	1:A:466:LEU:HD11	1:A:467:HIS:HB3	7	0.77
(1,2499)	1:A:466:LEU:HD12	1:A:467:HIS:HB3	7	0.77
(1,2499)	1:A:466:LEU:HD13	1:A:467:HIS:HB3	7	0.77
(1,2499)	1:A:466:LEU:HD21	1:A:467:HIS:HB3	7	0.77
(1,2499)	1:A:466:LEU:HD22	1:A:467:HIS:HB3	7	0.77
(1,2499)	1:A:466:LEU:HD23	1:A:467:HIS:HB3	7	0.77
(1,2398)	1:A:443:GLN:HB3	1:A:446:ILE:HG21	15	0.77
(1,2398)	1:A:443:GLN:HB3	1:A:446:ILE:HG22	15	0.77
(1,2398)	1:A:443:GLN:HB3	1:A:446:ILE:HG23	15	0.77
(1,2357)	1:A:432:GLN:HB3	1:A:433:VAL:H	9	0.77
(1,2334)	1:A:422:PRO:HD3	1:A:423:ASP:H	1	0.77
(1,2334)	1:A:422:PRO:HD3	1:A:423:ASP:H	2	0.77
(1,2332)	1:A:422:PRO:HG3	1:A:423:ASP:H	3	0.77
(1,2332)	1:A:422:PRO:HG3	1:A:423:ASP:H	13	0.77
(1,2332)	1:A:422:PRO:HG3	1:A:423:ASP:H	16	0.77
(1,2257)	1:A:415:LYS:H	1:A:415:LYS:HE3	6	0.77
(1,2226)	1:A:408:ILE:HG21	1:A:494:SER:HB3	12	0.77
(1,2226)	1:A:408:ILE:HG22	1:A:494:SER:HB3	12	0.77
(1,2226)	1:A:408:ILE:HG23	1:A:494:SER:HB3	12	0.77
(1,2126)	1:A:529:LYS:HE3	1:A:531:HIS:HE1	6	0.77
(1,2020)	1:A:504:ALA:HB1	1:A:505:SER:HB3	11	0.77
(1,2020)	1:A:504:ALA:HB2	1:A:505:SER:HB3	11	0.77
(1,2020)	1:A:504:ALA:HB3	1:A:505:SER:HB3	11	0.77
(1,1730)	1:A:531:HIS:HD2	1:A:532:ARG:HD3	20	0.77
(1,1659)	1:A:480:GLN:HA	1:A:480:GLN:HG3	14	0.77
(1,1599)	1:A:393:LYS:HD3	1:A:395:TYR:HD1	20	0.77
(1,1599)	1:A:393:LYS:HD3	1:A:395:TYR:HD2	20	0.77
(1,1595)	1:A:470:ASN:H	1:A:471:GLN:HB3	4	0.77
(1,1576)	1:A:462:CYS:HB3	1:A:506:LEU:HD11	11	0.77
(1,1576)	1:A:462:CYS:HB3	1:A:506:LEU:HD12	11	0.77
(1,1576)	1:A:462:CYS:HB3	1:A:506:LEU:HD13	11	0.77
(1,1540)	1:A:490:LEU:HD11	1:A:512:ARG:HD3	8	0.77
(1,1540)	1:A:490:LEU:HD12	1:A:512:ARG:HD3	8	0.77
(1,1540)	1:A:490:LEU:HD13	1:A:512:ARG:HD3	8	0.77
(1,105)	1:A:522:ARG:HG3	1:A:526:ASN:HD22	16	0.77
(1,2784)	1:A:523:LYS:HG3	1:A:524:VAL:H	7	0.76
(1,2714)	1:A:511:VAL:HG11	1:A:513:LEU:HB3	3	0.76
(1,2714)	1:A:511:VAL:HG12	1:A:513:LEU:HB3	3	0.76
(1,2714)	1:A:511:VAL:HG13	1:A:513:LEU:HB3	3	0.76
(1,2714)	1:A:511:VAL:HG21	1:A:513:LEU:HB3	3	0.76

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2714)	1:A:511:VAL:HG22	1:A:513:LEU:HB3	3	0.76
(1,2714)	1:A:511:VAL:HG23	1:A:513:LEU:HB3	3	0.76
(1,2661)	1:A:495:SER:H	1:A:495:SER:HB3	3	0.76
(1,2661)	1:A:495:SER:H	1:A:495:SER:HB3	9	0.76
(1,2661)	1:A:495:SER:H	1:A:495:SER:HB3	11	0.76
(1,2661)	1:A:495:SER:H	1:A:495:SER:HB3	15	0.76
(1,2661)	1:A:495:SER:H	1:A:495:SER:HB3	19	0.76
(1,265)	1:A:482:SER:H	1:A:482:SER:HB3	16	0.76
(1,2633)	1:A:491:PRO:HG3	1:A:493:GLU:H	1	0.76
(1,2633)	1:A:491:PRO:HG3	1:A:493:GLU:H	19	0.76
(1,2632)	1:A:491:PRO:HB3	1:A:494:SER:H	2	0.76
(1,2632)	1:A:491:PRO:HB3	1:A:494:SER:H	12	0.76
(1,2593)	1:A:487:ILE:HD11	1:A:488:PRO:HD3	15	0.76
(1,2593)	1:A:487:ILE:HD12	1:A:488:PRO:HD3	15	0.76
(1,2593)	1:A:487:ILE:HD13	1:A:488:PRO:HD3	15	0.76
(1,2495)	1:A:466:LEU:HB3	1:A:467:HIS:HB3	7	0.76
(1,2473)	1:A:458:SER:HB3	1:A:459:ASN:HA	16	0.76
(1,2334)	1:A:422:PRO:HD3	1:A:423:ASP:H	3	0.76
(1,2334)	1:A:422:PRO:HD3	1:A:423:ASP:H	13	0.76
(1,2334)	1:A:422:PRO:HD3	1:A:423:ASP:H	16	0.76
(1,2332)	1:A:422:PRO:HG3	1:A:423:ASP:H	6	0.76
(1,2265)	1:A:415:LYS:HE3	1:A:524:VAL:HG11	17	0.76
(1,2265)	1:A:415:LYS:HE3	1:A:524:VAL:HG12	17	0.76
(1,2265)	1:A:415:LYS:HE3	1:A:524:VAL:HG13	17	0.76
(1,2265)	1:A:415:LYS:HE3	1:A:524:VAL:HG21	17	0.76
(1,2265)	1:A:415:LYS:HE3	1:A:524:VAL:HG22	17	0.76
(1,2265)	1:A:415:LYS:HE3	1:A:524:VAL:HG23	17	0.76
(1,2215)	1:A:406:GLU:HG3	1:A:409:ALA:H	7	0.76
(1,2214)	1:A:406:GLU:HG3	1:A:407:HIS:HA	17	0.76
(1,2148)	1:A:395:TYR:HA	1:A:396:ASN:HB3	3	0.76
(1,2148)	1:A:395:TYR:HA	1:A:396:ASN:HB3	5	0.76
(1,2148)	1:A:395:TYR:HA	1:A:396:ASN:HB3	8	0.76
(1,2148)	1:A:395:TYR:HA	1:A:396:ASN:HB3	14	0.76
(1,2148)	1:A:395:TYR:HA	1:A:396:ASN:HB3	15	0.76
(1,2126)	1:A:529:LYS:HE3	1:A:531:HIS:HE1	12	0.76
(1,2052)	1:A:462:CYS:HB3	1:A:503:THR:HA	8	0.76
(1,1715)	1:A:529:LYS:HG3	1:A:529:LYS:HE3	2	0.76
(1,1659)	1:A:480:GLN:HA	1:A:480:GLN:HG3	17	0.76
(1,1332)	1:A:398:VAL:HG11	1:A:449:SER:HB3	16	0.76
(1,1332)	1:A:398:VAL:HG12	1:A:449:SER:HB3	16	0.76
(1,1332)	1:A:398:VAL:HG13	1:A:449:SER:HB3	16	0.76
(1,1203)	1:A:471:GLN:HB3	1:A:472:ALA:HB1	12	0.76

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1203)	1:A:471:GLN:HB3	1:A:472:ALA:HB2	12	0.76
(1,1203)	1:A:471:GLN:HB3	1:A:472:ALA:HB3	12	0.76
(1,1188)	1:A:538:ALA:HB1	1:A:539:MET:HB3	9	0.76
(1,1188)	1:A:538:ALA:HB2	1:A:539:MET:HB3	9	0.76
(1,1188)	1:A:538:ALA:HB3	1:A:539:MET:HB3	9	0.76
(1,105)	1:A:522:ARG:HG3	1:A:526:ASN:HD22	3	0.76
(1,105)	1:A:522:ARG:HG3	1:A:526:ASN:HD22	4	0.76
(1,105)	1:A:522:ARG:HG3	1:A:526:ASN:HD22	5	0.76
(1,105)	1:A:522:ARG:HG3	1:A:526:ASN:HD22	8	0.76
(1,105)	1:A:522:ARG:HG3	1:A:526:ASN:HD22	11	0.76
(1,945)	1:A:462:CYS:H	1:A:463:ARG:HB3	13	0.75
(1,891)	1:A:393:LYS:H	1:A:393:LYS:HE3	16	0.75
(1,710)	1:A:466:LEU:HB3	1:A:469:VAL:H	4	0.75
(1,710)	1:A:466:LEU:HB3	1:A:469:VAL:H	13	0.75
(1,636)	1:A:463:ARG:HB3	1:A:464:LEU:H	16	0.75
(1,561)	1:A:543:GLU:HB3	1:A:545:ASP:H	8	0.75
(1,449)	1:A:543:GLU:HB3	1:A:544:GLN:H	2	0.75
(1,415)	1:A:471:GLN:H	1:A:471:GLN:HB3	2	0.75
(1,415)	1:A:471:GLN:H	1:A:471:GLN:HB3	4	0.75
(1,415)	1:A:471:GLN:H	1:A:471:GLN:HB3	7	0.75
(1,415)	1:A:471:GLN:H	1:A:471:GLN:HB3	8	0.75
(1,415)	1:A:471:GLN:H	1:A:471:GLN:HB3	13	0.75
(1,415)	1:A:471:GLN:H	1:A:471:GLN:HB3	17	0.75
(1,358)	1:A:387:GLU:HG3	1:A:390:SER:H	19	0.75
(1,2784)	1:A:523:LYS:HG3	1:A:524:VAL:H	6	0.75
(1,2784)	1:A:523:LYS:HG3	1:A:524:VAL:H	8	0.75
(1,2685)	1:A:502:ASP:HB3	1:A:503:THR:H	2	0.75
(1,2661)	1:A:495:SER:H	1:A:495:SER:HB3	5	0.75
(1,2661)	1:A:495:SER:H	1:A:495:SER:HB3	12	0.75
(1,265)	1:A:482:SER:H	1:A:482:SER:HB3	4	0.75
(1,2632)	1:A:491:PRO:HB3	1:A:494:SER:H	4	0.75
(1,2632)	1:A:491:PRO:HB3	1:A:494:SER:H	5	0.75
(1,2632)	1:A:491:PRO:HB3	1:A:494:SER:H	19	0.75
(1,247)	1:A:410:LEU:H	1:A:410:LEU:HB3	4	0.75
(1,247)	1:A:410:LEU:H	1:A:410:LEU:HB3	5	0.75
(1,247)	1:A:410:LEU:H	1:A:410:LEU:HB3	6	0.75
(1,247)	1:A:410:LEU:H	1:A:410:LEU:HB3	9	0.75
(1,247)	1:A:410:LEU:H	1:A:410:LEU:HB3	10	0.75
(1,247)	1:A:410:LEU:H	1:A:410:LEU:HB3	12	0.75
(1,247)	1:A:410:LEU:H	1:A:410:LEU:HB3	16	0.75
(1,2334)	1:A:422:PRO:HD3	1:A:423:ASP:H	6	0.75
(1,2334)	1:A:422:PRO:HD3	1:A:423:ASP:H	12	0.75

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2334)	1:A:422:PRO:HD3	1:A:423:ASP:H	15	0.75
(1,2332)	1:A:422:PRO:HG3	1:A:423:ASP:H	12	0.75
(1,2332)	1:A:422:PRO:HG3	1:A:423:ASP:H	15	0.75
(1,2148)	1:A:395:TYR:HA	1:A:396:ASN:HB3	2	0.75
(1,2148)	1:A:395:TYR:HA	1:A:396:ASN:HB3	6	0.75
(1,2020)	1:A:504:ALA:HB1	1:A:505:SER:HB3	4	0.75
(1,2020)	1:A:504:ALA:HB2	1:A:505:SER:HB3	4	0.75
(1,2020)	1:A:504:ALA:HB3	1:A:505:SER:HB3	4	0.75
(1,1603)	1:A:536:ARG:HB3	1:A:537:LYS:H	13	0.75
(1,1591)	1:A:531:HIS:HA	1:A:534:GLN:HB3	5	0.75
(1,1136)	1:A:473:MET:HE1	1:A:482:SER:HB3	6	0.75
(1,1136)	1:A:473:MET:HE2	1:A:482:SER:HB3	6	0.75
(1,1136)	1:A:473:MET:HE3	1:A:482:SER:HB3	6	0.75
(1,105)	1:A:522:ARG:HG3	1:A:526:ASN:HD22	17	0.75
(1,105)	1:A:522:ARG:HG3	1:A:526:ASN:HD22	18	0.75
(1,1010)	1:A:454:LEU:HB3	1:A:489:PHE:H	3	0.75
(1,1010)	1:A:454:LEU:HB3	1:A:489:PHE:H	16	0.75
(1,1010)	1:A:454:LEU:HB3	1:A:489:PHE:H	19	0.75
(1,945)	1:A:462:CYS:H	1:A:463:ARG:HB3	1	0.74
(1,945)	1:A:462:CYS:H	1:A:463:ARG:HB3	11	0.74
(1,51)	1:A:436:ARG:HG3	1:A:437:GLY:H	15	0.74
(1,464)	1:A:492:LEU:H	1:A:515:GLU:HB3	10	0.74
(1,415)	1:A:471:GLN:H	1:A:471:GLN:HB3	1	0.74
(1,415)	1:A:471:GLN:H	1:A:471:GLN:HB3	3	0.74
(1,415)	1:A:471:GLN:H	1:A:471:GLN:HB3	5	0.74
(1,415)	1:A:471:GLN:H	1:A:471:GLN:HB3	6	0.74
(1,415)	1:A:471:GLN:H	1:A:471:GLN:HB3	15	0.74
(1,415)	1:A:471:GLN:H	1:A:471:GLN:HB3	18	0.74
(1,415)	1:A:471:GLN:H	1:A:471:GLN:HB3	19	0.74
(1,368)	1:A:389:SER:H	1:A:389:SER:HB3	16	0.74
(1,359)	1:A:390:SER:H	1:A:390:SER:HB3	2	0.74
(1,2848)	1:A:544:GLN:HG3	1:A:545:ASP:H	13	0.74
(1,2848)	1:A:544:GLN:HG3	1:A:545:ASP:H	15	0.74
(1,2827)	1:A:537:LYS:HG3	1:A:537:LYS:HE3	15	0.74
(1,2827)	1:A:537:LYS:HG3	1:A:537:LYS:HE3	16	0.74
(1,2685)	1:A:502:ASP:HB3	1:A:503:THR:H	13	0.74
(1,2633)	1:A:491:PRO:HG3	1:A:493:GLU:H	3	0.74
(1,25)	1:A:479:ARG:HG3	1:A:481:GLY:H	1	0.74
(1,2480)	1:A:463:ARG:HD3	1:A:506:LEU:HD21	10	0.74
(1,2480)	1:A:463:ARG:HD3	1:A:506:LEU:HD22	10	0.74
(1,2480)	1:A:463:ARG:HD3	1:A:506:LEU:HD23	10	0.74
(1,247)	1:A:410:LEU:H	1:A:410:LEU:HB3	1	0.74

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,247)	1:A:410:LEU:H	1:A:410:LEU:HB3	8	0.74
(1,247)	1:A:410:LEU:H	1:A:410:LEU:HB3	18	0.74
(1,2334)	1:A:422:PRO:HD3	1:A:423:ASP:H	10	0.74
(1,2332)	1:A:422:PRO:HG3	1:A:423:ASP:H	10	0.74
(1,2257)	1:A:415:LYS:H	1:A:415:LYS:HE3	20	0.74
(1,2148)	1:A:395:TYR:HA	1:A:396:ASN:HB3	13	0.74
(1,2020)	1:A:504:ALA:HB1	1:A:505:SER:HB3	20	0.74
(1,2020)	1:A:504:ALA:HB2	1:A:505:SER:HB3	20	0.74
(1,2020)	1:A:504:ALA:HB3	1:A:505:SER:HB3	20	0.74
(1,1853)	1:A:436:ARG:HA	1:A:436:ARG:HG3	6	0.74
(1,1709)	1:A:542:LYS:HB3	1:A:542:LYS:HE3	3	0.74
(1,1676)	1:A:416:LEU:HG	1:A:417:GLU:HG3	16	0.74
(1,1656)	1:A:432:GLN:HG3	1:A:433:VAL:H	16	0.74
(1,1540)	1:A:490:LEU:HD11	1:A:512:ARG:HD3	5	0.74
(1,1540)	1:A:490:LEU:HD12	1:A:512:ARG:HD3	5	0.74
(1,1540)	1:A:490:LEU:HD13	1:A:512:ARG:HD3	5	0.74
(1,1136)	1:A:473:MET:HE1	1:A:482:SER:HB3	18	0.74
(1,1136)	1:A:473:MET:HE2	1:A:482:SER:HB3	18	0.74
(1,1136)	1:A:473:MET:HE3	1:A:482:SER:HB3	18	0.74
(1,105)	1:A:522:ARG:HG3	1:A:526:ASN:HD22	10	0.74
(1,105)	1:A:522:ARG:HG3	1:A:526:ASN:HD22	12	0.74
(1,1010)	1:A:454:LEU:HB3	1:A:489:PHE:H	9	0.74
(1,710)	1:A:466:LEU:HB3	1:A:469:VAL:H	3	0.73
(1,710)	1:A:466:LEU:HB3	1:A:469:VAL:H	6	0.73
(1,710)	1:A:466:LEU:HB3	1:A:469:VAL:H	9	0.73
(1,676)	1:A:436:ARG:H	1:A:436:ARG:HG3	7	0.73
(1,641)	1:A:501:SER:HB3	1:A:502:ASP:H	12	0.73
(1,524)	1:A:529:LYS:H	1:A:532:ARG:HD3	4	0.73
(1,415)	1:A:471:GLN:H	1:A:471:GLN:HB3	9	0.73
(1,415)	1:A:471:GLN:H	1:A:471:GLN:HB3	10	0.73
(1,415)	1:A:471:GLN:H	1:A:471:GLN:HB3	16	0.73
(1,415)	1:A:471:GLN:H	1:A:471:GLN:HB3	20	0.73
(1,2838)	1:A:542:LYS:HG3	1:A:542:LYS:HE3	3	0.73
(1,2838)	1:A:542:LYS:HG3	1:A:542:LYS:HE3	6	0.73
(1,2784)	1:A:523:LYS:HG3	1:A:524:VAL:H	10	0.73
(1,2784)	1:A:523:LYS:HG3	1:A:524:VAL:H	13	0.73
(1,2784)	1:A:523:LYS:HG3	1:A:524:VAL:H	17	0.73
(1,2758)	1:A:515:GLU:HG3	1:A:520:PHE:HE1	10	0.73
(1,2758)	1:A:515:GLU:HG3	1:A:520:PHE:HE2	10	0.73
(1,2683)	1:A:501:SER:H	1:A:502:ASP:HB3	7	0.73
(1,2658)	1:A:493:GLU:HG3	1:A:494:SER:H	13	0.73
(1,265)	1:A:482:SER:H	1:A:482:SER:HB3	11	0.73

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2632)	1:A:491:PRO:HB3	1:A:494:SER:H	8	0.73
(1,2632)	1:A:491:PRO:HB3	1:A:494:SER:H	20	0.73
(1,2621)	1:A:490:LEU:HD11	1:A:512:ARG:HD3	14	0.73
(1,2621)	1:A:490:LEU:HD12	1:A:512:ARG:HD3	14	0.73
(1,2621)	1:A:490:LEU:HD13	1:A:512:ARG:HD3	14	0.73
(1,2621)	1:A:490:LEU:HD21	1:A:512:ARG:HD3	14	0.73
(1,2621)	1:A:490:LEU:HD22	1:A:512:ARG:HD3	14	0.73
(1,2621)	1:A:490:LEU:HD23	1:A:512:ARG:HD3	14	0.73
(1,2590)	1:A:487:ILE:HG21	1:A:489:PHE:HB3	11	0.73
(1,2590)	1:A:487:ILE:HG22	1:A:489:PHE:HB3	11	0.73
(1,2590)	1:A:487:ILE:HG23	1:A:489:PHE:HB3	11	0.73
(1,2557)	1:A:479:ARG:HH22	1:A:480:GLN:H	18	0.73
(1,2532)	1:A:472:ALA:HB1	1:A:475:SER:HB3	10	0.73
(1,2532)	1:A:472:ALA:HB2	1:A:475:SER:HB3	10	0.73
(1,2532)	1:A:472:ALA:HB3	1:A:475:SER:HB3	10	0.73
(1,2502)	1:A:467:HIS:HA	1:A:470:ASN:HB3	4	0.73
(1,2481)	1:A:463:ARG:HE	1:A:502:ASP:HB3	8	0.73
(1,247)	1:A:410:LEU:H	1:A:410:LEU:HB3	2	0.73
(1,247)	1:A:410:LEU:H	1:A:410:LEU:HB3	3	0.73
(1,2401)	1:A:443:GLN:HG3	1:A:472:ALA:HB1	18	0.73
(1,2401)	1:A:443:GLN:HG3	1:A:472:ALA:HB2	18	0.73
(1,2401)	1:A:443:GLN:HG3	1:A:472:ALA:HB3	18	0.73
(1,2346)	1:A:430:ASP:HB3	1:A:431:PHE:H	2	0.73
(1,2334)	1:A:422:PRO:HD3	1:A:423:ASP:H	7	0.73
(1,2334)	1:A:422:PRO:HD3	1:A:423:ASP:H	8	0.73
(1,2334)	1:A:422:PRO:HD3	1:A:423:ASP:H	9	0.73
(1,2334)	1:A:422:PRO:HD3	1:A:423:ASP:H	17	0.73
(1,2334)	1:A:422:PRO:HD3	1:A:423:ASP:H	20	0.73
(1,2332)	1:A:422:PRO:HG3	1:A:423:ASP:H	8	0.73
(1,2332)	1:A:422:PRO:HG3	1:A:423:ASP:H	17	0.73
(1,2332)	1:A:422:PRO:HG3	1:A:423:ASP:H	20	0.73
(1,2148)	1:A:395:TYR:HA	1:A:396:ASN:HB3	4	0.73
(1,2052)	1:A:462:CYS:HB3	1:A:503:THR:HA	17	0.73
(1,1853)	1:A:436:ARG:HA	1:A:436:ARG:HG3	2	0.73
(1,1617)	1:A:415:LYS:H	1:A:415:LYS:HD3	7	0.73
(1,1599)	1:A:393:LYS:HD3	1:A:395:TYR:HD1	7	0.73
(1,1599)	1:A:393:LYS:HD3	1:A:395:TYR:HD2	7	0.73
(1,1532)	1:A:490:LEU:HD21	1:A:512:ARG:HD3	10	0.73
(1,1532)	1:A:490:LEU:HD22	1:A:512:ARG:HD3	10	0.73
(1,1532)	1:A:490:LEU:HD23	1:A:512:ARG:HD3	10	0.73
(1,1432)	1:A:462:CYS:HB3	1:A:506:LEU:HD21	6	0.73
(1,1432)	1:A:462:CYS:HB3	1:A:506:LEU:HD22	6	0.73

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1432)	1:A:462:CYS:HB3	1:A:506:LEU:HD23	6	0.73
(1,1010)	1:A:454:LEU:HB3	1:A:489:PHE:H	18	0.73
(1,945)	1:A:462:CYS:H	1:A:463:ARG:HB3	2	0.72
(1,945)	1:A:462:CYS:H	1:A:463:ARG:HB3	7	0.72
(1,806)	1:A:434:HIS:H	1:A:438:GLU:HG3	16	0.72
(1,710)	1:A:466:LEU:HB3	1:A:469:VAL:H	18	0.72
(1,449)	1:A:543:GLU:HB3	1:A:544:GLN:H	11	0.72
(1,39)	1:A:435:GLY:H	1:A:438:GLU:HG3	9	0.72
(1,2842)	1:A:544:GLN:H	1:A:544:GLN:HG3	6	0.72
(1,2842)	1:A:544:GLN:H	1:A:544:GLN:HG3	19	0.72
(1,2784)	1:A:523:LYS:HG3	1:A:524:VAL:H	1	0.72
(1,2784)	1:A:523:LYS:HG3	1:A:524:VAL:H	19	0.72
(1,2710)	1:A:511:VAL:HA	1:A:512:ARG:HB3	7	0.72
(1,2710)	1:A:511:VAL:HA	1:A:512:ARG:HB3	11	0.72
(1,2661)	1:A:495:SER:H	1:A:495:SER:HB3	4	0.72
(1,2661)	1:A:495:SER:H	1:A:495:SER:HB3	16	0.72
(1,2661)	1:A:495:SER:H	1:A:495:SER:HB3	18	0.72
(1,265)	1:A:482:SER:H	1:A:482:SER:HB3	17	0.72
(1,2633)	1:A:491:PRO:HG3	1:A:493:GLU:H	5	0.72
(1,2632)	1:A:491:PRO:HB3	1:A:494:SER:H	11	0.72
(1,2562)	1:A:480:GLN:HB3	1:A:482:SER:HB3	1	0.72
(1,247)	1:A:410:LEU:H	1:A:410:LEU:HB3	19	0.72
(1,2432)	1:A:453:ILE:HG13	1:A:454:LEU:H	15	0.72
(1,2389)	1:A:442:LEU:HD11	1:A:443:GLN:HG3	6	0.72
(1,2389)	1:A:442:LEU:HD12	1:A:443:GLN:HG3	6	0.72
(1,2389)	1:A:442:LEU:HD13	1:A:443:GLN:HG3	6	0.72
(1,2389)	1:A:442:LEU:HD21	1:A:443:GLN:HG3	6	0.72
(1,2389)	1:A:442:LEU:HD22	1:A:443:GLN:HG3	6	0.72
(1,2389)	1:A:442:LEU:HD23	1:A:443:GLN:HG3	6	0.72
(1,2334)	1:A:422:PRO:HD3	1:A:423:ASP:H	11	0.72
(1,2334)	1:A:422:PRO:HD3	1:A:423:ASP:H	14	0.72
(1,2334)	1:A:422:PRO:HD3	1:A:423:ASP:H	18	0.72
(1,2334)	1:A:422:PRO:HD3	1:A:423:ASP:H	19	0.72
(1,2332)	1:A:422:PRO:HG3	1:A:423:ASP:H	9	0.72
(1,2196)	1:A:401:HIS:HE1	1:A:406:GLU:HB3	13	0.72
(1,1964)	1:A:540:TRP:HA	1:A:541:ARG:HB3	16	0.72
(1,1745)	1:A:479:ARG:HD3	1:A:479:ARG:HH22	11	0.72
(1,1638)	1:A:539:MET:HA	1:A:542:LYS:HB3	13	0.72
(1,1617)	1:A:415:LYS:H	1:A:415:LYS:HD3	10	0.72
(1,1549)	1:A:522:ARG:HG3	1:A:526:ASN:HD21	14	0.72
(1,1332)	1:A:398:VAL:HG11	1:A:449:SER:HB3	15	0.72
(1,1332)	1:A:398:VAL:HG12	1:A:449:SER:HB3	15	0.72

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1332)	1:A:398:VAL:HG13	1:A:449:SER:HB3	15	0.72
(1,1203)	1:A:471:GLN:HB3	1:A:472:ALA:HB1	14	0.72
(1,1203)	1:A:471:GLN:HB3	1:A:472:ALA:HB2	14	0.72
(1,1203)	1:A:471:GLN:HB3	1:A:472:ALA:HB3	14	0.72
(1,105)	1:A:522:ARG:HG3	1:A:526:ASN:HD22	9	0.72
(1,105)	1:A:522:ARG:HG3	1:A:526:ASN:HD22	20	0.72
(1,945)	1:A:462:CYS:H	1:A:463:ARG:HB3	5	0.71
(1,368)	1:A:389:SER:H	1:A:389:SER:HB3	2	0.71
(1,2848)	1:A:544:GLN:HG3	1:A:545:ASP:H	1	0.71
(1,280)	1:A:527:THR:H	1:A:529:LYS:HG3	19	0.71
(1,2710)	1:A:511:VAL:HA	1:A:512:ARG:HB3	1	0.71
(1,2658)	1:A:493:GLU:HG3	1:A:494:SER:H	7	0.71
(1,2633)	1:A:491:PRO:HG3	1:A:493:GLU:H	2	0.71
(1,2502)	1:A:467:HIS:HA	1:A:470:ASN:HB3	5	0.71
(1,2480)	1:A:463:ARG:HD3	1:A:506:LEU:HD21	3	0.71
(1,2480)	1:A:463:ARG:HD3	1:A:506:LEU:HD22	3	0.71
(1,2480)	1:A:463:ARG:HD3	1:A:506:LEU:HD23	3	0.71
(1,247)	1:A:410:LEU:H	1:A:410:LEU:HB3	15	0.71
(1,247)	1:A:410:LEU:H	1:A:410:LEU:HB3	17	0.71
(1,2367)	1:A:434:HIS:HB3	1:A:435:GLY:H	20	0.71
(1,2332)	1:A:422:PRO:HG3	1:A:423:ASP:H	7	0.71
(1,2332)	1:A:422:PRO:HG3	1:A:423:ASP:H	11	0.71
(1,2332)	1:A:422:PRO:HG3	1:A:423:ASP:H	14	0.71
(1,2332)	1:A:422:PRO:HG3	1:A:423:ASP:H	18	0.71
(1,2255)	1:A:414:GLU:HB3	1:A:415:LYS:H	17	0.71
(1,2226)	1:A:408:ILE:HG21	1:A:494:SER:HB3	17	0.71
(1,2226)	1:A:408:ILE:HG22	1:A:494:SER:HB3	17	0.71
(1,2226)	1:A:408:ILE:HG23	1:A:494:SER:HB3	17	0.71
(1,2145)	1:A:393:LYS:HG3	1:A:393:LYS:HE3	2	0.71
(1,2020)	1:A:504:ALA:HB1	1:A:505:SER:HB3	13	0.71
(1,2020)	1:A:504:ALA:HB2	1:A:505:SER:HB3	13	0.71
(1,2020)	1:A:504:ALA:HB3	1:A:505:SER:HB3	13	0.71
(1,2020)	1:A:504:ALA:HB1	1:A:505:SER:HB3	18	0.71
(1,2020)	1:A:504:ALA:HB2	1:A:505:SER:HB3	18	0.71
(1,2020)	1:A:504:ALA:HB3	1:A:505:SER:HB3	18	0.71
(1,1962)	1:A:462:CYS:HB3	1:A:463:ARG:HA	15	0.71
(1,1745)	1:A:479:ARG:HD3	1:A:479:ARG:HH22	2	0.71
(1,1745)	1:A:479:ARG:HD3	1:A:479:ARG:HH22	19	0.71
(1,1710)	1:A:542:LYS:HA	1:A:542:LYS:HE3	9	0.71
(1,165)	1:A:463:ARG:HB3	1:A:465:SER:H	3	0.71
(1,165)	1:A:463:ARG:HB3	1:A:465:SER:H	13	0.71
(1,1598)	1:A:393:LYS:HA	1:A:393:LYS:HD3	17	0.71

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1549)	1:A:522:ARG:HG3	1:A:526:ASN:HD21	2	0.71
(1,1549)	1:A:522:ARG:HG3	1:A:526:ASN:HD21	5	0.71
(1,1203)	1:A:471:GLN:HB3	1:A:472:ALA:HB1	11	0.71
(1,1203)	1:A:471:GLN:HB3	1:A:472:ALA:HB2	11	0.71
(1,1203)	1:A:471:GLN:HB3	1:A:472:ALA:HB3	11	0.71
(1,1188)	1:A:538:ALA:HB1	1:A:539:MET:HB3	17	0.71
(1,1188)	1:A:538:ALA:HB2	1:A:539:MET:HB3	17	0.71
(1,1188)	1:A:538:ALA:HB3	1:A:539:MET:HB3	17	0.71
(1,1136)	1:A:473:MET:HE1	1:A:482:SER:HB3	7	0.71
(1,1136)	1:A:473:MET:HE2	1:A:482:SER:HB3	7	0.71
(1,1136)	1:A:473:MET:HE3	1:A:482:SER:HB3	7	0.71
(1,812)	1:A:390:SER:HB3	1:A:391:GLU:H	17	0.7
(1,789)	1:A:539:MET:HB3	1:A:540:TRP:H	18	0.7
(1,710)	1:A:466:LEU:HB3	1:A:469:VAL:H	15	0.7
(1,579)	1:A:532:ARG:HB3	1:A:533:LEU:H	11	0.7
(1,53)	1:A:437:GLY:H	1:A:438:GLU:HG3	9	0.7
(1,464)	1:A:492:LEU:H	1:A:515:GLU:HB3	14	0.7
(1,2842)	1:A:544:GLN:H	1:A:544:GLN:HG3	1	0.7
(1,2842)	1:A:544:GLN:H	1:A:544:GLN:HG3	11	0.7
(1,2837)	1:A:542:LYS:HA	1:A:542:LYS:HG3	2	0.7
(1,2758)	1:A:515:GLU:HG3	1:A:520:PHE:HE1	6	0.7
(1,2758)	1:A:515:GLU:HG3	1:A:520:PHE:HE2	6	0.7
(1,2758)	1:A:515:GLU:HG3	1:A:520:PHE:HE1	14	0.7
(1,2758)	1:A:515:GLU:HG3	1:A:520:PHE:HE2	14	0.7
(1,2758)	1:A:515:GLU:HG3	1:A:520:PHE:HE1	15	0.7
(1,2758)	1:A:515:GLU:HG3	1:A:520:PHE:HE2	15	0.7
(1,2661)	1:A:495:SER:H	1:A:495:SER:HB3	20	0.7
(1,2504)	1:A:467:HIS:HB3	1:A:468:GLN:H	18	0.7
(1,25)	1:A:479:ARG:HG3	1:A:481:GLY:H	3	0.7
(1,247)	1:A:410:LEU:H	1:A:410:LEU:HB3	7	0.7
(1,247)	1:A:410:LEU:H	1:A:410:LEU:HB3	11	0.7
(1,247)	1:A:410:LEU:H	1:A:410:LEU:HB3	13	0.7
(1,247)	1:A:410:LEU:H	1:A:410:LEU:HB3	14	0.7
(1,247)	1:A:410:LEU:H	1:A:410:LEU:HB3	20	0.7
(1,2389)	1:A:442:LEU:HD11	1:A:443:GLN:HG3	3	0.7
(1,2389)	1:A:442:LEU:HD12	1:A:443:GLN:HG3	3	0.7
(1,2389)	1:A:442:LEU:HD13	1:A:443:GLN:HG3	3	0.7
(1,2389)	1:A:442:LEU:HD21	1:A:443:GLN:HG3	3	0.7
(1,2389)	1:A:442:LEU:HD22	1:A:443:GLN:HG3	3	0.7
(1,2389)	1:A:442:LEU:HD23	1:A:443:GLN:HG3	3	0.7
(1,2385)	1:A:439:LEU:HD11	1:A:444:ASP:HB3	19	0.7
(1,2385)	1:A:439:LEU:HD12	1:A:444:ASP:HB3	19	0.7

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2385)	1:A:439:LEU:HD13	1:A:444:ASP:HB3	19	0.7
(1,2385)	1:A:439:LEU:HD21	1:A:444:ASP:HB3	19	0.7
(1,2385)	1:A:439:LEU:HD22	1:A:444:ASP:HB3	19	0.7
(1,2385)	1:A:439:LEU:HD23	1:A:444:ASP:HB3	19	0.7
(1,2377)	1:A:438:GLU:HB3	1:A:439:LEU:H	13	0.7
(1,2377)	1:A:438:GLU:HB3	1:A:439:LEU:H	19	0.7
(1,2367)	1:A:434:HIS:HB3	1:A:435:GLY:H	1	0.7
(1,2367)	1:A:434:HIS:HB3	1:A:435:GLY:H	10	0.7
(1,2332)	1:A:422:PRO:HG3	1:A:423:ASP:H	19	0.7
(1,2196)	1:A:401:HIS:HE1	1:A:406:GLU:HB3	15	0.7
(1,2188)	1:A:400:LEU:HB3	1:A:401:HIS:H	11	0.7
(1,2179)	1:A:398:VAL:HG11	1:A:449:SER:HB3	6	0.7
(1,2179)	1:A:398:VAL:HG12	1:A:449:SER:HB3	6	0.7
(1,2179)	1:A:398:VAL:HG13	1:A:449:SER:HB3	6	0.7
(1,2179)	1:A:398:VAL:HG21	1:A:449:SER:HB3	6	0.7
(1,2179)	1:A:398:VAL:HG22	1:A:449:SER:HB3	6	0.7
(1,2179)	1:A:398:VAL:HG23	1:A:449:SER:HB3	6	0.7
(1,2145)	1:A:393:LYS:HG3	1:A:393:LYS:HE3	8	0.7
(1,2122)	1:A:529:LYS:HG3	1:A:531:HIS:HE1	4	0.7
(1,2074)	1:A:393:LYS:HD3	1:A:395:TYR:HE1	3	0.7
(1,2074)	1:A:393:LYS:HD3	1:A:395:TYR:HE2	3	0.7
(1,2029)	1:A:389:SER:H	1:A:390:SER:HB3	3	0.7
(1,1990)	1:A:505:SER:HA	1:A:508:SER:HB3	17	0.7
(1,1982)	1:A:413:ARG:HA	1:A:413:ARG:HD3	19	0.7
(1,1745)	1:A:479:ARG:HD3	1:A:479:ARG:HH22	13	0.7
(1,1670)	1:A:438:GLU:HA	1:A:438:GLU:HG3	2	0.7
(1,146)	1:A:508:SER:HB3	1:A:509:GLY:H	5	0.7
(1,146)	1:A:508:SER:HB3	1:A:509:GLY:H	15	0.7
(1,1188)	1:A:538:ALA:HB1	1:A:539:MET:HB3	1	0.7
(1,1188)	1:A:538:ALA:HB2	1:A:539:MET:HB3	1	0.7
(1,1188)	1:A:538:ALA:HB3	1:A:539:MET:HB3	1	0.7
(1,105)	1:A:522:ARG:HG3	1:A:526:ASN:HD22	15	0.7
(1,945)	1:A:462:CYS:H	1:A:463:ARG:HB3	10	0.69
(1,891)	1:A:393:LYS:H	1:A:393:LYS:HE3	4	0.69
(1,835)	1:A:415:LYS:H	1:A:415:LYS:HG3	13	0.69
(1,835)	1:A:415:LYS:H	1:A:415:LYS:HG3	18	0.69
(1,710)	1:A:466:LEU:HB3	1:A:469:VAL:H	16	0.69
(1,2841)	1:A:543:GLU:HB3	1:A:544:GLN:HE21	8	0.69
(1,2841)	1:A:543:GLU:HB3	1:A:544:GLN:HE22	8	0.69
(1,2837)	1:A:542:LYS:HA	1:A:542:LYS:HG3	10	0.69
(1,2741)	1:A:513:LEU:HD11	1:A:523:LYS:HE3	20	0.69
(1,2741)	1:A:513:LEU:HD12	1:A:523:LYS:HE3	20	0.69

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2741)	1:A:513:LEU:HD13	1:A:523:LYS:HE3	20	0.69
(1,2741)	1:A:513:LEU:HD21	1:A:523:LYS:HE3	20	0.69
(1,2741)	1:A:513:LEU:HD22	1:A:523:LYS:HE3	20	0.69
(1,2741)	1:A:513:LEU:HD23	1:A:523:LYS:HE3	20	0.69
(1,2710)	1:A:511:VAL:HA	1:A:512:ARG:HB3	2	0.69
(1,2685)	1:A:502:ASP:HB3	1:A:503:THR:H	8	0.69
(1,2658)	1:A:493:GLU:HG3	1:A:494:SER:H	2	0.69
(1,2633)	1:A:491:PRO:HG3	1:A:493:GLU:H	13	0.69
(1,2575)	1:A:484:ASP:HB3	1:A:485:CYS:H	14	0.69
(1,25)	1:A:479:ARG:HG3	1:A:481:GLY:H	15	0.69
(1,25)	1:A:479:ARG:HG3	1:A:481:GLY:H	18	0.69
(1,2499)	1:A:466:LEU:HD11	1:A:467:HIS:HB3	19	0.69
(1,2499)	1:A:466:LEU:HD12	1:A:467:HIS:HB3	19	0.69
(1,2499)	1:A:466:LEU:HD13	1:A:467:HIS:HB3	19	0.69
(1,2499)	1:A:466:LEU:HD21	1:A:467:HIS:HB3	19	0.69
(1,2499)	1:A:466:LEU:HD22	1:A:467:HIS:HB3	19	0.69
(1,2499)	1:A:466:LEU:HD23	1:A:467:HIS:HB3	19	0.69
(1,2412)	1:A:446:ILE:HG13	1:A:473:MET:HE1	2	0.69
(1,2412)	1:A:446:ILE:HG13	1:A:473:MET:HE2	2	0.69
(1,2412)	1:A:446:ILE:HG13	1:A:473:MET:HE3	2	0.69
(1,2357)	1:A:432:GLN:HB3	1:A:433:VAL:H	4	0.69
(1,2357)	1:A:432:GLN:HB3	1:A:433:VAL:H	15	0.69
(1,2357)	1:A:432:GLN:HB3	1:A:433:VAL:H	18	0.69
(1,2254)	1:A:414:GLU:HB3	1:A:414:GLU:HG3	2	0.69
(1,2254)	1:A:414:GLU:HB3	1:A:414:GLU:HG3	7	0.69
(1,2254)	1:A:414:GLU:HB3	1:A:414:GLU:HG3	8	0.69
(1,2161)	1:A:397:PHE:HB3	1:A:398:VAL:H	18	0.69
(1,2161)	1:A:397:PHE:HB3	1:A:398:VAL:H	19	0.69
(1,2133)	1:A:392:GLN:H	1:A:392:GLN:HB3	8	0.69
(1,2007)	1:A:462:CYS:HA	1:A:466:LEU:HB3	6	0.69
(1,1732)	1:A:541:ARG:HB3	1:A:541:ARG:HD3	4	0.69
(1,1617)	1:A:415:LYS:H	1:A:415:LYS:HD3	12	0.69
(1,1599)	1:A:393:LYS:HD3	1:A:395:TYR:HD1	11	0.69
(1,1599)	1:A:393:LYS:HD3	1:A:395:TYR:HD2	11	0.69
(1,1549)	1:A:522:ARG:HG3	1:A:526:ASN:HD21	20	0.69
(1,1332)	1:A:398:VAL:HG11	1:A:449:SER:HB3	18	0.69
(1,1332)	1:A:398:VAL:HG12	1:A:449:SER:HB3	18	0.69
(1,1332)	1:A:398:VAL:HG13	1:A:449:SER:HB3	18	0.69
(1,105)	1:A:522:ARG:HG3	1:A:526:ASN:HD22	19	0.69
(1,789)	1:A:539:MET:HB3	1:A:540:TRP:H	19	0.68
(1,710)	1:A:466:LEU:HB3	1:A:469:VAL:H	7	0.68
(1,710)	1:A:466:LEU:HB3	1:A:469:VAL:H	8	0.68

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,710)	1:A:466:LEU:HB3	1:A:469:VAL:H	19	0.68
(1,579)	1:A:532:ARG:HB3	1:A:533:LEU:H	19	0.68
(1,554)	1:A:542:LYS:H	1:A:542:LYS:HB3	6	0.68
(1,524)	1:A:529:LYS:H	1:A:532:ARG:HD3	11	0.68
(1,368)	1:A:389:SER:H	1:A:389:SER:HB3	3	0.68
(1,2839)	1:A:542:LYS:HG3	1:A:543:GLU:H	5	0.68
(1,2839)	1:A:542:LYS:HG3	1:A:543:GLU:H	8	0.68
(1,2830)	1:A:538:ALA:HB1	1:A:541:ARG:HD3	4	0.68
(1,2830)	1:A:538:ALA:HB2	1:A:541:ARG:HD3	4	0.68
(1,2830)	1:A:538:ALA:HB3	1:A:541:ARG:HD3	4	0.68
(1,2710)	1:A:511:VAL:HA	1:A:512:ARG:HB3	15	0.68
(1,2686)	1:A:502:ASP:HB3	1:A:505:SER:H	2	0.68
(1,2643)	1:A:492:LEU:HG	1:A:515:GLU:HG3	16	0.68
(1,2633)	1:A:491:PRO:HG3	1:A:493:GLU:H	6	0.68
(1,2633)	1:A:491:PRO:HG3	1:A:493:GLU:H	8	0.68
(1,2633)	1:A:491:PRO:HG3	1:A:493:GLU:H	14	0.68
(1,2632)	1:A:491:PRO:HB3	1:A:494:SER:H	3	0.68
(1,2632)	1:A:491:PRO:HB3	1:A:494:SER:H	13	0.68
(1,2611)	1:A:490:LEU:HG	1:A:494:SER:HB3	6	0.68
(1,2575)	1:A:484:ASP:HB3	1:A:485:CYS:H	13	0.68
(1,2568)	1:A:483:PRO:HB3	1:A:484:ASP:H	2	0.68
(1,2568)	1:A:483:PRO:HB3	1:A:484:ASP:H	3	0.68
(1,2568)	1:A:483:PRO:HB3	1:A:484:ASP:H	4	0.68
(1,2568)	1:A:483:PRO:HB3	1:A:484:ASP:H	5	0.68
(1,2568)	1:A:483:PRO:HB3	1:A:484:ASP:H	9	0.68
(1,2546)	1:A:476:ASN:HB3	1:A:479:ARG:HG3	1	0.68
(1,2432)	1:A:453:ILE:HG13	1:A:454:LEU:H	19	0.68
(1,2367)	1:A:434:HIS:HB3	1:A:435:GLY:H	8	0.68
(1,2255)	1:A:414:GLU:HB3	1:A:415:LYS:H	8	0.68
(1,2254)	1:A:414:GLU:HB3	1:A:414:GLU:HG3	1	0.68
(1,2254)	1:A:414:GLU:HB3	1:A:414:GLU:HG3	4	0.68
(1,2254)	1:A:414:GLU:HB3	1:A:414:GLU:HG3	6	0.68
(1,2254)	1:A:414:GLU:HB3	1:A:414:GLU:HG3	12	0.68
(1,2254)	1:A:414:GLU:HB3	1:A:414:GLU:HG3	20	0.68
(1,2202)	1:A:405:ASP:HB3	1:A:406:GLU:H	1	0.68
(1,2202)	1:A:405:ASP:HB3	1:A:406:GLU:H	8	0.68
(1,2202)	1:A:405:ASP:HB3	1:A:406:GLU:H	15	0.68
(1,2196)	1:A:401:HIS:HE1	1:A:406:GLU:HB3	6	0.68
(1,2145)	1:A:393:LYS:HG3	1:A:393:LYS:HE3	9	0.68
(1,2133)	1:A:392:GLN:H	1:A:392:GLN:HB3	15	0.68
(1,1996)	1:A:491:PRO:HA	1:A:515:GLU:HB3	10	0.68
(1,1962)	1:A:462:CYS:HB3	1:A:463:ARG:HA	11	0.68

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,165)	1:A:463:ARG:HB3	1:A:465:SER:H	9	0.68
(1,1618)	1:A:463:ARG:HB3	1:A:506:LEU:HD11	19	0.68
(1,1618)	1:A:463:ARG:HB3	1:A:506:LEU:HD12	19	0.68
(1,1618)	1:A:463:ARG:HB3	1:A:506:LEU:HD13	19	0.68
(1,1549)	1:A:522:ARG:HG3	1:A:526:ASN:HD21	7	0.68
(1,1549)	1:A:522:ARG:HG3	1:A:526:ASN:HD21	11	0.68
(1,146)	1:A:508:SER:HB3	1:A:509:GLY:H	10	0.68
(1,146)	1:A:508:SER:HB3	1:A:509:GLY:H	18	0.68
(1,945)	1:A:462:CYS:H	1:A:463:ARG:HB3	8	0.67
(1,835)	1:A:415:LYS:H	1:A:415:LYS:HG3	2	0.67
(1,835)	1:A:415:LYS:H	1:A:415:LYS:HG3	4	0.67
(1,835)	1:A:415:LYS:H	1:A:415:LYS:HG3	11	0.67
(1,812)	1:A:390:SER:HB3	1:A:391:GLU:H	4	0.67
(1,812)	1:A:390:SER:HB3	1:A:391:GLU:H	11	0.67
(1,812)	1:A:390:SER:HB3	1:A:391:GLU:H	15	0.67
(1,789)	1:A:539:MET:HB3	1:A:540:TRP:H	12	0.67
(1,735)	1:A:410:LEU:HB3	1:A:411:ARG:H	8	0.67
(1,691)	1:A:432:GLN:H	1:A:432:GLN:HG3	18	0.67
(1,676)	1:A:436:ARG:H	1:A:436:ARG:HG3	5	0.67
(1,552)	1:A:542:LYS:H	1:A:542:LYS:HD3	9	0.67
(1,2848)	1:A:544:GLN:HG3	1:A:545:ASP:H	7	0.67
(1,2729)	1:A:513:LEU:HA	1:A:523:LYS:HE3	5	0.67
(1,2687)	1:A:502:ASP:HB3	1:A:505:SER:HB3	16	0.67
(1,2684)	1:A:502:ASP:H	1:A:502:ASP:HB3	20	0.67
(1,2658)	1:A:493:GLU:HG3	1:A:494:SER:H	11	0.67
(1,265)	1:A:482:SER:H	1:A:482:SER:HB3	8	0.67
(1,2633)	1:A:491:PRO:HG3	1:A:493:GLU:H	15	0.67
(1,2611)	1:A:490:LEU:HG	1:A:494:SER:HB3	14	0.67
(1,2591)	1:A:487:ILE:HG21	1:A:513:LEU:HB3	13	0.67
(1,2591)	1:A:487:ILE:HG22	1:A:513:LEU:HB3	13	0.67
(1,2591)	1:A:487:ILE:HG23	1:A:513:LEU:HB3	13	0.67
(1,2575)	1:A:484:ASP:HB3	1:A:485:CYS:H	4	0.67
(1,2568)	1:A:483:PRO:HB3	1:A:484:ASP:H	1	0.67
(1,2568)	1:A:483:PRO:HB3	1:A:484:ASP:H	6	0.67
(1,2568)	1:A:483:PRO:HB3	1:A:484:ASP:H	7	0.67
(1,2568)	1:A:483:PRO:HB3	1:A:484:ASP:H	8	0.67
(1,2568)	1:A:483:PRO:HB3	1:A:484:ASP:H	10	0.67
(1,2568)	1:A:483:PRO:HB3	1:A:484:ASP:H	11	0.67
(1,2568)	1:A:483:PRO:HB3	1:A:484:ASP:H	12	0.67
(1,2568)	1:A:483:PRO:HB3	1:A:484:ASP:H	13	0.67
(1,2568)	1:A:483:PRO:HB3	1:A:484:ASP:H	14	0.67
(1,2568)	1:A:483:PRO:HB3	1:A:484:ASP:H	15	0.67

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2568)	1:A:483:PRO:HB3	1:A:484:ASP:H	16	0.67
(1,2568)	1:A:483:PRO:HB3	1:A:484:ASP:H	17	0.67
(1,2568)	1:A:483:PRO:HB3	1:A:484:ASP:H	18	0.67
(1,2568)	1:A:483:PRO:HB3	1:A:484:ASP:H	19	0.67
(1,2568)	1:A:483:PRO:HB3	1:A:484:ASP:H	20	0.67
(1,2264)	1:A:415:LYS:HE3	1:A:521:ALA:HB1	14	0.67
(1,2264)	1:A:415:LYS:HE3	1:A:521:ALA:HB2	14	0.67
(1,2264)	1:A:415:LYS:HE3	1:A:521:ALA:HB3	14	0.67
(1,2257)	1:A:415:LYS:H	1:A:415:LYS:HE3	3	0.67
(1,2254)	1:A:414:GLU:HB3	1:A:414:GLU:HG3	11	0.67
(1,2225)	1:A:408:ILE:HG21	1:A:493:GLU:HB3	16	0.67
(1,2225)	1:A:408:ILE:HG22	1:A:493:GLU:HB3	16	0.67
(1,2225)	1:A:408:ILE:HG23	1:A:493:GLU:HB3	16	0.67
(1,2143)	1:A:393:LYS:HB3	1:A:393:LYS:HD3	6	0.67
(1,2137)	1:A:392:GLN:HA	1:A:393:LYS:HB3	20	0.67
(1,1982)	1:A:413:ARG:HA	1:A:413:ARG:HD3	7	0.67
(1,1982)	1:A:413:ARG:HA	1:A:413:ARG:HD3	20	0.67
(1,1962)	1:A:462:CYS:HB3	1:A:463:ARG:HA	2	0.67
(1,1706)	1:A:393:LYS:HE3	1:A:394:PHE:H	15	0.67
(1,1701)	1:A:393:LYS:HG3	1:A:393:LYS:HE3	5	0.67
(1,1684)	1:A:523:LYS:HB3	1:A:526:ASN:HB3	14	0.67
(1,1684)	1:A:523:LYS:HB3	1:A:526:ASN:HB3	15	0.67
(1,1676)	1:A:416:LEU:HG	1:A:417:GLU:HG3	17	0.67
(1,165)	1:A:463:ARG:HB3	1:A:465:SER:H	6	0.67
(1,1598)	1:A:393:LYS:HA	1:A:393:LYS:HD3	10	0.67
(1,1592)	1:A:466:LEU:HB3	1:A:467:HIS:HB3	10	0.67
(1,1549)	1:A:522:ARG:HG3	1:A:526:ASN:HD21	6	0.67
(1,1549)	1:A:522:ARG:HG3	1:A:526:ASN:HD21	8	0.67
(1,138)	1:A:526:ASN:H	1:A:526:ASN:HB3	5	0.67
(1,1203)	1:A:471:GLN:HB3	1:A:472:ALA:HB1	9	0.67
(1,1203)	1:A:471:GLN:HB3	1:A:472:ALA:HB2	9	0.67
(1,1203)	1:A:471:GLN:HB3	1:A:472:ALA:HB3	9	0.67
(1,1010)	1:A:454:LEU:HB3	1:A:489:PHE:H	1	0.67
(1,835)	1:A:415:LYS:H	1:A:415:LYS:HG3	6	0.66
(1,710)	1:A:466:LEU:HB3	1:A:469:VAL:H	1	0.66
(1,561)	1:A:543:GLU:HB3	1:A:545:ASP:H	20	0.66
(1,2848)	1:A:544:GLN:HG3	1:A:545:ASP:H	9	0.66
(1,2838)	1:A:542:LYS:HG3	1:A:542:LYS:HE3	2	0.66
(1,2835)	1:A:541:ARG:HB3	1:A:541:ARG:HD3	20	0.66
(1,2809)	1:A:529:LYS:HG3	1:A:530:PRO:HD3	14	0.66
(1,2809)	1:A:529:LYS:HG3	1:A:530:PRO:HD3	19	0.66
(1,2796)	1:A:527:THR:HA	1:A:529:LYS:HD3	4	0.66

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2796)	1:A:527:THR:HA	1:A:529:LYS:HD3	8	0.66
(1,2796)	1:A:527:THR:HA	1:A:529:LYS:HD3	12	0.66
(1,2796)	1:A:527:THR:HA	1:A:529:LYS:HD3	17	0.66
(1,2687)	1:A:502:ASP:HB3	1:A:505:SER:HB3	4	0.66
(1,2687)	1:A:502:ASP:HB3	1:A:505:SER:HB3	20	0.66
(1,2633)	1:A:491:PRO:HG3	1:A:493:GLU:H	20	0.66
(1,2611)	1:A:490:LEU:HG	1:A:494:SER:HB3	16	0.66
(1,2502)	1:A:467:HIS:HA	1:A:470:ASN:HB3	2	0.66
(1,2464)	1:A:456:LEU:HB3	1:A:490:LEU:HD11	14	0.66
(1,2464)	1:A:456:LEU:HB3	1:A:490:LEU:HD12	14	0.66
(1,2464)	1:A:456:LEU:HB3	1:A:490:LEU:HD13	14	0.66
(1,2464)	1:A:456:LEU:HB3	1:A:490:LEU:HD21	14	0.66
(1,2464)	1:A:456:LEU:HB3	1:A:490:LEU:HD22	14	0.66
(1,2464)	1:A:456:LEU:HB3	1:A:490:LEU:HD23	14	0.66
(1,2416)	1:A:447:ASP:HB3	1:A:448:HIS:H	8	0.66
(1,2367)	1:A:434:HIS:HB3	1:A:435:GLY:H	12	0.66
(1,2353)	1:A:431:PHE:HB3	1:A:433:VAL:H	1	0.66
(1,2255)	1:A:414:GLU:HB3	1:A:415:LYS:H	9	0.66
(1,2241)	1:A:411:ARG:HA	1:A:411:ARG:HD3	4	0.66
(1,2241)	1:A:411:ARG:HA	1:A:411:ARG:HD3	5	0.66
(1,2241)	1:A:411:ARG:HA	1:A:411:ARG:HD3	16	0.66
(1,2215)	1:A:406:GLU:HG3	1:A:409:ALA:H	11	0.66
(1,2202)	1:A:405:ASP:HB3	1:A:406:GLU:H	13	0.66
(1,2196)	1:A:401:HIS:HE1	1:A:406:GLU:HB3	2	0.66
(1,2196)	1:A:401:HIS:HE1	1:A:406:GLU:HB3	11	0.66
(1,2196)	1:A:401:HIS:HE1	1:A:406:GLU:HB3	20	0.66
(1,1982)	1:A:413:ARG:HA	1:A:413:ARG:HD3	11	0.66
(1,1982)	1:A:413:ARG:HA	1:A:413:ARG:HD3	14	0.66
(1,1933)	1:A:523:LYS:HA	1:A:526:ASN:HB3	14	0.66
(1,1784)	1:A:403:ARG:HD3	1:A:404:ALA:HA	14	0.66
(1,1751)	1:A:488:PRO:HB3	1:A:512:ARG:HD3	17	0.66
(1,1655)	1:A:432:GLN:HA	1:A:432:GLN:HG3	5	0.66
(1,1655)	1:A:432:GLN:HA	1:A:432:GLN:HG3	13	0.66
(1,1549)	1:A:522:ARG:HG3	1:A:526:ASN:HD21	18	0.66
(1,1532)	1:A:490:LEU:HD21	1:A:512:ARG:HD3	6	0.66
(1,1532)	1:A:490:LEU:HD22	1:A:512:ARG:HD3	6	0.66
(1,1532)	1:A:490:LEU:HD23	1:A:512:ARG:HD3	6	0.66
(1,146)	1:A:508:SER:HB3	1:A:509:GLY:H	6	0.66
(1,138)	1:A:526:ASN:H	1:A:526:ASN:HB3	13	0.66
(1,1121)	1:A:536:ARG:HD3	1:A:539:MET:HE1	3	0.66
(1,1121)	1:A:536:ARG:HD3	1:A:539:MET:HE2	3	0.66
(1,1121)	1:A:536:ARG:HD3	1:A:539:MET:HE3	3	0.66

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1010)	1:A:454:LEU:HB3	1:A:489:PHE:H	13	0.66
(1,891)	1:A:393:LYS:H	1:A:393:LYS:HE3	1	0.65
(1,818)	1:A:505:SER:HB3	1:A:506:LEU:H	20	0.65
(1,812)	1:A:390:SER:HB3	1:A:391:GLU:H	13	0.65
(1,691)	1:A:432:GLN:H	1:A:432:GLN:HG3	8	0.65
(1,676)	1:A:436:ARG:H	1:A:436:ARG:HG3	10	0.65
(1,554)	1:A:542:LYS:H	1:A:542:LYS:HB3	3	0.65
(1,554)	1:A:542:LYS:H	1:A:542:LYS:HB3	12	0.65
(1,54)	1:A:436:ARG:HD3	1:A:437:GLY:H	20	0.65
(1,535)	1:A:542:LYS:HB3	1:A:543:GLU:H	16	0.65
(1,2842)	1:A:544:GLN:H	1:A:544:GLN:HG3	12	0.65
(1,2796)	1:A:527:THR:HA	1:A:529:LYS:HD3	11	0.65
(1,2710)	1:A:511:VAL:HA	1:A:512:ARG:HB3	9	0.65
(1,2685)	1:A:502:ASP:HB3	1:A:503:THR:H	5	0.65
(1,2611)	1:A:490:LEU:HG	1:A:494:SER:HB3	13	0.65
(1,2377)	1:A:438:GLU:HB3	1:A:439:LEU:H	3	0.65
(1,2374)	1:A:438:GLU:H	1:A:438:GLU:HB3	12	0.65
(1,2357)	1:A:432:GLN:HB3	1:A:433:VAL:H	3	0.65
(1,2357)	1:A:432:GLN:HB3	1:A:433:VAL:H	6	0.65
(1,2357)	1:A:432:GLN:HB3	1:A:433:VAL:H	7	0.65
(1,2264)	1:A:415:LYS:HE3	1:A:521:ALA:HB1	2	0.65
(1,2264)	1:A:415:LYS:HE3	1:A:521:ALA:HB2	2	0.65
(1,2264)	1:A:415:LYS:HE3	1:A:521:ALA:HB3	2	0.65
(1,2254)	1:A:414:GLU:HB3	1:A:414:GLU:HG3	10	0.65
(1,2254)	1:A:414:GLU:HB3	1:A:414:GLU:HG3	13	0.65
(1,2254)	1:A:414:GLU:HB3	1:A:414:GLU:HG3	14	0.65
(1,2241)	1:A:411:ARG:HA	1:A:411:ARG:HD3	10	0.65
(1,2214)	1:A:406:GLU:HG3	1:A:407:HIS:HA	19	0.65
(1,2179)	1:A:398:VAL:HG11	1:A:449:SER:HB3	14	0.65
(1,2179)	1:A:398:VAL:HG12	1:A:449:SER:HB3	14	0.65
(1,2179)	1:A:398:VAL:HG13	1:A:449:SER:HB3	14	0.65
(1,2179)	1:A:398:VAL:HG21	1:A:449:SER:HB3	14	0.65
(1,2179)	1:A:398:VAL:HG22	1:A:449:SER:HB3	14	0.65
(1,2179)	1:A:398:VAL:HG23	1:A:449:SER:HB3	14	0.65
(1,2074)	1:A:393:LYS:HD3	1:A:395:TYR:HE1	2	0.65
(1,2074)	1:A:393:LYS:HD3	1:A:395:TYR:HE2	2	0.65
(1,1988)	1:A:403:ARG:HA	1:A:403:ARG:HD3	17	0.65
(1,1982)	1:A:413:ARG:HA	1:A:413:ARG:HD3	2	0.65
(1,1962)	1:A:462:CYS:HB3	1:A:463:ARG:HA	8	0.65
(1,1962)	1:A:462:CYS:HB3	1:A:463:ARG:HA	17	0.65
(1,1933)	1:A:523:LYS:HA	1:A:526:ASN:HB3	15	0.65
(1,1731)	1:A:532:ARG:HD3	1:A:533:LEU:H	6	0.65

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1723)	1:A:403:ARG:HD3	1:A:403:ARG:HH22	6	0.65
(1,1604)	1:A:542:LYS:HA	1:A:542:LYS:HD3	6	0.65
(1,1549)	1:A:522:ARG:HG3	1:A:526:ASN:HD21	4	0.65
(1,1188)	1:A:538:ALA:HB1	1:A:539:MET:HB3	2	0.65
(1,1188)	1:A:538:ALA:HB2	1:A:539:MET:HB3	2	0.65
(1,1188)	1:A:538:ALA:HB3	1:A:539:MET:HB3	2	0.65
(1,1188)	1:A:538:ALA:HB1	1:A:539:MET:HB3	16	0.65
(1,1188)	1:A:538:ALA:HB2	1:A:539:MET:HB3	16	0.65
(1,1188)	1:A:538:ALA:HB3	1:A:539:MET:HB3	16	0.65
(1,835)	1:A:415:LYS:H	1:A:415:LYS:HG3	5	0.64
(1,835)	1:A:415:LYS:H	1:A:415:LYS:HG3	9	0.64
(1,835)	1:A:415:LYS:H	1:A:415:LYS:HG3	20	0.64
(1,710)	1:A:466:LEU:HB3	1:A:469:VAL:H	20	0.64
(1,641)	1:A:501:SER:HB3	1:A:502:ASP:H	14	0.64
(1,554)	1:A:542:LYS:H	1:A:542:LYS:HB3	1	0.64
(1,554)	1:A:542:LYS:H	1:A:542:LYS:HB3	2	0.64
(1,554)	1:A:542:LYS:H	1:A:542:LYS:HB3	11	0.64
(1,554)	1:A:542:LYS:H	1:A:542:LYS:HB3	13	0.64
(1,554)	1:A:542:LYS:H	1:A:542:LYS:HB3	19	0.64
(1,542)	1:A:463:ARG:H	1:A:463:ARG:HB3	10	0.64
(1,542)	1:A:463:ARG:H	1:A:463:ARG:HB3	15	0.64
(1,542)	1:A:463:ARG:H	1:A:463:ARG:HB3	18	0.64
(1,387)	1:A:539:MET:H	1:A:540:TRP:HB3	7	0.64
(1,2848)	1:A:544:GLN:HG3	1:A:545:ASP:H	10	0.64
(1,2729)	1:A:513:LEU:HA	1:A:523:LYS:HE3	8	0.64
(1,2686)	1:A:502:ASP:HB3	1:A:505:SER:H	13	0.64
(1,2677)	1:A:498:GLN:HA	1:A:498:GLN:HG3	5	0.64
(1,2621)	1:A:490:LEU:HD11	1:A:512:ARG:HD3	17	0.64
(1,2621)	1:A:490:LEU:HD12	1:A:512:ARG:HD3	17	0.64
(1,2621)	1:A:490:LEU:HD13	1:A:512:ARG:HD3	17	0.64
(1,2621)	1:A:490:LEU:HD21	1:A:512:ARG:HD3	17	0.64
(1,2621)	1:A:490:LEU:HD22	1:A:512:ARG:HD3	17	0.64
(1,2621)	1:A:490:LEU:HD23	1:A:512:ARG:HD3	17	0.64
(1,2553)	1:A:479:ARG:H	1:A:479:ARG:HB3	10	0.64
(1,2547)	1:A:476:ASN:HB3	1:A:480:GLN:H	14	0.64
(1,2480)	1:A:463:ARG:HD3	1:A:506:LEU:HD21	13	0.64
(1,2480)	1:A:463:ARG:HD3	1:A:506:LEU:HD22	13	0.64
(1,2480)	1:A:463:ARG:HD3	1:A:506:LEU:HD23	13	0.64
(1,2367)	1:A:434:HIS:HB3	1:A:435:GLY:H	17	0.64
(1,2367)	1:A:434:HIS:HB3	1:A:435:GLY:H	18	0.64
(1,2343)	1:A:429:GLU:HG3	1:A:430:ASP:H	20	0.64
(1,2254)	1:A:414:GLU:HB3	1:A:414:GLU:HG3	18	0.64

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2226)	1:A:408:ILE:HG21	1:A:494:SER:HB3	14	0.64
(1,2226)	1:A:408:ILE:HG22	1:A:494:SER:HB3	14	0.64
(1,2226)	1:A:408:ILE:HG23	1:A:494:SER:HB3	14	0.64
(1,2225)	1:A:408:ILE:HG21	1:A:493:GLU:HB3	20	0.64
(1,2225)	1:A:408:ILE:HG22	1:A:493:GLU:HB3	20	0.64
(1,2225)	1:A:408:ILE:HG23	1:A:493:GLU:HB3	20	0.64
(1,2137)	1:A:392:GLN:HA	1:A:393:LYS:HB3	12	0.64
(1,1982)	1:A:413:ARG:HA	1:A:413:ARG:HD3	15	0.64
(1,1982)	1:A:413:ARG:HA	1:A:413:ARG:HD3	17	0.64
(1,1805)	1:A:526:ASN:HA	1:A:529:LYS:HG3	14	0.64
(1,1676)	1:A:416:LEU:HG	1:A:417:GLU:HG3	20	0.64
(1,1655)	1:A:432:GLN:HA	1:A:432:GLN:HG3	11	0.64
(1,1616)	1:A:415:LYS:HD3	1:A:520:PHE:HE1	10	0.64
(1,1616)	1:A:415:LYS:HD3	1:A:520:PHE:HE2	10	0.64
(1,1549)	1:A:522:ARG:HG3	1:A:526:ASN:HD21	9	0.64
(1,1549)	1:A:522:ARG:HG3	1:A:526:ASN:HD21	10	0.64
(1,1549)	1:A:522:ARG:HG3	1:A:526:ASN:HD21	16	0.64
(1,146)	1:A:508:SER:HB3	1:A:509:GLY:H	7	0.64
(1,138)	1:A:526:ASN:H	1:A:526:ASN:HB3	11	0.64
(1,138)	1:A:526:ASN:H	1:A:526:ASN:HB3	20	0.64
(1,735)	1:A:410:LEU:HB3	1:A:411:ARG:H	1	0.63
(1,735)	1:A:410:LEU:HB3	1:A:411:ARG:H	4	0.63
(1,559)	1:A:463:ARG:HB3	1:A:463:ARG:HE	13	0.63
(1,554)	1:A:542:LYS:H	1:A:542:LYS:HB3	4	0.63
(1,554)	1:A:542:LYS:H	1:A:542:LYS:HB3	5	0.63
(1,554)	1:A:542:LYS:H	1:A:542:LYS:HB3	8	0.63
(1,554)	1:A:542:LYS:H	1:A:542:LYS:HB3	9	0.63
(1,554)	1:A:542:LYS:H	1:A:542:LYS:HB3	10	0.63
(1,554)	1:A:542:LYS:H	1:A:542:LYS:HB3	14	0.63
(1,554)	1:A:542:LYS:H	1:A:542:LYS:HB3	17	0.63
(1,554)	1:A:542:LYS:H	1:A:542:LYS:HB3	20	0.63
(1,542)	1:A:463:ARG:H	1:A:463:ARG:HB3	7	0.63
(1,542)	1:A:463:ARG:H	1:A:463:ARG:HB3	13	0.63
(1,464)	1:A:492:LEU:H	1:A:515:GLU:HB3	6	0.63
(1,449)	1:A:543:GLU:HB3	1:A:544:GLN:H	16	0.63
(1,2784)	1:A:523:LYS:HG3	1:A:524:VAL:H	5	0.63
(1,2741)	1:A:513:LEU:HD11	1:A:523:LYS:HE3	19	0.63
(1,2741)	1:A:513:LEU:HD12	1:A:523:LYS:HE3	19	0.63
(1,2741)	1:A:513:LEU:HD13	1:A:523:LYS:HE3	19	0.63
(1,2741)	1:A:513:LEU:HD21	1:A:523:LYS:HE3	19	0.63
(1,2741)	1:A:513:LEU:HD22	1:A:523:LYS:HE3	19	0.63
(1,2741)	1:A:513:LEU:HD23	1:A:523:LYS:HE3	19	0.63

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2729)	1:A:513:LEU:HA	1:A:523:LYS:HE3	16	0.63
(1,2729)	1:A:513:LEU:HA	1:A:523:LYS:HE3	17	0.63
(1,2710)	1:A:511:VAL:HA	1:A:512:ARG:HB3	6	0.63
(1,2710)	1:A:511:VAL:HA	1:A:512:ARG:HB3	10	0.63
(1,2710)	1:A:511:VAL:HA	1:A:512:ARG:HB3	16	0.63
(1,2685)	1:A:502:ASP:HB3	1:A:503:THR:H	17	0.63
(1,2658)	1:A:493:GLU:HG3	1:A:494:SER:H	1	0.63
(1,2633)	1:A:491:PRO:HG3	1:A:493:GLU:H	11	0.63
(1,2611)	1:A:490:LEU:HG	1:A:494:SER:HB3	10	0.63
(1,2611)	1:A:490:LEU:HG	1:A:494:SER:HB3	17	0.63
(1,2562)	1:A:480:GLN:HB3	1:A:482:SER:HB3	19	0.63
(1,25)	1:A:479:ARG:HG3	1:A:481:GLY:H	11	0.63
(1,2481)	1:A:463:ARG:HE	1:A:502:ASP:HB3	6	0.63
(1,2478)	1:A:463:ARG:H	1:A:463:ARG:HD3	17	0.63
(1,2432)	1:A:453:ILE:HG13	1:A:454:LEU:H	14	0.63
(1,2377)	1:A:438:GLU:HB3	1:A:439:LEU:H	5	0.63
(1,2353)	1:A:431:PHE:HB3	1:A:433:VAL:H	14	0.63
(1,2352)	1:A:431:PHE:HB3	1:A:432:GLN:H	6	0.63
(1,2343)	1:A:429:GLU:HG3	1:A:430:ASP:H	15	0.63
(1,2254)	1:A:414:GLU:HB3	1:A:414:GLU:HG3	9	0.63
(1,2225)	1:A:408:ILE:HG21	1:A:493:GLU:HB3	15	0.63
(1,2225)	1:A:408:ILE:HG22	1:A:493:GLU:HB3	15	0.63
(1,2225)	1:A:408:ILE:HG23	1:A:493:GLU:HB3	15	0.63
(1,2137)	1:A:392:GLN:HA	1:A:393:LYS:HB3	15	0.63
(1,2137)	1:A:392:GLN:HA	1:A:393:LYS:HB3	19	0.63
(1,2130)	1:A:387:GLU:HB3	1:A:390:SER:HA	13	0.63
(1,2027)	1:A:389:SER:HB3	1:A:390:SER:H	1	0.63
(1,1990)	1:A:505:SER:HA	1:A:508:SER:HB3	9	0.63
(1,1982)	1:A:413:ARG:HA	1:A:413:ARG:HD3	3	0.63
(1,1982)	1:A:413:ARG:HA	1:A:413:ARG:HD3	9	0.63
(1,1982)	1:A:413:ARG:HA	1:A:413:ARG:HD3	18	0.63
(1,1933)	1:A:523:LYS:HA	1:A:526:ASN:HB3	6	0.63
(1,1933)	1:A:523:LYS:HA	1:A:526:ASN:HB3	12	0.63
(1,1752)	1:A:512:ARG:HD3	1:A:512:ARG:HH22	8	0.63
(1,1716)	1:A:529:LYS:HB3	1:A:529:LYS:HE3	2	0.63
(1,1710)	1:A:542:LYS:HA	1:A:542:LYS:HE3	6	0.63
(1,1676)	1:A:416:LEU:HG	1:A:417:GLU:HG3	18	0.63
(1,165)	1:A:463:ARG:HB3	1:A:465:SER:H	10	0.63
(1,1571)	1:A:479:ARG:H	1:A:479:ARG:HG3	13	0.63
(1,1549)	1:A:522:ARG:HG3	1:A:526:ASN:HD21	12	0.63
(1,1549)	1:A:522:ARG:HG3	1:A:526:ASN:HD21	15	0.63
(1,138)	1:A:526:ASN:H	1:A:526:ASN:HB3	2	0.63

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,138)	1:A:526:ASN:H	1:A:526:ASN:HB3	4	0.63
(1,138)	1:A:526:ASN:H	1:A:526:ASN:HB3	9	0.63
(1,138)	1:A:526:ASN:H	1:A:526:ASN:HB3	15	0.63
(1,138)	1:A:526:ASN:H	1:A:526:ASN:HB3	18	0.63
(1,1203)	1:A:471:GLN:HB3	1:A:472:ALA:HB1	3	0.63
(1,1203)	1:A:471:GLN:HB3	1:A:472:ALA:HB2	3	0.63
(1,1203)	1:A:471:GLN:HB3	1:A:472:ALA:HB3	3	0.63
(1,1188)	1:A:538:ALA:HB1	1:A:539:MET:HB3	7	0.63
(1,1188)	1:A:538:ALA:HB2	1:A:539:MET:HB3	7	0.63
(1,1188)	1:A:538:ALA:HB3	1:A:539:MET:HB3	7	0.63
(1,108)	1:A:526:ASN:HD21	1:A:529:LYS:HE3	2	0.63
(1,108)	1:A:526:ASN:HD22	1:A:529:LYS:HE3	2	0.63
(1,835)	1:A:415:LYS:H	1:A:415:LYS:HG3	3	0.62
(1,806)	1:A:434:HIS:H	1:A:438:GLU:HG3	15	0.62
(1,790)	1:A:540:TRP:H	1:A:540:TRP:HB3	16	0.62
(1,735)	1:A:410:LEU:HB3	1:A:411:ARG:H	16	0.62
(1,691)	1:A:432:GLN:H	1:A:432:GLN:HG3	4	0.62
(1,554)	1:A:542:LYS:H	1:A:542:LYS:HB3	7	0.62
(1,554)	1:A:542:LYS:H	1:A:542:LYS:HB3	18	0.62
(1,542)	1:A:463:ARG:H	1:A:463:ARG:HB3	1	0.62
(1,535)	1:A:542:LYS:HB3	1:A:543:GLU:H	13	0.62
(1,397)	1:A:536:ARG:H	1:A:536:ARG:HD3	13	0.62
(1,368)	1:A:389:SER:H	1:A:389:SER:HB3	8	0.62
(1,2842)	1:A:544:GLN:H	1:A:544:GLN:HG3	7	0.62
(1,2837)	1:A:542:LYS:HA	1:A:542:LYS:HG3	8	0.62
(1,2822)	1:A:534:GLN:HG3	1:A:534:GLN:HE22	11	0.62
(1,2700)	1:A:509:GLY:H	1:A:510:LEU:HB3	2	0.62
(1,2684)	1:A:502:ASP:H	1:A:502:ASP:HB3	5	0.62
(1,2684)	1:A:502:ASP:H	1:A:502:ASP:HB3	11	0.62
(1,2633)	1:A:491:PRO:HG3	1:A:493:GLU:H	9	0.62
(1,2502)	1:A:467:HIS:HA	1:A:470:ASN:HB3	9	0.62
(1,2416)	1:A:447:ASP:HB3	1:A:448:HIS:H	1	0.62
(1,2377)	1:A:438:GLU:HB3	1:A:439:LEU:H	12	0.62
(1,2346)	1:A:430:ASP:HB3	1:A:431:PHE:H	7	0.62
(1,2214)	1:A:406:GLU:HG3	1:A:407:HIS:HA	3	0.62
(1,2214)	1:A:406:GLU:HG3	1:A:407:HIS:HA	7	0.62
(1,2027)	1:A:389:SER:HB3	1:A:390:SER:H	12	0.62
(1,1990)	1:A:505:SER:HA	1:A:508:SER:HB3	1	0.62
(1,1986)	1:A:403:ARG:HA	1:A:403:ARG:HG3	2	0.62
(1,1986)	1:A:403:ARG:HA	1:A:403:ARG:HG3	12	0.62
(1,1982)	1:A:413:ARG:HA	1:A:413:ARG:HD3	10	0.62
(1,1752)	1:A:512:ARG:HD3	1:A:512:ARG:HH22	7	0.62

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1723)	1:A:403:ARG:HD3	1:A:403:ARG:HH22	10	0.62
(1,1723)	1:A:403:ARG:HD3	1:A:403:ARG:HH22	14	0.62
(1,1684)	1:A:523:LYS:HB3	1:A:526:ASN:HB3	20	0.62
(1,1670)	1:A:438:GLU:HA	1:A:438:GLU:HG3	9	0.62
(1,1670)	1:A:438:GLU:HA	1:A:438:GLU:HG3	15	0.62
(1,138)	1:A:526:ASN:H	1:A:526:ASN:HB3	7	0.62
(1,138)	1:A:526:ASN:H	1:A:526:ASN:HB3	8	0.62
(1,1203)	1:A:471:GLN:HB3	1:A:472:ALA:HB1	5	0.62
(1,1203)	1:A:471:GLN:HB3	1:A:472:ALA:HB2	5	0.62
(1,1203)	1:A:471:GLN:HB3	1:A:472:ALA:HB3	5	0.62
(1,945)	1:A:462:CYS:H	1:A:463:ARG:HB3	17	0.61
(1,883)	1:A:523:LYS:HB3	1:A:524:VAL:H	20	0.61
(1,835)	1:A:415:LYS:H	1:A:415:LYS:HG3	19	0.61
(1,812)	1:A:390:SER:HB3	1:A:391:GLU:H	6	0.61
(1,790)	1:A:540:TRP:H	1:A:540:TRP:HB3	10	0.61
(1,756)	1:A:479:ARG:H	1:A:479:ARG:HD3	10	0.61
(1,735)	1:A:410:LEU:HB3	1:A:411:ARG:H	9	0.61
(1,735)	1:A:410:LEU:HB3	1:A:411:ARG:H	12	0.61
(1,735)	1:A:410:LEU:HB3	1:A:411:ARG:H	20	0.61
(1,552)	1:A:542:LYS:H	1:A:542:LYS:HD3	7	0.61
(1,543)	1:A:462:CYS:HB3	1:A:463:ARG:H	15	0.61
(1,542)	1:A:463:ARG:H	1:A:463:ARG:HB3	8	0.61
(1,542)	1:A:463:ARG:H	1:A:463:ARG:HB3	12	0.61
(1,542)	1:A:463:ARG:H	1:A:463:ARG:HB3	16	0.61
(1,2839)	1:A:542:LYS:HG3	1:A:543:GLU:H	3	0.61
(1,2837)	1:A:542:LYS:HA	1:A:542:LYS:HG3	5	0.61
(1,2837)	1:A:542:LYS:HA	1:A:542:LYS:HG3	14	0.61
(1,2822)	1:A:534:GLN:HG3	1:A:534:GLN:HE22	9	0.61
(1,2741)	1:A:513:LEU:HD11	1:A:523:LYS:HE3	11	0.61
(1,2741)	1:A:513:LEU:HD12	1:A:523:LYS:HE3	11	0.61
(1,2741)	1:A:513:LEU:HD13	1:A:523:LYS:HE3	11	0.61
(1,2741)	1:A:513:LEU:HD21	1:A:523:LYS:HE3	11	0.61
(1,2741)	1:A:513:LEU:HD22	1:A:523:LYS:HE3	11	0.61
(1,2741)	1:A:513:LEU:HD23	1:A:523:LYS:HE3	11	0.61
(1,2684)	1:A:502:ASP:H	1:A:502:ASP:HB3	3	0.61
(1,2684)	1:A:502:ASP:H	1:A:502:ASP:HB3	8	0.61
(1,2684)	1:A:502:ASP:H	1:A:502:ASP:HB3	14	0.61
(1,2677)	1:A:498:GLN:HA	1:A:498:GLN:HG3	2	0.61
(1,2677)	1:A:498:GLN:HA	1:A:498:GLN:HG3	7	0.61
(1,2677)	1:A:498:GLN:HA	1:A:498:GLN:HG3	10	0.61
(1,2658)	1:A:493:GLU:HG3	1:A:494:SER:H	15	0.61
(1,2658)	1:A:493:GLU:HG3	1:A:494:SER:H	20	0.61

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2377)	1:A:438:GLU:HB3	1:A:439:LEU:H	18	0.61
(1,2367)	1:A:434:HIS:HB3	1:A:435:GLY:H	11	0.61
(1,2354)	1:A:432:GLN:H	1:A:432:GLN:HB3	6	0.61
(1,2336)	1:A:423:ASP:HB3	1:A:424:GLY:H	7	0.61
(1,2196)	1:A:401:HIS:HE1	1:A:406:GLU:HB3	1	0.61
(1,2179)	1:A:398:VAL:HG11	1:A:449:SER:HB3	1	0.61
(1,2179)	1:A:398:VAL:HG12	1:A:449:SER:HB3	1	0.61
(1,2179)	1:A:398:VAL:HG13	1:A:449:SER:HB3	1	0.61
(1,2179)	1:A:398:VAL:HG21	1:A:449:SER:HB3	1	0.61
(1,2179)	1:A:398:VAL:HG22	1:A:449:SER:HB3	1	0.61
(1,2179)	1:A:398:VAL:HG23	1:A:449:SER:HB3	1	0.61
(1,1982)	1:A:413:ARG:HA	1:A:413:ARG:HD3	4	0.61
(1,1982)	1:A:413:ARG:HA	1:A:413:ARG:HD3	16	0.61
(1,1933)	1:A:523:LYS:HA	1:A:526:ASN:HB3	20	0.61
(1,1752)	1:A:512:ARG:HD3	1:A:512:ARG:HH22	1	0.61
(1,1752)	1:A:512:ARG:HD3	1:A:512:ARG:HH22	11	0.61
(1,1731)	1:A:532:ARG:HD3	1:A:533:LEU:H	4	0.61
(1,1684)	1:A:523:LYS:HB3	1:A:526:ASN:HB3	12	0.61
(1,1549)	1:A:522:ARG:HG3	1:A:526:ASN:HD21	17	0.61
(1,1502)	1:A:466:LEU:HB3	1:A:466:LEU:HD21	3	0.61
(1,1502)	1:A:466:LEU:HB3	1:A:466:LEU:HD22	3	0.61
(1,1502)	1:A:466:LEU:HB3	1:A:466:LEU:HD23	3	0.61
(1,1502)	1:A:466:LEU:HB3	1:A:466:LEU:HD21	9	0.61
(1,1502)	1:A:466:LEU:HB3	1:A:466:LEU:HD22	9	0.61
(1,1502)	1:A:466:LEU:HB3	1:A:466:LEU:HD23	9	0.61
(1,138)	1:A:526:ASN:H	1:A:526:ASN:HB3	6	0.61
(1,138)	1:A:526:ASN:H	1:A:526:ASN:HB3	12	0.61
(1,138)	1:A:526:ASN:H	1:A:526:ASN:HB3	14	0.61
(1,138)	1:A:526:ASN:H	1:A:526:ASN:HB3	16	0.61
(1,1235)	1:A:450:ALA:HB1	1:A:536:ARG:HD3	19	0.61
(1,1235)	1:A:450:ALA:HB2	1:A:536:ARG:HD3	19	0.61
(1,1235)	1:A:450:ALA:HB3	1:A:536:ARG:HD3	19	0.61
(1,945)	1:A:462:CYS:H	1:A:463:ARG:HB3	12	0.6
(1,768)	1:A:537:LYS:H	1:A:537:LYS:HD3	13	0.6
(1,691)	1:A:432:GLN:H	1:A:432:GLN:HG3	11	0.6
(1,679)	1:A:436:ARG:H	1:A:436:ARG:HD3	15	0.6
(1,636)	1:A:463:ARG:HB3	1:A:464:LEU:H	10	0.6
(1,542)	1:A:463:ARG:H	1:A:463:ARG:HB3	11	0.6
(1,542)	1:A:463:ARG:H	1:A:463:ARG:HB3	17	0.6
(1,542)	1:A:463:ARG:H	1:A:463:ARG:HB3	19	0.6
(1,542)	1:A:463:ARG:H	1:A:463:ARG:HB3	20	0.6
(1,368)	1:A:389:SER:H	1:A:389:SER:HB3	7	0.6

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2828)	1:A:537:LYS:HG3	1:A:538:ALA:H	3	0.6
(1,2822)	1:A:534:GLN:HG3	1:A:534:GLN:HE22	6	0.6
(1,2822)	1:A:534:GLN:HG3	1:A:534:GLN:HE22	10	0.6
(1,2822)	1:A:534:GLN:HG3	1:A:534:GLN:HE22	13	0.6
(1,2822)	1:A:534:GLN:HG3	1:A:534:GLN:HE22	16	0.6
(1,2822)	1:A:534:GLN:HG3	1:A:534:GLN:HE22	17	0.6
(1,2822)	1:A:534:GLN:HG3	1:A:534:GLN:HE22	18	0.6
(1,2822)	1:A:534:GLN:HG3	1:A:534:GLN:HE22	19	0.6
(1,2822)	1:A:534:GLN:HG3	1:A:534:GLN:HE22	20	0.6
(1,2796)	1:A:527:THR:HA	1:A:529:LYS:HD3	13	0.6
(1,2741)	1:A:513:LEU:HD11	1:A:523:LYS:HE3	2	0.6
(1,2741)	1:A:513:LEU:HD12	1:A:523:LYS:HE3	2	0.6
(1,2741)	1:A:513:LEU:HD13	1:A:523:LYS:HE3	2	0.6
(1,2741)	1:A:513:LEU:HD21	1:A:523:LYS:HE3	2	0.6
(1,2741)	1:A:513:LEU:HD22	1:A:523:LYS:HE3	2	0.6
(1,2741)	1:A:513:LEU:HD23	1:A:523:LYS:HE3	2	0.6
(1,2697)	1:A:507:LEU:HB3	1:A:508:SER:H	4	0.6
(1,2697)	1:A:507:LEU:HB3	1:A:508:SER:H	9	0.6
(1,2684)	1:A:502:ASP:H	1:A:502:ASP:HB3	4	0.6
(1,2684)	1:A:502:ASP:H	1:A:502:ASP:HB3	6	0.6
(1,2684)	1:A:502:ASP:H	1:A:502:ASP:HB3	9	0.6
(1,2684)	1:A:502:ASP:H	1:A:502:ASP:HB3	17	0.6
(1,2684)	1:A:502:ASP:H	1:A:502:ASP:HB3	18	0.6
(1,2677)	1:A:498:GLN:HA	1:A:498:GLN:HG3	6	0.6
(1,2677)	1:A:498:GLN:HA	1:A:498:GLN:HG3	15	0.6
(1,2611)	1:A:490:LEU:HG	1:A:494:SER:HB3	5	0.6
(1,2532)	1:A:472:ALA:HB1	1:A:475:SER:HB3	4	0.6
(1,2532)	1:A:472:ALA:HB2	1:A:475:SER:HB3	4	0.6
(1,2532)	1:A:472:ALA:HB3	1:A:475:SER:HB3	4	0.6
(1,2529)	1:A:471:GLN:HG3	1:A:472:ALA:H	18	0.6
(1,2496)	1:A:466:LEU:HB3	1:A:469:VAL:HG11	12	0.6
(1,2496)	1:A:466:LEU:HB3	1:A:469:VAL:HG12	12	0.6
(1,2496)	1:A:466:LEU:HB3	1:A:469:VAL:HG13	12	0.6
(1,2496)	1:A:466:LEU:HB3	1:A:469:VAL:HG21	12	0.6
(1,2496)	1:A:466:LEU:HB3	1:A:469:VAL:HG22	12	0.6
(1,2496)	1:A:466:LEU:HB3	1:A:469:VAL:HG23	12	0.6
(1,2409)	1:A:446:ILE:HG21	1:A:473:MET:HG3	8	0.6
(1,2409)	1:A:446:ILE:HG22	1:A:473:MET:HG3	8	0.6
(1,2409)	1:A:446:ILE:HG23	1:A:473:MET:HG3	8	0.6
(1,2377)	1:A:438:GLU:HB3	1:A:439:LEU:H	8	0.6
(1,2374)	1:A:438:GLU:H	1:A:438:GLU:HB3	3	0.6
(1,2354)	1:A:432:GLN:H	1:A:432:GLN:HB3	9	0.6

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2354)	1:A:432:GLN:H	1:A:432:GLN:HB3	18	0.6
(1,2336)	1:A:423:ASP:HB3	1:A:424:GLY:H	8	0.6
(1,2336)	1:A:423:ASP:HB3	1:A:424:GLY:H	14	0.6
(1,2196)	1:A:401:HIS:HE1	1:A:406:GLU:HB3	16	0.6
(1,2129)	1:A:387:GLU:HB3	1:A:390:SER:H	13	0.6
(1,2126)	1:A:529:LYS:HE3	1:A:531:HIS:HE1	8	0.6
(1,1990)	1:A:505:SER:HA	1:A:508:SER:HB3	3	0.6
(1,1982)	1:A:413:ARG:HA	1:A:413:ARG:HD3	6	0.6
(1,1740)	1:A:436:ARG:HA	1:A:436:ARG:HD3	20	0.6
(1,1676)	1:A:416:LEU:HG	1:A:417:GLU:HG3	6	0.6
(1,1577)	1:A:456:LEU:HG	1:A:462:CYS:HB3	3	0.6
(1,1576)	1:A:462:CYS:HB3	1:A:506:LEU:HD11	5	0.6
(1,1576)	1:A:462:CYS:HB3	1:A:506:LEU:HD12	5	0.6
(1,1576)	1:A:462:CYS:HB3	1:A:506:LEU:HD13	5	0.6
(1,1502)	1:A:466:LEU:HB3	1:A:466:LEU:HD21	1	0.6
(1,1502)	1:A:466:LEU:HB3	1:A:466:LEU:HD22	1	0.6
(1,1502)	1:A:466:LEU:HB3	1:A:466:LEU:HD23	1	0.6
(1,1502)	1:A:466:LEU:HB3	1:A:466:LEU:HD21	2	0.6
(1,1502)	1:A:466:LEU:HB3	1:A:466:LEU:HD22	2	0.6
(1,1502)	1:A:466:LEU:HB3	1:A:466:LEU:HD23	2	0.6
(1,1502)	1:A:466:LEU:HB3	1:A:466:LEU:HD21	4	0.6
(1,1502)	1:A:466:LEU:HB3	1:A:466:LEU:HD22	4	0.6
(1,1502)	1:A:466:LEU:HB3	1:A:466:LEU:HD23	4	0.6
(1,1502)	1:A:466:LEU:HB3	1:A:466:LEU:HD21	6	0.6
(1,1502)	1:A:466:LEU:HB3	1:A:466:LEU:HD22	6	0.6
(1,1502)	1:A:466:LEU:HB3	1:A:466:LEU:HD23	6	0.6
(1,1502)	1:A:466:LEU:HB3	1:A:466:LEU:HD21	13	0.6
(1,1502)	1:A:466:LEU:HB3	1:A:466:LEU:HD22	13	0.6
(1,1502)	1:A:466:LEU:HB3	1:A:466:LEU:HD23	13	0.6
(1,1502)	1:A:466:LEU:HB3	1:A:466:LEU:HD21	15	0.6
(1,1502)	1:A:466:LEU:HB3	1:A:466:LEU:HD22	15	0.6
(1,1502)	1:A:466:LEU:HB3	1:A:466:LEU:HD23	15	0.6
(1,1502)	1:A:466:LEU:HB3	1:A:466:LEU:HD21	16	0.6
(1,1502)	1:A:466:LEU:HB3	1:A:466:LEU:HD22	16	0.6
(1,1502)	1:A:466:LEU:HB3	1:A:466:LEU:HD23	16	0.6
(1,1502)	1:A:466:LEU:HB3	1:A:466:LEU:HD21	18	0.6
(1,1502)	1:A:466:LEU:HB3	1:A:466:LEU:HD22	18	0.6
(1,1502)	1:A:466:LEU:HB3	1:A:466:LEU:HD23	18	0.6
(1,1502)	1:A:466:LEU:HB3	1:A:466:LEU:HD21	19	0.6
(1,1502)	1:A:466:LEU:HB3	1:A:466:LEU:HD22	19	0.6
(1,1502)	1:A:466:LEU:HB3	1:A:466:LEU:HD23	19	0.6
(1,146)	1:A:508:SER:HB3	1:A:509:GLY:H	13	0.6

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,138)	1:A:526:ASN:H	1:A:526:ASN:HB3	10	0.6
(1,138)	1:A:526:ASN:H	1:A:526:ASN:HB3	17	0.6
(1,1188)	1:A:538:ALA:HB1	1:A:539:MET:HB3	6	0.6
(1,1188)	1:A:538:ALA:HB2	1:A:539:MET:HB3	6	0.6
(1,1188)	1:A:538:ALA:HB3	1:A:539:MET:HB3	6	0.6
(1,735)	1:A:410:LEU:HB3	1:A:411:ARG:H	14	0.59
(1,641)	1:A:501:SER:HB3	1:A:502:ASP:H	9	0.59
(1,561)	1:A:543:GLU:HB3	1:A:545:ASP:H	13	0.59
(1,542)	1:A:463:ARG:H	1:A:463:ARG:HB3	2	0.59
(1,542)	1:A:463:ARG:H	1:A:463:ARG:HB3	3	0.59
(1,542)	1:A:463:ARG:H	1:A:463:ARG:HB3	4	0.59
(1,542)	1:A:463:ARG:H	1:A:463:ARG:HB3	5	0.59
(1,542)	1:A:463:ARG:H	1:A:463:ARG:HB3	9	0.59
(1,542)	1:A:463:ARG:H	1:A:463:ARG:HB3	14	0.59
(1,524)	1:A:529:LYS:H	1:A:532:ARG:HD3	10	0.59
(1,397)	1:A:536:ARG:H	1:A:536:ARG:HD3	16	0.59
(1,359)	1:A:390:SER:H	1:A:390:SER:HB3	12	0.59
(1,2835)	1:A:541:ARG:HB3	1:A:541:ARG:HD3	8	0.59
(1,2830)	1:A:538:ALA:HB1	1:A:541:ARG:HD3	16	0.59
(1,2830)	1:A:538:ALA:HB2	1:A:541:ARG:HD3	16	0.59
(1,2830)	1:A:538:ALA:HB3	1:A:541:ARG:HD3	16	0.59
(1,2827)	1:A:537:LYS:HG3	1:A:537:LYS:HE3	14	0.59
(1,2822)	1:A:534:GLN:HG3	1:A:534:GLN:HE22	7	0.59
(1,2799)	1:A:529:LYS:H	1:A:529:LYS:HB3	14	0.59
(1,2729)	1:A:513:LEU:HA	1:A:523:LYS:HE3	4	0.59
(1,2697)	1:A:507:LEU:HB3	1:A:508:SER:H	17	0.59
(1,2684)	1:A:502:ASP:H	1:A:502:ASP:HB3	1	0.59
(1,2684)	1:A:502:ASP:H	1:A:502:ASP:HB3	12	0.59
(1,2677)	1:A:498:GLN:HA	1:A:498:GLN:HG3	3	0.59
(1,2677)	1:A:498:GLN:HA	1:A:498:GLN:HG3	8	0.59
(1,2677)	1:A:498:GLN:HA	1:A:498:GLN:HG3	9	0.59
(1,2677)	1:A:498:GLN:HA	1:A:498:GLN:HG3	16	0.59
(1,2575)	1:A:484:ASP:HB3	1:A:485:CYS:H	10	0.59
(1,2529)	1:A:471:GLN:HG3	1:A:472:ALA:H	1	0.59
(1,2529)	1:A:471:GLN:HG3	1:A:472:ALA:H	2	0.59
(1,2529)	1:A:471:GLN:HG3	1:A:472:ALA:H	3	0.59
(1,2529)	1:A:471:GLN:HG3	1:A:472:ALA:H	4	0.59
(1,2529)	1:A:471:GLN:HG3	1:A:472:ALA:H	7	0.59
(1,2529)	1:A:471:GLN:HG3	1:A:472:ALA:H	8	0.59
(1,2529)	1:A:471:GLN:HG3	1:A:472:ALA:H	9	0.59
(1,2529)	1:A:471:GLN:HG3	1:A:472:ALA:H	13	0.59
(1,2529)	1:A:471:GLN:HG3	1:A:472:ALA:H	16	0.59

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2529)	1:A:471:GLN:HG3	1:A:472:ALA:H	17	0.59
(1,25)	1:A:479:ARG:HG3	1:A:481:GLY:H	12	0.59
(1,2499)	1:A:466:LEU:HD11	1:A:467:HIS:HB3	6	0.59
(1,2499)	1:A:466:LEU:HD12	1:A:467:HIS:HB3	6	0.59
(1,2499)	1:A:466:LEU:HD13	1:A:467:HIS:HB3	6	0.59
(1,2499)	1:A:466:LEU:HD21	1:A:467:HIS:HB3	6	0.59
(1,2499)	1:A:466:LEU:HD22	1:A:467:HIS:HB3	6	0.59
(1,2499)	1:A:466:LEU:HD23	1:A:467:HIS:HB3	6	0.59
(1,2480)	1:A:463:ARG:HD3	1:A:506:LEU:HD21	7	0.59
(1,2480)	1:A:463:ARG:HD3	1:A:506:LEU:HD22	7	0.59
(1,2480)	1:A:463:ARG:HD3	1:A:506:LEU:HD23	7	0.59
(1,2464)	1:A:456:LEU:HB3	1:A:490:LEU:HD11	7	0.59
(1,2464)	1:A:456:LEU:HB3	1:A:490:LEU:HD12	7	0.59
(1,2464)	1:A:456:LEU:HB3	1:A:490:LEU:HD13	7	0.59
(1,2464)	1:A:456:LEU:HB3	1:A:490:LEU:HD21	7	0.59
(1,2464)	1:A:456:LEU:HB3	1:A:490:LEU:HD22	7	0.59
(1,2464)	1:A:456:LEU:HB3	1:A:490:LEU:HD23	7	0.59
(1,2432)	1:A:453:ILE:HG13	1:A:454:LEU:H	8	0.59
(1,2409)	1:A:446:ILE:HG21	1:A:473:MET:HG3	15	0.59
(1,2409)	1:A:446:ILE:HG22	1:A:473:MET:HG3	15	0.59
(1,2409)	1:A:446:ILE:HG23	1:A:473:MET:HG3	15	0.59
(1,2374)	1:A:438:GLU:H	1:A:438:GLU:HB3	1	0.59
(1,2374)	1:A:438:GLU:H	1:A:438:GLU:HB3	20	0.59
(1,2354)	1:A:432:GLN:H	1:A:432:GLN:HB3	3	0.59
(1,2354)	1:A:432:GLN:H	1:A:432:GLN:HB3	4	0.59
(1,2341)	1:A:428:CYS:HA	1:A:429:GLU:HB3	6	0.59
(1,2262)	1:A:415:LYS:HE3	1:A:520:PHE:HE1	15	0.59
(1,2262)	1:A:415:LYS:HE3	1:A:520:PHE:HE2	15	0.59
(1,2250)	1:A:414:GLU:H	1:A:414:GLU:HB3	11	0.59
(1,2250)	1:A:414:GLU:H	1:A:414:GLU:HB3	17	0.59
(1,2226)	1:A:408:ILE:HG21	1:A:494:SER:HB3	4	0.59
(1,2226)	1:A:408:ILE:HG22	1:A:494:SER:HB3	4	0.59
(1,2226)	1:A:408:ILE:HG23	1:A:494:SER:HB3	4	0.59
(1,2215)	1:A:406:GLU:HG3	1:A:409:ALA:H	19	0.59
(1,2148)	1:A:395:TYR:HA	1:A:396:ASN:HB3	16	0.59
(1,2145)	1:A:393:LYS:HG3	1:A:393:LYS:HE3	3	0.59
(1,2137)	1:A:392:GLN:HA	1:A:393:LYS:HB3	14	0.59
(1,2135)	1:A:392:GLN:HA	1:A:392:GLN:HG3	8	0.59
(1,2129)	1:A:387:GLU:HB3	1:A:390:SER:H	8	0.59
(1,1996)	1:A:491:PRO:HA	1:A:515:GLU:HB3	6	0.59
(1,1996)	1:A:491:PRO:HA	1:A:515:GLU:HB3	14	0.59
(1,1982)	1:A:413:ARG:HA	1:A:413:ARG:HD3	1	0.59

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1982)	1:A:413:ARG:HA	1:A:413:ARG:HD3	5	0.59
(1,1982)	1:A:413:ARG:HA	1:A:413:ARG:HD3	8	0.59
(1,1752)	1:A:512:ARG:HD3	1:A:512:ARG:HH22	17	0.59
(1,1751)	1:A:488:PRO:HB3	1:A:512:ARG:HD3	8	0.59
(1,1740)	1:A:436:ARG:HA	1:A:436:ARG:HD3	3	0.59
(1,1716)	1:A:529:LYS:HB3	1:A:529:LYS:HE3	11	0.59
(1,1716)	1:A:529:LYS:HB3	1:A:529:LYS:HE3	13	0.59
(1,1709)	1:A:542:LYS:HB3	1:A:542:LYS:HE3	9	0.59
(1,1684)	1:A:523:LYS:HB3	1:A:526:ASN:HB3	6	0.59
(1,1676)	1:A:416:LEU:HG	1:A:417:GLU:HG3	3	0.59
(1,1661)	1:A:518:GLN:HG3	1:A:519:ILE:HA	10	0.59
(1,1661)	1:A:518:GLN:HG3	1:A:519:ILE:HA	11	0.59
(1,1661)	1:A:518:GLN:HG3	1:A:519:ILE:HA	17	0.59
(1,165)	1:A:463:ARG:HB3	1:A:465:SER:H	12	0.59
(1,1617)	1:A:415:LYS:H	1:A:415:LYS:HD3	1	0.59
(1,1608)	1:A:534:GLN:HA	1:A:537:LYS:HD3	5	0.59
(1,1599)	1:A:393:LYS:HD3	1:A:395:TYR:HD1	18	0.59
(1,1599)	1:A:393:LYS:HD3	1:A:395:TYR:HD2	18	0.59
(1,1549)	1:A:522:ARG:HG3	1:A:526:ASN:HD21	3	0.59
(1,1502)	1:A:466:LEU:HB3	1:A:466:LEU:HD21	7	0.59
(1,1502)	1:A:466:LEU:HB3	1:A:466:LEU:HD22	7	0.59
(1,1502)	1:A:466:LEU:HB3	1:A:466:LEU:HD23	7	0.59
(1,1502)	1:A:466:LEU:HB3	1:A:466:LEU:HD21	17	0.59
(1,1502)	1:A:466:LEU:HB3	1:A:466:LEU:HD22	17	0.59
(1,1502)	1:A:466:LEU:HB3	1:A:466:LEU:HD23	17	0.59
(1,138)	1:A:526:ASN:H	1:A:526:ASN:HB3	1	0.59
(1,138)	1:A:526:ASN:H	1:A:526:ASN:HB3	3	0.59
(1,1275)	1:A:398:VAL:HG21	1:A:449:SER:HB3	9	0.59
(1,1275)	1:A:398:VAL:HG22	1:A:449:SER:HB3	9	0.59
(1,1275)	1:A:398:VAL:HG23	1:A:449:SER:HB3	9	0.59
(1,1262)	1:A:527:THR:HG21	1:A:529:LYS:HG3	14	0.59
(1,1262)	1:A:527:THR:HG22	1:A:529:LYS:HG3	14	0.59
(1,1262)	1:A:527:THR:HG23	1:A:529:LYS:HG3	14	0.59
(1,1235)	1:A:450:ALA:HB1	1:A:536:ARG:HD3	5	0.59
(1,1235)	1:A:450:ALA:HB2	1:A:536:ARG:HD3	5	0.59
(1,1235)	1:A:450:ALA:HB3	1:A:536:ARG:HD3	5	0.59
(1,1121)	1:A:536:ARG:HD3	1:A:539:MET:HE1	20	0.59
(1,1121)	1:A:536:ARG:HD3	1:A:539:MET:HE2	20	0.59
(1,1121)	1:A:536:ARG:HD3	1:A:539:MET:HE3	20	0.59
(1,883)	1:A:523:LYS:HB3	1:A:524:VAL:H	12	0.58
(1,883)	1:A:523:LYS:HB3	1:A:524:VAL:H	15	0.58
(1,811)	1:A:391:GLU:H	1:A:391:GLU:HG3	1	0.58

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,790)	1:A:540:TRP:H	1:A:540:TRP:HB3	6	0.58
(1,735)	1:A:410:LEU:HB3	1:A:411:ARG:H	5	0.58
(1,735)	1:A:410:LEU:HB3	1:A:411:ARG:H	11	0.58
(1,710)	1:A:466:LEU:HB3	1:A:469:VAL:H	14	0.58
(1,542)	1:A:463:ARG:H	1:A:463:ARG:HB3	6	0.58
(1,449)	1:A:543:GLU:HB3	1:A:544:GLN:H	15	0.58
(1,359)	1:A:390:SER:H	1:A:390:SER:HB3	3	0.58
(1,2783)	1:A:523:LYS:HG3	1:A:523:LYS:HE3	20	0.58
(1,2686)	1:A:502:ASP:HB3	1:A:505:SER:H	16	0.58
(1,2685)	1:A:502:ASP:HB3	1:A:503:THR:H	11	0.58
(1,2685)	1:A:502:ASP:HB3	1:A:503:THR:H	14	0.58
(1,2611)	1:A:490:LEU:HG	1:A:494:SER:HB3	4	0.58
(1,2557)	1:A:479:ARG:HH22	1:A:480:GLN:H	8	0.58
(1,2540)	1:A:475:SER:H	1:A:475:SER:HB3	10	0.58
(1,2529)	1:A:471:GLN:HG3	1:A:472:ALA:H	10	0.58
(1,25)	1:A:479:ARG:HG3	1:A:481:GLY:H	8	0.58
(1,2481)	1:A:463:ARG:HE	1:A:502:ASP:HB3	12	0.58
(1,2480)	1:A:463:ARG:HD3	1:A:506:LEU:HD21	1	0.58
(1,2480)	1:A:463:ARG:HD3	1:A:506:LEU:HD22	1	0.58
(1,2480)	1:A:463:ARG:HD3	1:A:506:LEU:HD23	1	0.58
(1,2409)	1:A:446:ILE:HG21	1:A:473:MET:HG3	3	0.58
(1,2409)	1:A:446:ILE:HG22	1:A:473:MET:HG3	3	0.58
(1,2409)	1:A:446:ILE:HG23	1:A:473:MET:HG3	3	0.58
(1,2354)	1:A:432:GLN:H	1:A:432:GLN:HB3	7	0.58
(1,2255)	1:A:414:GLU:HB3	1:A:415:LYS:H	7	0.58
(1,2250)	1:A:414:GLU:H	1:A:414:GLU:HB3	3	0.58
(1,2250)	1:A:414:GLU:H	1:A:414:GLU:HB3	7	0.58
(1,2250)	1:A:414:GLU:H	1:A:414:GLU:HB3	8	0.58
(1,2225)	1:A:408:ILE:HG21	1:A:493:GLU:HB3	13	0.58
(1,2225)	1:A:408:ILE:HG22	1:A:493:GLU:HB3	13	0.58
(1,2225)	1:A:408:ILE:HG23	1:A:493:GLU:HB3	13	0.58
(1,2214)	1:A:406:GLU:HG3	1:A:407:HIS:HA	18	0.58
(1,2196)	1:A:401:HIS:HE1	1:A:406:GLU:HB3	17	0.58
(1,2135)	1:A:392:GLN:HA	1:A:392:GLN:HG3	15	0.58
(1,2129)	1:A:387:GLU:HB3	1:A:390:SER:H	14	0.58
(1,2074)	1:A:393:LYS:HD3	1:A:395:TYR:HE1	13	0.58
(1,2074)	1:A:393:LYS:HD3	1:A:395:TYR:HE2	13	0.58
(1,2021)	1:A:505:SER:HB3	1:A:506:LEU:HG	4	0.58
(1,1933)	1:A:523:LYS:HA	1:A:526:ASN:HB3	17	0.58
(1,1753)	1:A:512:ARG:H	1:A:512:ARG:HD3	20	0.58
(1,1752)	1:A:512:ARG:HD3	1:A:512:ARG:HH22	5	0.58
(1,1709)	1:A:542:LYS:HB3	1:A:542:LYS:HE3	10	0.58

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1655)	1:A:432:GLN:HA	1:A:432:GLN:HG3	14	0.58
(1,1655)	1:A:432:GLN:HA	1:A:432:GLN:HG3	20	0.58
(1,1576)	1:A:462:CYS:HB3	1:A:506:LEU:HD11	17	0.58
(1,1576)	1:A:462:CYS:HB3	1:A:506:LEU:HD12	17	0.58
(1,1576)	1:A:462:CYS:HB3	1:A:506:LEU:HD13	17	0.58
(1,1571)	1:A:479:ARG:H	1:A:479:ARG:HG3	16	0.58
(1,1571)	1:A:479:ARG:H	1:A:479:ARG:HG3	17	0.58
(1,1502)	1:A:466:LEU:HB3	1:A:466:LEU:HD21	5	0.58
(1,1502)	1:A:466:LEU:HB3	1:A:466:LEU:HD22	5	0.58
(1,1502)	1:A:466:LEU:HB3	1:A:466:LEU:HD23	5	0.58
(1,146)	1:A:508:SER:HB3	1:A:509:GLY:H	17	0.58
(1,105)	1:A:522:ARG:HG3	1:A:526:ASN:HD22	13	0.58
(1,945)	1:A:462:CYS:H	1:A:463:ARG:HB3	4	0.57
(1,945)	1:A:462:CYS:H	1:A:463:ARG:HB3	19	0.57
(1,945)	1:A:462:CYS:H	1:A:463:ARG:HB3	20	0.57
(1,806)	1:A:434:HIS:H	1:A:438:GLU:HG3	1	0.57
(1,789)	1:A:539:MET:HB3	1:A:540:TRP:H	4	0.57
(1,789)	1:A:539:MET:HB3	1:A:540:TRP:H	8	0.57
(1,789)	1:A:539:MET:HB3	1:A:540:TRP:H	10	0.57
(1,735)	1:A:410:LEU:HB3	1:A:411:ARG:H	3	0.57
(1,735)	1:A:410:LEU:HB3	1:A:411:ARG:H	7	0.57
(1,735)	1:A:410:LEU:HB3	1:A:411:ARG:H	13	0.57
(1,691)	1:A:432:GLN:H	1:A:432:GLN:HG3	9	0.57
(1,368)	1:A:389:SER:H	1:A:389:SER:HB3	18	0.57
(1,2837)	1:A:542:LYS:HA	1:A:542:LYS:HG3	17	0.57
(1,2835)	1:A:541:ARG:HB3	1:A:541:ARG:HD3	18	0.57
(1,2828)	1:A:537:LYS:HG3	1:A:538:ALA:H	13	0.57
(1,2800)	1:A:529:LYS:H	1:A:529:LYS:HD3	17	0.57
(1,2799)	1:A:529:LYS:H	1:A:529:LYS:HB3	3	0.57
(1,2799)	1:A:529:LYS:H	1:A:529:LYS:HB3	5	0.57
(1,2799)	1:A:529:LYS:H	1:A:529:LYS:HB3	7	0.57
(1,2799)	1:A:529:LYS:H	1:A:529:LYS:HB3	13	0.57
(1,2799)	1:A:529:LYS:H	1:A:529:LYS:HB3	19	0.57
(1,2741)	1:A:513:LEU:HD11	1:A:523:LYS:HE3	15	0.57
(1,2741)	1:A:513:LEU:HD12	1:A:523:LYS:HE3	15	0.57
(1,2741)	1:A:513:LEU:HD13	1:A:523:LYS:HE3	15	0.57
(1,2741)	1:A:513:LEU:HD21	1:A:523:LYS:HE3	15	0.57
(1,2741)	1:A:513:LEU:HD22	1:A:523:LYS:HE3	15	0.57
(1,2741)	1:A:513:LEU:HD23	1:A:523:LYS:HE3	15	0.57
(1,2700)	1:A:509:GLY:H	1:A:510:LEU:HB3	11	0.57
(1,2684)	1:A:502:ASP:H	1:A:502:ASP:HB3	7	0.57
(1,2677)	1:A:498:GLN:HA	1:A:498:GLN:HG3	11	0.57

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2677)	1:A:498:GLN:HA	1:A:498:GLN:HG3	14	0.57
(1,2658)	1:A:493:GLU:HG3	1:A:494:SER:H	9	0.57
(1,2632)	1:A:491:PRO:HB3	1:A:494:SER:H	16	0.57
(1,2540)	1:A:475:SER:H	1:A:475:SER:HB3	19	0.57
(1,2532)	1:A:472:ALA:HB1	1:A:475:SER:HB3	19	0.57
(1,2532)	1:A:472:ALA:HB2	1:A:475:SER:HB3	19	0.57
(1,2532)	1:A:472:ALA:HB3	1:A:475:SER:HB3	19	0.57
(1,2529)	1:A:471:GLN:HG3	1:A:472:ALA:H	5	0.57
(1,2412)	1:A:446:ILE:HG13	1:A:473:MET:HE1	5	0.57
(1,2412)	1:A:446:ILE:HG13	1:A:473:MET:HE2	5	0.57
(1,2412)	1:A:446:ILE:HG13	1:A:473:MET:HE3	5	0.57
(1,2374)	1:A:438:GLU:H	1:A:438:GLU:HB3	2	0.57
(1,2367)	1:A:434:HIS:HB3	1:A:435:GLY:H	14	0.57
(1,2336)	1:A:423:ASP:HB3	1:A:424:GLY:H	9	0.57
(1,2265)	1:A:415:LYS:HE3	1:A:524:VAL:HG11	15	0.57
(1,2265)	1:A:415:LYS:HE3	1:A:524:VAL:HG12	15	0.57
(1,2265)	1:A:415:LYS:HE3	1:A:524:VAL:HG13	15	0.57
(1,2265)	1:A:415:LYS:HE3	1:A:524:VAL:HG21	15	0.57
(1,2265)	1:A:415:LYS:HE3	1:A:524:VAL:HG22	15	0.57
(1,2265)	1:A:415:LYS:HE3	1:A:524:VAL:HG23	15	0.57
(1,2255)	1:A:414:GLU:HB3	1:A:415:LYS:H	12	0.57
(1,2250)	1:A:414:GLU:H	1:A:414:GLU:HB3	12	0.57
(1,2250)	1:A:414:GLU:H	1:A:414:GLU:HB3	18	0.57
(1,2225)	1:A:408:ILE:HG21	1:A:493:GLU:HB3	9	0.57
(1,2225)	1:A:408:ILE:HG22	1:A:493:GLU:HB3	9	0.57
(1,2225)	1:A:408:ILE:HG23	1:A:493:GLU:HB3	9	0.57
(1,2225)	1:A:408:ILE:HG21	1:A:493:GLU:HB3	11	0.57
(1,2225)	1:A:408:ILE:HG22	1:A:493:GLU:HB3	11	0.57
(1,2225)	1:A:408:ILE:HG23	1:A:493:GLU:HB3	11	0.57
(1,2215)	1:A:406:GLU:HG3	1:A:409:ALA:H	18	0.57
(1,2196)	1:A:401:HIS:HE1	1:A:406:GLU:HB3	5	0.57
(1,2179)	1:A:398:VAL:HG11	1:A:449:SER:HB3	19	0.57
(1,2179)	1:A:398:VAL:HG12	1:A:449:SER:HB3	19	0.57
(1,2179)	1:A:398:VAL:HG13	1:A:449:SER:HB3	19	0.57
(1,2179)	1:A:398:VAL:HG21	1:A:449:SER:HB3	19	0.57
(1,2179)	1:A:398:VAL:HG22	1:A:449:SER:HB3	19	0.57
(1,2179)	1:A:398:VAL:HG23	1:A:449:SER:HB3	19	0.57
(1,2161)	1:A:397:PHE:HB3	1:A:398:VAL:H	17	0.57
(1,2129)	1:A:387:GLU:HB3	1:A:390:SER:H	18	0.57
(1,2074)	1:A:393:LYS:HD3	1:A:395:TYR:HE1	18	0.57
(1,2074)	1:A:393:LYS:HD3	1:A:395:TYR:HE2	18	0.57
(1,2021)	1:A:505:SER:HB3	1:A:506:LEU:HG	15	0.57

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1982)	1:A:413:ARG:HA	1:A:413:ARG:HD3	12	0.57
(1,1933)	1:A:523:LYS:HA	1:A:526:ASN:HB3	3	0.57
(1,1933)	1:A:523:LYS:HA	1:A:526:ASN:HB3	16	0.57
(1,1933)	1:A:523:LYS:HA	1:A:526:ASN:HB3	19	0.57
(1,1752)	1:A:512:ARG:HD3	1:A:512:ARG:HH22	20	0.57
(1,1730)	1:A:531:HIS:HD2	1:A:532:ARG:HD3	5	0.57
(1,1716)	1:A:529:LYS:HB3	1:A:529:LYS:HE3	4	0.57
(1,1716)	1:A:529:LYS:HB3	1:A:529:LYS:HE3	7	0.57
(1,1716)	1:A:529:LYS:HB3	1:A:529:LYS:HE3	17	0.57
(1,1710)	1:A:542:LYS:HA	1:A:542:LYS:HE3	16	0.57
(1,1706)	1:A:393:LYS:HE3	1:A:394:PHE:H	1	0.57
(1,1661)	1:A:518:GLN:HG3	1:A:519:ILE:HA	20	0.57
(1,1617)	1:A:415:LYS:H	1:A:415:LYS:HD3	17	0.57
(1,1549)	1:A:522:ARG:HG3	1:A:526:ASN:HD21	1	0.57
(1,1200)	1:A:532:ARG:HD3	1:A:535:ALA:HB1	12	0.57
(1,1200)	1:A:532:ARG:HD3	1:A:535:ALA:HB2	12	0.57
(1,1200)	1:A:532:ARG:HD3	1:A:535:ALA:HB3	12	0.57
(1,883)	1:A:523:LYS:HB3	1:A:524:VAL:H	9	0.56
(1,768)	1:A:537:LYS:H	1:A:537:LYS:HD3	2	0.56
(1,561)	1:A:543:GLU:HB3	1:A:545:ASP:H	7	0.56
(1,368)	1:A:389:SER:H	1:A:389:SER:HB3	5	0.56
(1,368)	1:A:389:SER:H	1:A:389:SER:HB3	17	0.56
(1,2848)	1:A:544:GLN:HG3	1:A:545:ASP:H	18	0.56
(1,2842)	1:A:544:GLN:H	1:A:544:GLN:HG3	13	0.56
(1,2834)	1:A:541:ARG:HA	1:A:541:ARG:HD3	5	0.56
(1,2799)	1:A:529:LYS:H	1:A:529:LYS:HB3	1	0.56
(1,2799)	1:A:529:LYS:H	1:A:529:LYS:HB3	4	0.56
(1,2799)	1:A:529:LYS:H	1:A:529:LYS:HB3	6	0.56
(1,2799)	1:A:529:LYS:H	1:A:529:LYS:HB3	18	0.56
(1,2783)	1:A:523:LYS:HG3	1:A:523:LYS:HE3	2	0.56
(1,2728)	1:A:513:LEU:HA	1:A:514:ASP:HB3	10	0.56
(1,2700)	1:A:509:GLY:H	1:A:510:LEU:HB3	7	0.56
(1,2697)	1:A:507:LEU:HB3	1:A:508:SER:H	1	0.56
(1,2697)	1:A:507:LEU:HB3	1:A:508:SER:H	10	0.56
(1,2697)	1:A:507:LEU:HB3	1:A:508:SER:H	12	0.56
(1,2697)	1:A:507:LEU:HB3	1:A:508:SER:H	15	0.56
(1,2697)	1:A:507:LEU:HB3	1:A:508:SER:H	16	0.56
(1,2685)	1:A:502:ASP:HB3	1:A:503:THR:H	20	0.56
(1,2684)	1:A:502:ASP:H	1:A:502:ASP:HB3	19	0.56
(1,2677)	1:A:498:GLN:HA	1:A:498:GLN:HG3	17	0.56
(1,2677)	1:A:498:GLN:HA	1:A:498:GLN:HG3	20	0.56
(1,2659)	1:A:494:SER:H	1:A:494:SER:HB3	17	0.56

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2641)	1:A:492:LEU:HB3	1:A:493:GLU:H	6	0.56
(1,2641)	1:A:492:LEU:HB3	1:A:493:GLU:H	14	0.56
(1,2621)	1:A:490:LEU:HD11	1:A:512:ARG:HD3	5	0.56
(1,2621)	1:A:490:LEU:HD12	1:A:512:ARG:HD3	5	0.56
(1,2621)	1:A:490:LEU:HD13	1:A:512:ARG:HD3	5	0.56
(1,2621)	1:A:490:LEU:HD21	1:A:512:ARG:HD3	5	0.56
(1,2621)	1:A:490:LEU:HD22	1:A:512:ARG:HD3	5	0.56
(1,2621)	1:A:490:LEU:HD23	1:A:512:ARG:HD3	5	0.56
(1,2611)	1:A:490:LEU:HG	1:A:494:SER:HB3	20	0.56
(1,2502)	1:A:467:HIS:HA	1:A:470:ASN:HB3	17	0.56
(1,2480)	1:A:463:ARG:HD3	1:A:506:LEU:HD21	16	0.56
(1,2480)	1:A:463:ARG:HD3	1:A:506:LEU:HD22	16	0.56
(1,2480)	1:A:463:ARG:HD3	1:A:506:LEU:HD23	16	0.56
(1,2478)	1:A:463:ARG:H	1:A:463:ARG:HD3	15	0.56
(1,2409)	1:A:446:ILE:HG21	1:A:473:MET:HG3	16	0.56
(1,2409)	1:A:446:ILE:HG22	1:A:473:MET:HG3	16	0.56
(1,2409)	1:A:446:ILE:HG23	1:A:473:MET:HG3	16	0.56
(1,2367)	1:A:434:HIS:HB3	1:A:435:GLY:H	15	0.56
(1,2357)	1:A:432:GLN:HB3	1:A:433:VAL:H	8	0.56
(1,2257)	1:A:415:LYS:H	1:A:415:LYS:HE3	5	0.56
(1,2250)	1:A:414:GLU:H	1:A:414:GLU:HB3	1	0.56
(1,2250)	1:A:414:GLU:H	1:A:414:GLU:HB3	2	0.56
(1,2250)	1:A:414:GLU:H	1:A:414:GLU:HB3	4	0.56
(1,2250)	1:A:414:GLU:H	1:A:414:GLU:HB3	6	0.56
(1,2250)	1:A:414:GLU:H	1:A:414:GLU:HB3	9	0.56
(1,2250)	1:A:414:GLU:H	1:A:414:GLU:HB3	20	0.56
(1,2225)	1:A:408:ILE:HG21	1:A:493:GLU:HB3	5	0.56
(1,2225)	1:A:408:ILE:HG22	1:A:493:GLU:HB3	5	0.56
(1,2225)	1:A:408:ILE:HG23	1:A:493:GLU:HB3	5	0.56
(1,2215)	1:A:406:GLU:HG3	1:A:409:ALA:H	17	0.56
(1,2215)	1:A:406:GLU:HG3	1:A:409:ALA:H	20	0.56
(1,2188)	1:A:400:LEU:HB3	1:A:401:HIS:H	2	0.56
(1,2157)	1:A:396:ASN:HB3	1:A:421:VAL:HG11	9	0.56
(1,2157)	1:A:396:ASN:HB3	1:A:421:VAL:HG12	9	0.56
(1,2157)	1:A:396:ASN:HB3	1:A:421:VAL:HG13	9	0.56
(1,2157)	1:A:396:ASN:HB3	1:A:421:VAL:HG21	9	0.56
(1,2157)	1:A:396:ASN:HB3	1:A:421:VAL:HG22	9	0.56
(1,2157)	1:A:396:ASN:HB3	1:A:421:VAL:HG23	9	0.56
(1,2128)	1:A:387:GLU:HB3	1:A:388:SER:H	6	0.56
(1,2126)	1:A:529:LYS:HE3	1:A:531:HIS:HE1	5	0.56
(1,2126)	1:A:529:LYS:HE3	1:A:531:HIS:HE1	18	0.56
(1,1933)	1:A:523:LYS:HA	1:A:526:ASN:HB3	10	0.56

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1715)	1:A:529:LYS:HG3	1:A:529:LYS:HE3	15	0.56
(1,1684)	1:A:523:LYS:HB3	1:A:526:ASN:HB3	16	0.56
(1,1684)	1:A:523:LYS:HB3	1:A:526:ASN:HB3	17	0.56
(1,1661)	1:A:518:GLN:HG3	1:A:519:ILE:HA	19	0.56
(1,165)	1:A:463:ARG:HB3	1:A:465:SER:H	7	0.56
(1,1625)	1:A:514:ASP:HA	1:A:515:GLU:HB3	13	0.56
(1,1605)	1:A:539:MET:HA	1:A:542:LYS:HD3	7	0.56
(1,1600)	1:A:393:LYS:H	1:A:393:LYS:HD3	10	0.56
(1,895)	1:A:420:GLY:HA2	1:A:421:VAL:H	7	0.55
(1,895)	1:A:420:GLY:HA2	1:A:421:VAL:H	11	0.55
(1,895)	1:A:420:GLY:HA2	1:A:421:VAL:H	13	0.55
(1,895)	1:A:420:GLY:HA2	1:A:421:VAL:H	14	0.55
(1,895)	1:A:420:GLY:HA2	1:A:421:VAL:H	18	0.55
(1,895)	1:A:420:GLY:HA2	1:A:421:VAL:H	19	0.55
(1,735)	1:A:410:LEU:HB3	1:A:411:ARG:H	6	0.55
(1,735)	1:A:410:LEU:HB3	1:A:411:ARG:H	10	0.55
(1,735)	1:A:410:LEU:HB3	1:A:411:ARG:H	18	0.55
(1,710)	1:A:466:LEU:HB3	1:A:469:VAL:H	11	0.55
(1,394)	1:A:536:ARG:H	1:A:536:ARG:HB3	13	0.55
(1,2799)	1:A:529:LYS:H	1:A:529:LYS:HB3	9	0.55
(1,2799)	1:A:529:LYS:H	1:A:529:LYS:HB3	10	0.55
(1,2799)	1:A:529:LYS:H	1:A:529:LYS:HB3	15	0.55
(1,2799)	1:A:529:LYS:H	1:A:529:LYS:HB3	16	0.55
(1,2799)	1:A:529:LYS:H	1:A:529:LYS:HB3	17	0.55
(1,2799)	1:A:529:LYS:H	1:A:529:LYS:HB3	20	0.55
(1,2728)	1:A:513:LEU:HA	1:A:514:ASP:HB3	16	0.55
(1,2697)	1:A:507:LEU:HB3	1:A:508:SER:H	19	0.55
(1,2687)	1:A:502:ASP:HB3	1:A:505:SER:HB3	18	0.55
(1,2684)	1:A:502:ASP:H	1:A:502:ASP:HB3	10	0.55
(1,2684)	1:A:502:ASP:H	1:A:502:ASP:HB3	15	0.55
(1,2677)	1:A:498:GLN:HA	1:A:498:GLN:HG3	1	0.55
(1,2677)	1:A:498:GLN:HA	1:A:498:GLN:HG3	13	0.55
(1,2659)	1:A:494:SER:H	1:A:494:SER:HB3	7	0.55
(1,2606)	1:A:490:LEU:H	1:A:513:LEU:HB3	5	0.55
(1,2561)	1:A:480:GLN:HB3	1:A:482:SER:H	14	0.55
(1,2560)	1:A:480:GLN:HB3	1:A:481:GLY:H	15	0.55
(1,2547)	1:A:476:ASN:HB3	1:A:480:GLN:H	6	0.55
(1,2529)	1:A:471:GLN:HG3	1:A:472:ALA:H	15	0.55
(1,25)	1:A:479:ARG:HG3	1:A:481:GLY:H	4	0.55
(1,2432)	1:A:453:ILE:HG13	1:A:454:LEU:H	16	0.55
(1,2412)	1:A:446:ILE:HG13	1:A:473:MET:HE1	16	0.55
(1,2412)	1:A:446:ILE:HG13	1:A:473:MET:HE2	16	0.55

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2412)	1:A:446:ILE:HG13	1:A:473:MET:HE3	16	0.55
(1,2377)	1:A:438:GLU:HB3	1:A:439:LEU:H	7	0.55
(1,2250)	1:A:414:GLU:H	1:A:414:GLU:HB3	10	0.55
(1,2250)	1:A:414:GLU:H	1:A:414:GLU:HB3	15	0.55
(1,2238)	1:A:411:ARG:H	1:A:411:ARG:HB3	1	0.55
(1,2215)	1:A:406:GLU:HG3	1:A:409:ALA:H	3	0.55
(1,2196)	1:A:401:HIS:HE1	1:A:406:GLU:HB3	3	0.55
(1,2196)	1:A:401:HIS:HE1	1:A:406:GLU:HB3	18	0.55
(1,2145)	1:A:393:LYS:HG3	1:A:393:LYS:HE3	15	0.55
(1,2126)	1:A:529:LYS:HE3	1:A:531:HIS:HE1	9	0.55
(1,1791)	1:A:538:ALA:HA	1:A:541:ARG:HB3	2	0.55
(1,1752)	1:A:512:ARG:HD3	1:A:512:ARG:HH22	16	0.55
(1,175)	1:A:474:MET:HB3	1:A:475:SER:H	8	0.55
(1,1684)	1:A:523:LYS:HB3	1:A:526:ASN:HB3	10	0.55
(1,1676)	1:A:416:LEU:HG	1:A:417:GLU:HG3	8	0.55
(1,1638)	1:A:539:MET:HA	1:A:542:LYS:HB3	12	0.55
(1,1598)	1:A:393:LYS:HA	1:A:393:LYS:HD3	20	0.55
(1,1188)	1:A:538:ALA:HB1	1:A:539:MET:HB3	14	0.55
(1,1188)	1:A:538:ALA:HB2	1:A:539:MET:HB3	14	0.55
(1,1188)	1:A:538:ALA:HB3	1:A:539:MET:HB3	14	0.55
(1,945)	1:A:462:CYS:H	1:A:463:ARG:HB3	3	0.54
(1,945)	1:A:462:CYS:H	1:A:463:ARG:HB3	9	0.54
(1,945)	1:A:462:CYS:H	1:A:463:ARG:HB3	14	0.54
(1,895)	1:A:420:GLY:HA2	1:A:421:VAL:H	2	0.54
(1,895)	1:A:420:GLY:HA2	1:A:421:VAL:H	3	0.54
(1,895)	1:A:420:GLY:HA2	1:A:421:VAL:H	4	0.54
(1,895)	1:A:420:GLY:HA2	1:A:421:VAL:H	5	0.54
(1,895)	1:A:420:GLY:HA2	1:A:421:VAL:H	6	0.54
(1,895)	1:A:420:GLY:HA2	1:A:421:VAL:H	8	0.54
(1,895)	1:A:420:GLY:HA2	1:A:421:VAL:H	9	0.54
(1,895)	1:A:420:GLY:HA2	1:A:421:VAL:H	12	0.54
(1,895)	1:A:420:GLY:HA2	1:A:421:VAL:H	16	0.54
(1,895)	1:A:420:GLY:HA2	1:A:421:VAL:H	20	0.54
(1,883)	1:A:523:LYS:HB3	1:A:524:VAL:H	3	0.54
(1,790)	1:A:540:TRP:H	1:A:540:TRP:HB3	14	0.54
(1,600)	1:A:403:ARG:HB3	1:A:403:ARG:HE	12	0.54
(1,543)	1:A:462:CYS:HB3	1:A:463:ARG:H	11	0.54
(1,524)	1:A:529:LYS:H	1:A:532:ARG:HD3	19	0.54
(1,2848)	1:A:544:GLN:HG3	1:A:545:ASP:H	12	0.54
(1,2844)	1:A:544:GLN:HA	1:A:544:GLN:HG3	7	0.54
(1,2844)	1:A:544:GLN:HA	1:A:544:GLN:HG3	9	0.54
(1,2844)	1:A:544:GLN:HA	1:A:544:GLN:HG3	10	0.54

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2844)	1:A:544:GLN:HA	1:A:544:GLN:HG3	18	0.54
(1,2842)	1:A:544:GLN:H	1:A:544:GLN:HG3	18	0.54
(1,2837)	1:A:542:LYS:HA	1:A:542:LYS:HG3	16	0.54
(1,2799)	1:A:529:LYS:H	1:A:529:LYS:HB3	2	0.54
(1,2783)	1:A:523:LYS:HG3	1:A:523:LYS:HE3	9	0.54
(1,2728)	1:A:513:LEU:HA	1:A:514:ASP:HB3	17	0.54
(1,2728)	1:A:513:LEU:HA	1:A:514:ASP:HB3	19	0.54
(1,2714)	1:A:511:VAL:HG11	1:A:513:LEU:HB3	15	0.54
(1,2714)	1:A:511:VAL:HG12	1:A:513:LEU:HB3	15	0.54
(1,2714)	1:A:511:VAL:HG13	1:A:513:LEU:HB3	15	0.54
(1,2714)	1:A:511:VAL:HG21	1:A:513:LEU:HB3	15	0.54
(1,2714)	1:A:511:VAL:HG22	1:A:513:LEU:HB3	15	0.54
(1,2714)	1:A:511:VAL:HG23	1:A:513:LEU:HB3	15	0.54
(1,2700)	1:A:509:GLY:H	1:A:510:LEU:HB3	10	0.54
(1,266)	1:A:481:GLY:HA3	1:A:482:SER:H	2	0.54
(1,266)	1:A:481:GLY:HA3	1:A:482:SER:H	3	0.54
(1,266)	1:A:481:GLY:HA3	1:A:482:SER:H	4	0.54
(1,266)	1:A:481:GLY:HA3	1:A:482:SER:H	5	0.54
(1,266)	1:A:481:GLY:HA3	1:A:482:SER:H	6	0.54
(1,266)	1:A:481:GLY:HA3	1:A:482:SER:H	9	0.54
(1,266)	1:A:481:GLY:HA3	1:A:482:SER:H	10	0.54
(1,266)	1:A:481:GLY:HA3	1:A:482:SER:H	14	0.54
(1,266)	1:A:481:GLY:HA3	1:A:482:SER:H	15	0.54
(1,266)	1:A:481:GLY:HA3	1:A:482:SER:H	19	0.54
(1,266)	1:A:481:GLY:HA3	1:A:482:SER:H	20	0.54
(1,2638)	1:A:492:LEU:H	1:A:515:GLU:HG3	8	0.54
(1,2634)	1:A:491:PRO:HG3	1:A:494:SER:H	7	0.54
(1,258)	1:A:482:SER:HB3	1:A:484:ASP:H	5	0.54
(1,2553)	1:A:479:ARG:H	1:A:479:ARG:HB3	19	0.54
(1,2540)	1:A:475:SER:H	1:A:475:SER:HB3	4	0.54
(1,2508)	1:A:468:GLN:HA	1:A:468:GLN:HG3	11	0.54
(1,2412)	1:A:446:ILE:HG13	1:A:473:MET:HE1	19	0.54
(1,2412)	1:A:446:ILE:HG13	1:A:473:MET:HE2	19	0.54
(1,2412)	1:A:446:ILE:HG13	1:A:473:MET:HE3	19	0.54
(1,2385)	1:A:439:LEU:HD11	1:A:444:ASP:HB3	18	0.54
(1,2385)	1:A:439:LEU:HD12	1:A:444:ASP:HB3	18	0.54
(1,2385)	1:A:439:LEU:HD13	1:A:444:ASP:HB3	18	0.54
(1,2385)	1:A:439:LEU:HD21	1:A:444:ASP:HB3	18	0.54
(1,2385)	1:A:439:LEU:HD22	1:A:444:ASP:HB3	18	0.54
(1,2385)	1:A:439:LEU:HD23	1:A:444:ASP:HB3	18	0.54
(1,2342)	1:A:429:GLU:H	1:A:429:GLU:HG3	3	0.54
(1,2257)	1:A:415:LYS:H	1:A:415:LYS:HE3	4	0.54

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2257)	1:A:415:LYS:H	1:A:415:LYS:HE3	13	0.54
(1,2250)	1:A:414:GLU:H	1:A:414:GLU:HB3	13	0.54
(1,2250)	1:A:414:GLU:H	1:A:414:GLU:HB3	14	0.54
(1,2226)	1:A:408:ILE:HG21	1:A:494:SER:HB3	7	0.54
(1,2226)	1:A:408:ILE:HG22	1:A:494:SER:HB3	7	0.54
(1,2226)	1:A:408:ILE:HG23	1:A:494:SER:HB3	7	0.54
(1,2215)	1:A:406:GLU:HG3	1:A:409:ALA:H	13	0.54
(1,2214)	1:A:406:GLU:HG3	1:A:407:HIS:HA	20	0.54
(1,2196)	1:A:401:HIS:HE1	1:A:406:GLU:HB3	7	0.54
(1,2161)	1:A:397:PHE:HB3	1:A:398:VAL:H	20	0.54
(1,2134)	1:A:392:GLN:H	1:A:392:GLN:HG3	5	0.54
(1,2027)	1:A:389:SER:HB3	1:A:390:SER:H	10	0.54
(1,2027)	1:A:389:SER:HB3	1:A:390:SER:H	16	0.54
(1,1982)	1:A:413:ARG:HA	1:A:413:ARG:HD3	13	0.54
(1,1933)	1:A:523:LYS:HA	1:A:526:ASN:HB3	8	0.54
(1,1881)	1:A:536:ARG:HA	1:A:536:ARG:HD3	17	0.54
(1,1752)	1:A:512:ARG:HD3	1:A:512:ARG:HH22	6	0.54
(1,1752)	1:A:512:ARG:HD3	1:A:512:ARG:HH22	15	0.54
(1,175)	1:A:474:MET:HB3	1:A:475:SER:H	15	0.54
(1,1716)	1:A:529:LYS:HB3	1:A:529:LYS:HE3	8	0.54
(1,1716)	1:A:529:LYS:HB3	1:A:529:LYS:HE3	18	0.54
(1,1684)	1:A:523:LYS:HB3	1:A:526:ASN:HB3	3	0.54
(1,1656)	1:A:432:GLN:HG3	1:A:433:VAL:H	20	0.54
(1,1616)	1:A:415:LYS:HD3	1:A:520:PHE:HE1	17	0.54
(1,1616)	1:A:415:LYS:HD3	1:A:520:PHE:HE2	17	0.54
(1,1611)	1:A:537:LYS:HD3	1:A:538:ALA:H	5	0.54
(1,1605)	1:A:539:MET:HA	1:A:542:LYS:HD3	9	0.54
(1,1576)	1:A:462:CYS:HB3	1:A:506:LEU:HD11	18	0.54
(1,1576)	1:A:462:CYS:HB3	1:A:506:LEU:HD12	18	0.54
(1,1576)	1:A:462:CYS:HB3	1:A:506:LEU:HD13	18	0.54
(1,1010)	1:A:454:LEU:HB3	1:A:489:PHE:H	20	0.54
(1,895)	1:A:420:GLY:HA2	1:A:421:VAL:H	1	0.53
(1,895)	1:A:420:GLY:HA2	1:A:421:VAL:H	10	0.53
(1,895)	1:A:420:GLY:HA2	1:A:421:VAL:H	15	0.53
(1,811)	1:A:391:GLU:H	1:A:391:GLU:HG3	4	0.53
(1,786)	1:A:471:GLN:HB3	1:A:472:ALA:H	9	0.53
(1,676)	1:A:436:ARG:H	1:A:436:ARG:HG3	17	0.53
(1,368)	1:A:389:SER:H	1:A:389:SER:HB3	9	0.53
(1,2842)	1:A:544:GLN:H	1:A:544:GLN:HG3	10	0.53
(1,2799)	1:A:529:LYS:H	1:A:529:LYS:HB3	8	0.53
(1,2799)	1:A:529:LYS:H	1:A:529:LYS:HB3	12	0.53
(1,2783)	1:A:523:LYS:HG3	1:A:523:LYS:HE3	11	0.53

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2728)	1:A:513:LEU:HA	1:A:514:ASP:HB3	8	0.53
(1,2728)	1:A:513:LEU:HA	1:A:514:ASP:HB3	14	0.53
(1,2687)	1:A:502:ASP:HB3	1:A:505:SER:HB3	15	0.53
(1,2677)	1:A:498:GLN:HA	1:A:498:GLN:HG3	12	0.53
(1,266)	1:A:481:GLY:HA3	1:A:482:SER:H	13	0.53
(1,266)	1:A:481:GLY:HA3	1:A:482:SER:H	16	0.53
(1,266)	1:A:481:GLY:HA3	1:A:482:SER:H	17	0.53
(1,266)	1:A:481:GLY:HA3	1:A:482:SER:H	18	0.53
(1,2659)	1:A:494:SER:H	1:A:494:SER:HB3	5	0.53
(1,2659)	1:A:494:SER:H	1:A:494:SER:HB3	10	0.53
(1,2659)	1:A:494:SER:H	1:A:494:SER:HB3	14	0.53
(1,2575)	1:A:484:ASP:HB3	1:A:485:CYS:H	12	0.53
(1,2553)	1:A:479:ARG:H	1:A:479:ARG:HB3	11	0.53
(1,25)	1:A:479:ARG:HG3	1:A:481:GLY:H	20	0.53
(1,2412)	1:A:446:ILE:HG13	1:A:473:MET:HE1	15	0.53
(1,2412)	1:A:446:ILE:HG13	1:A:473:MET:HE2	15	0.53
(1,2412)	1:A:446:ILE:HG13	1:A:473:MET:HE3	15	0.53
(1,2377)	1:A:438:GLU:HB3	1:A:439:LEU:H	14	0.53
(1,2374)	1:A:438:GLU:H	1:A:438:GLU:HB3	11	0.53
(1,2373)	1:A:436:ARG:HB3	1:A:436:ARG:HE	3	0.53
(1,2264)	1:A:415:LYS:HE3	1:A:521:ALA:HB1	7	0.53
(1,2264)	1:A:415:LYS:HE3	1:A:521:ALA:HB2	7	0.53
(1,2264)	1:A:415:LYS:HE3	1:A:521:ALA:HB3	7	0.53
(1,2264)	1:A:415:LYS:HE3	1:A:521:ALA:HB1	10	0.53
(1,2264)	1:A:415:LYS:HE3	1:A:521:ALA:HB2	10	0.53
(1,2264)	1:A:415:LYS:HE3	1:A:521:ALA:HB3	10	0.53
(1,2250)	1:A:414:GLU:H	1:A:414:GLU:HB3	5	0.53
(1,2250)	1:A:414:GLU:H	1:A:414:GLU:HB3	19	0.53
(1,2202)	1:A:405:ASP:HB3	1:A:406:GLU:H	6	0.53
(1,2161)	1:A:397:PHE:HB3	1:A:398:VAL:H	5	0.53
(1,2134)	1:A:392:GLN:H	1:A:392:GLN:HG3	17	0.53
(1,1988)	1:A:403:ARG:HA	1:A:403:ARG:HD3	18	0.53
(1,1933)	1:A:523:LYS:HA	1:A:526:ASN:HB3	2	0.53
(1,1752)	1:A:512:ARG:HD3	1:A:512:ARG:HH22	4	0.53
(1,1752)	1:A:512:ARG:HD3	1:A:512:ARG:HH22	9	0.53
(1,1752)	1:A:512:ARG:HD3	1:A:512:ARG:HH22	10	0.53
(1,1752)	1:A:512:ARG:HD3	1:A:512:ARG:HH22	12	0.53
(1,1752)	1:A:512:ARG:HD3	1:A:512:ARG:HH22	13	0.53
(1,1752)	1:A:512:ARG:HD3	1:A:512:ARG:HH22	19	0.53
(1,1684)	1:A:523:LYS:HB3	1:A:526:ASN:HB3	8	0.53
(1,1670)	1:A:438:GLU:HA	1:A:438:GLU:HG3	17	0.53
(1,1609)	1:A:394:PHE:HD1	1:A:537:LYS:HD3	4	0.53

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1609)	1:A:394:PHE:HD2	1:A:537:LYS:HD3	4	0.53
(1,1571)	1:A:479:ARG:H	1:A:479:ARG:HG3	2	0.53
(1,1571)	1:A:479:ARG:H	1:A:479:ARG:HG3	3	0.53
(1,146)	1:A:508:SER:HB3	1:A:509:GLY:H	20	0.53
(1,138)	1:A:526:ASN:H	1:A:526:ASN:HB3	19	0.53
(1,910)	1:A:417:GLU:HG3	1:A:418:ALA:H	16	0.52
(1,895)	1:A:420:GLY:HA2	1:A:421:VAL:H	17	0.52
(1,883)	1:A:523:LYS:HB3	1:A:524:VAL:H	11	0.52
(1,812)	1:A:390:SER:HB3	1:A:391:GLU:H	5	0.52
(1,811)	1:A:391:GLU:H	1:A:391:GLU:HG3	8	0.52
(1,811)	1:A:391:GLU:H	1:A:391:GLU:HG3	16	0.52
(1,790)	1:A:540:TRP:H	1:A:540:TRP:HB3	1	0.52
(1,523)	1:A:529:LYS:H	1:A:529:LYS:HE3	9	0.52
(1,449)	1:A:543:GLU:HB3	1:A:544:GLN:H	12	0.52
(1,2844)	1:A:544:GLN:HA	1:A:544:GLN:HG3	1	0.52
(1,2844)	1:A:544:GLN:HA	1:A:544:GLN:HG3	12	0.52
(1,2844)	1:A:544:GLN:HA	1:A:544:GLN:HG3	13	0.52
(1,2842)	1:A:544:GLN:H	1:A:544:GLN:HG3	9	0.52
(1,2829)	1:A:538:ALA:HB1	1:A:539:MET:HG3	4	0.52
(1,2829)	1:A:538:ALA:HB2	1:A:539:MET:HG3	4	0.52
(1,2829)	1:A:538:ALA:HB3	1:A:539:MET:HG3	4	0.52
(1,2827)	1:A:537:LYS:HG3	1:A:537:LYS:HE3	20	0.52
(1,2813)	1:A:532:ARG:HA	1:A:532:ARG:HG3	11	0.52
(1,2808)	1:A:529:LYS:HB3	1:A:531:HIS:HE1	19	0.52
(1,2796)	1:A:527:THR:HA	1:A:529:LYS:HD3	10	0.52
(1,2783)	1:A:523:LYS:HG3	1:A:523:LYS:HE3	1	0.52
(1,2783)	1:A:523:LYS:HG3	1:A:523:LYS:HE3	19	0.52
(1,2728)	1:A:513:LEU:HA	1:A:514:ASP:HB3	6	0.52
(1,2700)	1:A:509:GLY:H	1:A:510:LEU:HB3	18	0.52
(1,2677)	1:A:498:GLN:HA	1:A:498:GLN:HG3	18	0.52
(1,266)	1:A:481:GLY:HA3	1:A:482:SER:H	1	0.52
(1,266)	1:A:481:GLY:HA3	1:A:482:SER:H	12	0.52
(1,2659)	1:A:494:SER:H	1:A:494:SER:HB3	6	0.52
(1,2659)	1:A:494:SER:H	1:A:494:SER:HB3	8	0.52
(1,2659)	1:A:494:SER:H	1:A:494:SER:HB3	16	0.52
(1,2659)	1:A:494:SER:H	1:A:494:SER:HB3	20	0.52
(1,2575)	1:A:484:ASP:HB3	1:A:485:CYS:H	3	0.52
(1,2575)	1:A:484:ASP:HB3	1:A:485:CYS:H	18	0.52
(1,2547)	1:A:476:ASN:HB3	1:A:480:GLN:H	15	0.52
(1,25)	1:A:479:ARG:HG3	1:A:481:GLY:H	5	0.52
(1,2479)	1:A:463:ARG:HD3	1:A:464:LEU:H	9	0.52
(1,2412)	1:A:446:ILE:HG13	1:A:473:MET:HE1	13	0.52

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2412)	1:A:446:ILE:HG13	1:A:473:MET:HE2	13	0.52
(1,2412)	1:A:446:ILE:HG13	1:A:473:MET:HE3	13	0.52
(1,2389)	1:A:442:LEU:HD11	1:A:443:GLN:HG3	1	0.52
(1,2389)	1:A:442:LEU:HD12	1:A:443:GLN:HG3	1	0.52
(1,2389)	1:A:442:LEU:HD13	1:A:443:GLN:HG3	1	0.52
(1,2389)	1:A:442:LEU:HD21	1:A:443:GLN:HG3	1	0.52
(1,2389)	1:A:442:LEU:HD22	1:A:443:GLN:HG3	1	0.52
(1,2389)	1:A:442:LEU:HD23	1:A:443:GLN:HG3	1	0.52
(1,2374)	1:A:438:GLU:H	1:A:438:GLU:HB3	19	0.52
(1,2263)	1:A:415:LYS:HE3	1:A:520:PHE:HZ	7	0.52
(1,2263)	1:A:415:LYS:HE3	1:A:520:PHE:HZ	20	0.52
(1,2255)	1:A:414:GLU:HB3	1:A:415:LYS:H	1	0.52
(1,2253)	1:A:414:GLU:HA	1:A:414:GLU:HG3	17	0.52
(1,2241)	1:A:411:ARG:HA	1:A:411:ARG:HD3	19	0.52
(1,2239)	1:A:411:ARG:H	1:A:411:ARG:HD3	3	0.52
(1,2225)	1:A:408:ILE:HG21	1:A:493:GLU:HB3	2	0.52
(1,2225)	1:A:408:ILE:HG22	1:A:493:GLU:HB3	2	0.52
(1,2225)	1:A:408:ILE:HG23	1:A:493:GLU:HB3	2	0.52
(1,2214)	1:A:406:GLU:HG3	1:A:407:HIS:HA	9	0.52
(1,2161)	1:A:397:PHE:HB3	1:A:398:VAL:H	10	0.52
(1,2161)	1:A:397:PHE:HB3	1:A:398:VAL:H	12	0.52
(1,2145)	1:A:393:LYS:HG3	1:A:393:LYS:HE3	7	0.52
(1,2134)	1:A:392:GLN:H	1:A:392:GLN:HG3	16	0.52
(1,2027)	1:A:389:SER:HB3	1:A:390:SER:H	14	0.52
(1,1899)	1:A:540:TRP:HB3	1:A:541:ARG:HA	5	0.52
(1,1716)	1:A:529:LYS:HB3	1:A:529:LYS:HE3	5	0.52
(1,1706)	1:A:393:LYS:HE3	1:A:394:PHE:H	4	0.52
(1,1576)	1:A:462:CYS:HB3	1:A:506:LEU:HD11	14	0.52
(1,1576)	1:A:462:CYS:HB3	1:A:506:LEU:HD12	14	0.52
(1,1576)	1:A:462:CYS:HB3	1:A:506:LEU:HD13	14	0.52
(1,1549)	1:A:522:ARG:HG3	1:A:526:ASN:HD21	13	0.52
(1,1473)	1:A:466:LEU:HB3	1:A:466:LEU:HD11	10	0.52
(1,1473)	1:A:466:LEU:HB3	1:A:466:LEU:HD12	10	0.52
(1,1473)	1:A:466:LEU:HB3	1:A:466:LEU:HD13	10	0.52
(1,108)	1:A:526:ASN:HD21	1:A:529:LYS:HE3	10	0.52
(1,108)	1:A:526:ASN:HD22	1:A:529:LYS:HE3	10	0.52
(1,98)	1:A:417:GLU:HG3	1:A:423:ASP:H	11	0.51
(1,883)	1:A:523:LYS:HB3	1:A:524:VAL:H	14	0.51
(1,818)	1:A:505:SER:HB3	1:A:506:LEU:H	4	0.51
(1,811)	1:A:391:GLU:H	1:A:391:GLU:HG3	6	0.51
(1,811)	1:A:391:GLU:H	1:A:391:GLU:HG3	14	0.51
(1,790)	1:A:540:TRP:H	1:A:540:TRP:HB3	17	0.51

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,786)	1:A:471:GLN:HB3	1:A:472:ALA:H	3	0.51
(1,786)	1:A:471:GLN:HB3	1:A:472:ALA:H	12	0.51
(1,756)	1:A:479:ARG:H	1:A:479:ARG:HD3	9	0.51
(1,735)	1:A:410:LEU:HB3	1:A:411:ARG:H	15	0.51
(1,676)	1:A:436:ARG:H	1:A:436:ARG:HG3	18	0.51
(1,561)	1:A:543:GLU:HB3	1:A:545:ASP:H	1	0.51
(1,554)	1:A:542:LYS:H	1:A:542:LYS:HB3	15	0.51
(1,523)	1:A:529:LYS:H	1:A:529:LYS:HE3	8	0.51
(1,394)	1:A:536:ARG:H	1:A:536:ARG:HB3	6	0.51
(1,2835)	1:A:541:ARG:HB3	1:A:541:ARG:HD3	10	0.51
(1,2813)	1:A:532:ARG:HA	1:A:532:ARG:HG3	14	0.51
(1,2796)	1:A:527:THR:HA	1:A:529:LYS:HD3	19	0.51
(1,2783)	1:A:523:LYS:HG3	1:A:523:LYS:HE3	12	0.51
(1,2783)	1:A:523:LYS:HG3	1:A:523:LYS:HE3	15	0.51
(1,2728)	1:A:513:LEU:HA	1:A:514:ASP:HB3	4	0.51
(1,2700)	1:A:509:GLY:H	1:A:510:LEU:HB3	3	0.51
(1,2700)	1:A:509:GLY:H	1:A:510:LEU:HB3	8	0.51
(1,2677)	1:A:498:GLN:HA	1:A:498:GLN:HG3	19	0.51
(1,2659)	1:A:494:SER:H	1:A:494:SER:HB3	3	0.51
(1,2659)	1:A:494:SER:H	1:A:494:SER:HB3	13	0.51
(1,2553)	1:A:479:ARG:H	1:A:479:ARG:HB3	2	0.51
(1,2526)	1:A:471:GLN:HB3	1:A:471:GLN:HG3	19	0.51
(1,2502)	1:A:467:HIS:HA	1:A:470:ASN:HB3	3	0.51
(1,2502)	1:A:467:HIS:HA	1:A:470:ASN:HB3	6	0.51
(1,2473)	1:A:458:SER:HB3	1:A:459:ASN:HA	5	0.51
(1,2412)	1:A:446:ILE:HG13	1:A:473:MET:HE1	9	0.51
(1,2412)	1:A:446:ILE:HG13	1:A:473:MET:HE2	9	0.51
(1,2412)	1:A:446:ILE:HG13	1:A:473:MET:HE3	9	0.51
(1,2400)	1:A:443:GLN:HG3	1:A:444:ASP:H	18	0.51
(1,2374)	1:A:438:GLU:H	1:A:438:GLU:HB3	14	0.51
(1,2374)	1:A:438:GLU:H	1:A:438:GLU:HB3	16	0.51
(1,2372)	1:A:436:ARG:HB3	1:A:436:ARG:HD3	8	0.51
(1,2255)	1:A:414:GLU:HB3	1:A:415:LYS:H	10	0.51
(1,2253)	1:A:414:GLU:HA	1:A:414:GLU:HG3	3	0.51
(1,2253)	1:A:414:GLU:HA	1:A:414:GLU:HG3	15	0.51
(1,2250)	1:A:414:GLU:H	1:A:414:GLU:HB3	16	0.51
(1,2225)	1:A:408:ILE:HG21	1:A:493:GLU:HB3	18	0.51
(1,2225)	1:A:408:ILE:HG22	1:A:493:GLU:HB3	18	0.51
(1,2225)	1:A:408:ILE:HG23	1:A:493:GLU:HB3	18	0.51
(1,2179)	1:A:398:VAL:HG11	1:A:449:SER:HB3	8	0.51
(1,2179)	1:A:398:VAL:HG12	1:A:449:SER:HB3	8	0.51
(1,2179)	1:A:398:VAL:HG13	1:A:449:SER:HB3	8	0.51

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2179)	1:A:398:VAL:HG21	1:A:449:SER:HB3	8	0.51
(1,2179)	1:A:398:VAL:HG22	1:A:449:SER:HB3	8	0.51
(1,2179)	1:A:398:VAL:HG23	1:A:449:SER:HB3	8	0.51
(1,2145)	1:A:393:LYS:HG3	1:A:393:LYS:HE3	19	0.51
(1,1933)	1:A:523:LYS:HA	1:A:526:ASN:HB3	11	0.51
(1,175)	1:A:474:MET:HB3	1:A:475:SER:H	6	0.51
(1,1731)	1:A:532:ARG:HD3	1:A:533:LEU:H	1	0.51
(1,1684)	1:A:523:LYS:HB3	1:A:526:ASN:HB3	2	0.51
(1,1684)	1:A:523:LYS:HB3	1:A:526:ASN:HB3	13	0.51
(1,1655)	1:A:432:GLN:HA	1:A:432:GLN:HG3	4	0.51
(1,1655)	1:A:432:GLN:HA	1:A:432:GLN:HG3	8	0.51
(1,1655)	1:A:432:GLN:HA	1:A:432:GLN:HG3	18	0.51
(1,1617)	1:A:415:LYS:H	1:A:415:LYS:HD3	15	0.51
(1,1203)	1:A:471:GLN:HB3	1:A:472:ALA:HB1	15	0.51
(1,1203)	1:A:471:GLN:HB3	1:A:472:ALA:HB2	15	0.51
(1,1203)	1:A:471:GLN:HB3	1:A:472:ALA:HB3	15	0.51
(1,1203)	1:A:471:GLN:HB3	1:A:472:ALA:HB1	19	0.51
(1,1203)	1:A:471:GLN:HB3	1:A:472:ALA:HB2	19	0.51
(1,1203)	1:A:471:GLN:HB3	1:A:472:ALA:HB3	19	0.51
(1,1136)	1:A:473:MET:HE1	1:A:482:SER:HB3	9	0.51
(1,1136)	1:A:473:MET:HE2	1:A:482:SER:HB3	9	0.51
(1,1136)	1:A:473:MET:HE3	1:A:482:SER:HB3	9	0.51
(1,883)	1:A:523:LYS:HB3	1:A:524:VAL:H	2	0.5
(1,883)	1:A:523:LYS:HB3	1:A:524:VAL:H	16	0.5
(1,790)	1:A:540:TRP:H	1:A:540:TRP:HB3	15	0.5
(1,789)	1:A:539:MET:HB3	1:A:540:TRP:H	16	0.5
(1,68)	1:A:518:GLN:HG3	1:A:519:ILE:H	17	0.5
(1,54)	1:A:436:ARG:HD3	1:A:437:GLY:H	9	0.5
(1,524)	1:A:529:LYS:H	1:A:532:ARG:HD3	12	0.5
(1,511)	1:A:403:ARG:HD3	1:A:404:ALA:H	15	0.5
(1,454)	1:A:496:PRO:HG3	1:A:497:ALA:H	15	0.5
(1,449)	1:A:543:GLU:HB3	1:A:544:GLN:H	5	0.5
(1,394)	1:A:536:ARG:H	1:A:536:ARG:HB3	4	0.5
(1,394)	1:A:536:ARG:H	1:A:536:ARG:HB3	10	0.5
(1,2844)	1:A:544:GLN:HA	1:A:544:GLN:HG3	17	0.5
(1,2841)	1:A:543:GLU:HB3	1:A:544:GLN:HE21	3	0.5
(1,2841)	1:A:543:GLU:HB3	1:A:544:GLN:HE22	3	0.5
(1,2800)	1:A:529:LYS:H	1:A:529:LYS:HD3	4	0.5
(1,2728)	1:A:513:LEU:HA	1:A:514:ASP:HB3	3	0.5
(1,2728)	1:A:513:LEU:HA	1:A:514:ASP:HB3	11	0.5
(1,2685)	1:A:502:ASP:HB3	1:A:503:THR:H	6	0.5
(1,2677)	1:A:498:GLN:HA	1:A:498:GLN:HG3	4	0.5

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,266)	1:A:481:GLY:HA3	1:A:482:SER:H	11	0.5
(1,2659)	1:A:494:SER:H	1:A:494:SER:HB3	2	0.5
(1,2659)	1:A:494:SER:H	1:A:494:SER:HB3	11	0.5
(1,2659)	1:A:494:SER:H	1:A:494:SER:HB3	19	0.5
(1,2571)	1:A:484:ASP:H	1:A:484:ASP:HB3	19	0.5
(1,2569)	1:A:483:PRO:HB3	1:A:485:CYS:H	14	0.5
(1,2560)	1:A:480:GLN:HB3	1:A:481:GLY:H	6	0.5
(1,2553)	1:A:479:ARG:H	1:A:479:ARG:HB3	4	0.5
(1,2553)	1:A:479:ARG:H	1:A:479:ARG:HB3	12	0.5
(1,2529)	1:A:471:GLN:HG3	1:A:472:ALA:H	20	0.5
(1,2502)	1:A:467:HIS:HA	1:A:470:ASN:HB3	13	0.5
(1,2499)	1:A:466:LEU:HD11	1:A:467:HIS:HB3	11	0.5
(1,2499)	1:A:466:LEU:HD12	1:A:467:HIS:HB3	11	0.5
(1,2499)	1:A:466:LEU:HD13	1:A:467:HIS:HB3	11	0.5
(1,2499)	1:A:466:LEU:HD21	1:A:467:HIS:HB3	11	0.5
(1,2499)	1:A:466:LEU:HD22	1:A:467:HIS:HB3	11	0.5
(1,2499)	1:A:466:LEU:HD23	1:A:467:HIS:HB3	11	0.5
(1,2482)	1:A:464:LEU:HA	1:A:467:HIS:HB3	18	0.5
(1,2374)	1:A:438:GLU:H	1:A:438:GLU:HB3	9	0.5
(1,2367)	1:A:434:HIS:HB3	1:A:435:GLY:H	9	0.5
(1,2367)	1:A:434:HIS:HB3	1:A:435:GLY:H	13	0.5
(1,2352)	1:A:431:PHE:HB3	1:A:432:GLN:H	9	0.5
(1,2352)	1:A:431:PHE:HB3	1:A:432:GLN:H	15	0.5
(1,2344)	1:A:430:ASP:H	1:A:430:ASP:HB3	19	0.5
(1,2251)	1:A:414:GLU:H	1:A:414:GLU:HG3	19	0.5
(1,2241)	1:A:411:ARG:HA	1:A:411:ARG:HD3	20	0.5
(1,2225)	1:A:408:ILE:HG21	1:A:493:GLU:HB3	19	0.5
(1,2225)	1:A:408:ILE:HG22	1:A:493:GLU:HB3	19	0.5
(1,2225)	1:A:408:ILE:HG23	1:A:493:GLU:HB3	19	0.5
(1,2196)	1:A:401:HIS:HE1	1:A:406:GLU:HB3	8	0.5
(1,2196)	1:A:401:HIS:HE1	1:A:406:GLU:HB3	9	0.5
(1,2145)	1:A:393:LYS:HG3	1:A:393:LYS:HE3	18	0.5
(1,2122)	1:A:529:LYS:HG3	1:A:531:HIS:HE1	12	0.5
(1,1933)	1:A:523:LYS:HA	1:A:526:ASN:HB3	9	0.5
(1,1716)	1:A:529:LYS:HB3	1:A:529:LYS:HE3	1	0.5
(1,1709)	1:A:542:LYS:HB3	1:A:542:LYS:HE3	19	0.5
(1,1707)	1:A:542:LYS:HG3	1:A:542:LYS:HE3	14	0.5
(1,1684)	1:A:523:LYS:HB3	1:A:526:ASN:HB3	11	0.5
(1,1670)	1:A:438:GLU:HA	1:A:438:GLU:HG3	7	0.5
(1,1670)	1:A:438:GLU:HA	1:A:438:GLU:HG3	8	0.5
(1,1655)	1:A:432:GLN:HA	1:A:432:GLN:HG3	16	0.5
(1,1121)	1:A:536:ARG:HD3	1:A:539:MET:HE1	6	0.5

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1121)	1:A:536:ARG:HD3	1:A:539:MET:HE2	6	0.5
(1,1121)	1:A:536:ARG:HD3	1:A:539:MET:HE3	6	0.5
(1,883)	1:A:523:LYS:HB3	1:A:524:VAL:H	4	0.49
(1,883)	1:A:523:LYS:HB3	1:A:524:VAL:H	6	0.49
(1,883)	1:A:523:LYS:HB3	1:A:524:VAL:H	10	0.49
(1,883)	1:A:523:LYS:HB3	1:A:524:VAL:H	18	0.49
(1,811)	1:A:391:GLU:H	1:A:391:GLU:HG3	15	0.49
(1,786)	1:A:471:GLN:HB3	1:A:472:ALA:H	11	0.49
(1,786)	1:A:471:GLN:HB3	1:A:472:ALA:H	14	0.49
(1,511)	1:A:403:ARG:HD3	1:A:404:ALA:H	4	0.49
(1,511)	1:A:403:ARG:HD3	1:A:404:ALA:H	11	0.49
(1,48)	1:A:515:GLU:HB3	1:A:516:HIS:H	14	0.49
(1,454)	1:A:496:PRO:HG3	1:A:497:ALA:H	4	0.49
(1,449)	1:A:543:GLU:HB3	1:A:544:GLN:H	4	0.49
(1,394)	1:A:536:ARG:H	1:A:536:ARG:HB3	9	0.49
(1,2844)	1:A:544:GLN:HA	1:A:544:GLN:HG3	5	0.49
(1,2800)	1:A:529:LYS:H	1:A:529:LYS:HD3	12	0.49
(1,2799)	1:A:529:LYS:H	1:A:529:LYS:HB3	11	0.49
(1,2796)	1:A:527:THR:HA	1:A:529:LYS:HD3	20	0.49
(1,2700)	1:A:509:GLY:H	1:A:510:LEU:HB3	13	0.49
(1,2682)	1:A:500:SER:HB3	1:A:501:SER:H	20	0.49
(1,266)	1:A:481:GLY:HA3	1:A:482:SER:H	8	0.49
(1,2659)	1:A:494:SER:H	1:A:494:SER:HB3	1	0.49
(1,2659)	1:A:494:SER:H	1:A:494:SER:HB3	12	0.49
(1,2641)	1:A:492:LEU:HB3	1:A:493:GLU:H	10	0.49
(1,2638)	1:A:492:LEU:H	1:A:515:GLU:HG3	20	0.49
(1,2575)	1:A:484:ASP:HB3	1:A:485:CYS:H	19	0.49
(1,2553)	1:A:479:ARG:H	1:A:479:ARG:HB3	5	0.49
(1,2553)	1:A:479:ARG:H	1:A:479:ARG:HB3	20	0.49
(1,2533)	1:A:473:MET:H	1:A:473:MET:HB3	9	0.49
(1,2526)	1:A:471:GLN:HB3	1:A:471:GLN:HG3	6	0.49
(1,2482)	1:A:464:LEU:HA	1:A:467:HIS:HB3	1	0.49
(1,2480)	1:A:463:ARG:HD3	1:A:506:LEU:HD21	18	0.49
(1,2480)	1:A:463:ARG:HD3	1:A:506:LEU:HD22	18	0.49
(1,2480)	1:A:463:ARG:HD3	1:A:506:LEU:HD23	18	0.49
(1,2377)	1:A:438:GLU:HB3	1:A:439:LEU:H	1	0.49
(1,2374)	1:A:438:GLU:H	1:A:438:GLU:HB3	5	0.49
(1,2374)	1:A:438:GLU:H	1:A:438:GLU:HB3	15	0.49
(1,2348)	1:A:430:ASP:HB3	1:A:433:VAL:HG11	8	0.49
(1,2348)	1:A:430:ASP:HB3	1:A:433:VAL:HG12	8	0.49
(1,2348)	1:A:430:ASP:HB3	1:A:433:VAL:HG13	8	0.49
(1,2348)	1:A:430:ASP:HB3	1:A:433:VAL:HG21	8	0.49

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2348)	1:A:430:ASP:HB3	1:A:433:VAL:HG22	8	0.49
(1,2348)	1:A:430:ASP:HB3	1:A:433:VAL:HG23	8	0.49
(1,2344)	1:A:430:ASP:H	1:A:430:ASP:HB3	3	0.49
(1,2344)	1:A:430:ASP:H	1:A:430:ASP:HB3	15	0.49
(1,2225)	1:A:408:ILE:HG21	1:A:493:GLU:HB3	4	0.49
(1,2225)	1:A:408:ILE:HG22	1:A:493:GLU:HB3	4	0.49
(1,2225)	1:A:408:ILE:HG23	1:A:493:GLU:HB3	4	0.49
(1,2225)	1:A:408:ILE:HG21	1:A:493:GLU:HB3	10	0.49
(1,2225)	1:A:408:ILE:HG22	1:A:493:GLU:HB3	10	0.49
(1,2225)	1:A:408:ILE:HG23	1:A:493:GLU:HB3	10	0.49
(1,2175)	1:A:398:VAL:HG11	1:A:427:PHE:HB3	12	0.49
(1,2175)	1:A:398:VAL:HG12	1:A:427:PHE:HB3	12	0.49
(1,2175)	1:A:398:VAL:HG13	1:A:427:PHE:HB3	12	0.49
(1,2175)	1:A:398:VAL:HG21	1:A:427:PHE:HB3	12	0.49
(1,2175)	1:A:398:VAL:HG22	1:A:427:PHE:HB3	12	0.49
(1,2175)	1:A:398:VAL:HG23	1:A:427:PHE:HB3	12	0.49
(1,2145)	1:A:393:LYS:HG3	1:A:393:LYS:HE3	14	0.49
(1,2141)	1:A:393:LYS:H	1:A:393:LYS:HG3	13	0.49
(1,2130)	1:A:387:GLU:HB3	1:A:390:SER:HA	18	0.49
(1,2118)	1:A:407:HIS:HB3	1:A:407:HIS:HE1	3	0.49
(1,1933)	1:A:523:LYS:HA	1:A:526:ASN:HB3	13	0.49
(1,186)	1:A:507:LEU:H	1:A:508:SER:HB3	17	0.49
(1,1803)	1:A:529:LYS:HA	1:A:529:LYS:HE3	10	0.49
(1,1791)	1:A:538:ALA:HA	1:A:541:ARG:HB3	14	0.49
(1,1716)	1:A:529:LYS:HB3	1:A:529:LYS:HE3	9	0.49
(1,1716)	1:A:529:LYS:HB3	1:A:529:LYS:HE3	10	0.49
(1,1684)	1:A:523:LYS:HB3	1:A:526:ASN:HB3	9	0.49
(1,1676)	1:A:416:LEU:HG	1:A:417:GLU:HG3	10	0.49
(1,1655)	1:A:432:GLN:HA	1:A:432:GLN:HG3	9	0.49
(1,165)	1:A:463:ARG:HB3	1:A:465:SER:H	1	0.49
(1,165)	1:A:463:ARG:HB3	1:A:465:SER:H	11	0.49
(1,1604)	1:A:542:LYS:HA	1:A:542:LYS:HD3	13	0.49
(1,1604)	1:A:542:LYS:HA	1:A:542:LYS:HD3	20	0.49
(1,1599)	1:A:393:LYS:HD3	1:A:395:TYR:HD1	15	0.49
(1,1599)	1:A:393:LYS:HD3	1:A:395:TYR:HD2	15	0.49
(1,883)	1:A:523:LYS:HB3	1:A:524:VAL:H	7	0.48
(1,811)	1:A:391:GLU:H	1:A:391:GLU:HG3	5	0.48
(1,811)	1:A:391:GLU:H	1:A:391:GLU:HG3	10	0.48
(1,789)	1:A:539:MET:HB3	1:A:540:TRP:H	1	0.48
(1,735)	1:A:410:LEU:HB3	1:A:411:ARG:H	17	0.48
(1,653)	1:A:479:ARG:HD3	1:A:480:GLN:H	10	0.48
(1,636)	1:A:463:ARG:HB3	1:A:464:LEU:H	15	0.48

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,553)	1:A:541:ARG:HB3	1:A:542:LYS:H	12	0.48
(1,552)	1:A:542:LYS:H	1:A:542:LYS:HD3	19	0.48
(1,543)	1:A:462:CYS:HB3	1:A:463:ARG:H	2	0.48
(1,543)	1:A:462:CYS:HB3	1:A:463:ARG:H	17	0.48
(1,523)	1:A:529:LYS:H	1:A:529:LYS:HE3	15	0.48
(1,385)	1:A:539:MET:H	1:A:539:MET:HB3	18	0.48
(1,2844)	1:A:544:GLN:HA	1:A:544:GLN:HG3	15	0.48
(1,2842)	1:A:544:GLN:H	1:A:544:GLN:HG3	17	0.48
(1,2796)	1:A:527:THR:HA	1:A:529:LYS:HD3	15	0.48
(1,2783)	1:A:523:LYS:HG3	1:A:523:LYS:HE3	4	0.48
(1,2757)	1:A:515:GLU:HG3	1:A:516:HIS:H	10	0.48
(1,2728)	1:A:513:LEU:HA	1:A:514:ASP:HB3	1	0.48
(1,2714)	1:A:511:VAL:HG11	1:A:513:LEU:HB3	17	0.48
(1,2714)	1:A:511:VAL:HG12	1:A:513:LEU:HB3	17	0.48
(1,2714)	1:A:511:VAL:HG13	1:A:513:LEU:HB3	17	0.48
(1,2714)	1:A:511:VAL:HG21	1:A:513:LEU:HB3	17	0.48
(1,2714)	1:A:511:VAL:HG22	1:A:513:LEU:HB3	17	0.48
(1,2714)	1:A:511:VAL:HG23	1:A:513:LEU:HB3	17	0.48
(1,2714)	1:A:511:VAL:HG11	1:A:513:LEU:HB3	20	0.48
(1,2714)	1:A:511:VAL:HG12	1:A:513:LEU:HB3	20	0.48
(1,2714)	1:A:511:VAL:HG13	1:A:513:LEU:HB3	20	0.48
(1,2714)	1:A:511:VAL:HG21	1:A:513:LEU:HB3	20	0.48
(1,2714)	1:A:511:VAL:HG22	1:A:513:LEU:HB3	20	0.48
(1,2714)	1:A:511:VAL:HG23	1:A:513:LEU:HB3	20	0.48
(1,2641)	1:A:492:LEU:HB3	1:A:493:GLU:H	16	0.48
(1,264)	1:A:480:GLN:HG3	1:A:482:SER:H	7	0.48
(1,2615)	1:A:490:LEU:HD11	1:A:494:SER:HB3	7	0.48
(1,2615)	1:A:490:LEU:HD12	1:A:494:SER:HB3	7	0.48
(1,2615)	1:A:490:LEU:HD13	1:A:494:SER:HB3	7	0.48
(1,2615)	1:A:490:LEU:HD21	1:A:494:SER:HB3	7	0.48
(1,2615)	1:A:490:LEU:HD22	1:A:494:SER:HB3	7	0.48
(1,2615)	1:A:490:LEU:HD23	1:A:494:SER:HB3	7	0.48
(1,2611)	1:A:490:LEU:HG	1:A:494:SER:HB3	3	0.48
(1,2611)	1:A:490:LEU:HG	1:A:494:SER:HB3	8	0.48
(1,2557)	1:A:479:ARG:HH22	1:A:480:GLN:H	5	0.48
(1,2533)	1:A:473:MET:H	1:A:473:MET:HB3	5	0.48
(1,2499)	1:A:466:LEU:HD11	1:A:467:HIS:HB3	16	0.48
(1,2499)	1:A:466:LEU:HD12	1:A:467:HIS:HB3	16	0.48
(1,2499)	1:A:466:LEU:HD13	1:A:467:HIS:HB3	16	0.48
(1,2499)	1:A:466:LEU:HD21	1:A:467:HIS:HB3	16	0.48
(1,2499)	1:A:466:LEU:HD22	1:A:467:HIS:HB3	16	0.48
(1,2499)	1:A:466:LEU:HD23	1:A:467:HIS:HB3	16	0.48

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2478)	1:A:463:ARG:H	1:A:463:ARG:HD3	6	0.48
(1,2374)	1:A:438:GLU:H	1:A:438:GLU:HB3	13	0.48
(1,2367)	1:A:434:HIS:HB3	1:A:435:GLY:H	4	0.48
(1,2367)	1:A:434:HIS:HB3	1:A:435:GLY:H	5	0.48
(1,2346)	1:A:430:ASP:HB3	1:A:431:PHE:H	6	0.48
(1,2346)	1:A:430:ASP:HB3	1:A:431:PHE:H	18	0.48
(1,2316)	1:A:420:GLY:HA2	1:A:524:VAL:HG11	19	0.48
(1,2316)	1:A:420:GLY:HA2	1:A:524:VAL:HG12	19	0.48
(1,2316)	1:A:420:GLY:HA2	1:A:524:VAL:HG13	19	0.48
(1,2316)	1:A:420:GLY:HA2	1:A:524:VAL:HG21	19	0.48
(1,2316)	1:A:420:GLY:HA2	1:A:524:VAL:HG22	19	0.48
(1,2316)	1:A:420:GLY:HA2	1:A:524:VAL:HG23	19	0.48
(1,2253)	1:A:414:GLU:HA	1:A:414:GLU:HG3	5	0.48
(1,2241)	1:A:411:ARG:HA	1:A:411:ARG:HD3	3	0.48
(1,2239)	1:A:411:ARG:H	1:A:411:ARG:HD3	20	0.48
(1,2225)	1:A:408:ILE:HG21	1:A:493:GLU:HB3	3	0.48
(1,2225)	1:A:408:ILE:HG22	1:A:493:GLU:HB3	3	0.48
(1,2225)	1:A:408:ILE:HG23	1:A:493:GLU:HB3	3	0.48
(1,2209)	1:A:406:GLU:H	1:A:406:GLU:HG3	13	0.48
(1,2161)	1:A:397:PHE:HB3	1:A:398:VAL:H	6	0.48
(1,2145)	1:A:393:LYS:HG3	1:A:393:LYS:HE3	11	0.48
(1,212)	1:A:508:SER:H	1:A:508:SER:HB3	3	0.48
(1,1988)	1:A:403:ARG:HA	1:A:403:ARG:HD3	19	0.48
(1,175)	1:A:474:MET:HB3	1:A:475:SER:H	3	0.48
(1,1716)	1:A:529:LYS:HB3	1:A:529:LYS:HE3	16	0.48
(1,1706)	1:A:393:LYS:HE3	1:A:394:PHE:H	16	0.48
(1,1676)	1:A:416:LEU:HG	1:A:417:GLU:HG3	11	0.48
(1,1617)	1:A:415:LYS:H	1:A:415:LYS:HD3	8	0.48
(1,1603)	1:A:536:ARG:HB3	1:A:537:LYS:H	10	0.48
(1,1599)	1:A:393:LYS:HD3	1:A:395:TYR:HD1	13	0.48
(1,1599)	1:A:393:LYS:HD3	1:A:395:TYR:HD2	13	0.48
(1,1578)	1:A:462:CYS:HB3	1:A:463:ARG:HB3	3	0.48
(1,1571)	1:A:479:ARG:H	1:A:479:ARG:HG3	14	0.48
(1,883)	1:A:523:LYS:HB3	1:A:524:VAL:H	8	0.47
(1,883)	1:A:523:LYS:HB3	1:A:524:VAL:H	17	0.47
(1,818)	1:A:505:SER:HB3	1:A:506:LEU:H	15	0.47
(1,790)	1:A:540:TRP:H	1:A:540:TRP:HB3	3	0.47
(1,735)	1:A:410:LEU:HB3	1:A:411:ARG:H	19	0.47
(1,68)	1:A:518:GLN:HG3	1:A:519:ILE:H	10	0.47
(1,543)	1:A:462:CYS:HB3	1:A:463:ARG:H	8	0.47
(1,53)	1:A:437:GLY:H	1:A:438:GLU:HG3	15	0.47
(1,53)	1:A:437:GLY:H	1:A:438:GLU:HG3	17	0.47

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,48)	1:A:515:GLU:HB3	1:A:516:HIS:H	6	0.47
(1,454)	1:A:496:PRO:HG3	1:A:497:ALA:H	14	0.47
(1,397)	1:A:536:ARG:H	1:A:536:ARG:HD3	1	0.47
(1,2844)	1:A:544:GLN:HA	1:A:544:GLN:HG3	11	0.47
(1,2821)	1:A:534:GLN:H	1:A:534:GLN:HG3	11	0.47
(1,2813)	1:A:532:ARG:HA	1:A:532:ARG:HG3	6	0.47
(1,2796)	1:A:527:THR:HA	1:A:529:LYS:HD3	16	0.47
(1,2728)	1:A:513:LEU:HA	1:A:514:ASP:HB3	7	0.47
(1,2728)	1:A:513:LEU:HA	1:A:514:ASP:HB3	12	0.47
(1,2702)	1:A:510:LEU:H	1:A:510:LEU:HB3	20	0.47
(1,2697)	1:A:507:LEU:HB3	1:A:508:SER:H	6	0.47
(1,2682)	1:A:500:SER:HB3	1:A:501:SER:H	13	0.47
(1,2641)	1:A:492:LEU:HB3	1:A:493:GLU:H	17	0.47
(1,2633)	1:A:491:PRO:HG3	1:A:493:GLU:H	10	0.47
(1,2571)	1:A:484:ASP:H	1:A:484:ASP:HB3	1	0.47
(1,2571)	1:A:484:ASP:H	1:A:484:ASP:HB3	3	0.47
(1,2571)	1:A:484:ASP:H	1:A:484:ASP:HB3	10	0.47
(1,2562)	1:A:480:GLN:HB3	1:A:482:SER:HB3	5	0.47
(1,2560)	1:A:480:GLN:HB3	1:A:481:GLY:H	13	0.47
(1,2553)	1:A:479:ARG:H	1:A:479:ARG:HB3	8	0.47
(1,2412)	1:A:446:ILE:HG13	1:A:473:MET:HE1	10	0.47
(1,2412)	1:A:446:ILE:HG13	1:A:473:MET:HE2	10	0.47
(1,2412)	1:A:446:ILE:HG13	1:A:473:MET:HE3	10	0.47
(1,2374)	1:A:438:GLU:H	1:A:438:GLU:HB3	17	0.47
(1,2367)	1:A:434:HIS:HB3	1:A:435:GLY:H	2	0.47
(1,2341)	1:A:428:CYS:HA	1:A:429:GLU:HB3	2	0.47
(1,2263)	1:A:415:LYS:HE3	1:A:520:PHE:HZ	19	0.47
(1,2257)	1:A:415:LYS:H	1:A:415:LYS:HE3	14	0.47
(1,2253)	1:A:414:GLU:HA	1:A:414:GLU:HG3	19	0.47
(1,2251)	1:A:414:GLU:H	1:A:414:GLU:HG3	5	0.47
(1,2225)	1:A:408:ILE:HG21	1:A:493:GLU:HB3	1	0.47
(1,2225)	1:A:408:ILE:HG22	1:A:493:GLU:HB3	1	0.47
(1,2225)	1:A:408:ILE:HG23	1:A:493:GLU:HB3	1	0.47
(1,2209)	1:A:406:GLU:H	1:A:406:GLU:HG3	4	0.47
(1,2209)	1:A:406:GLU:H	1:A:406:GLU:HG3	6	0.47
(1,2209)	1:A:406:GLU:H	1:A:406:GLU:HG3	7	0.47
(1,2209)	1:A:406:GLU:H	1:A:406:GLU:HG3	15	0.47
(1,2161)	1:A:397:PHE:HB3	1:A:398:VAL:H	9	0.47
(1,2146)	1:A:393:LYS:HG3	1:A:394:PHE:H	17	0.47
(1,2145)	1:A:393:LYS:HG3	1:A:393:LYS:HE3	4	0.47
(1,2137)	1:A:392:GLN:HA	1:A:393:LYS:HB3	11	0.47
(1,2137)	1:A:392:GLN:HA	1:A:393:LYS:HB3	17	0.47

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2135)	1:A:392:GLN:HA	1:A:392:GLN:HG3	6	0.47
(1,2052)	1:A:462:CYS:HB3	1:A:503:THR:HA	2	0.47
(1,2007)	1:A:462:CYS:HA	1:A:466:LEU:HB3	12	0.47
(1,1933)	1:A:523:LYS:HA	1:A:526:ASN:HB3	1	0.47
(1,1676)	1:A:416:LEU:HG	1:A:417:GLU:HG3	2	0.47
(1,1188)	1:A:538:ALA:HB1	1:A:539:MET:HB3	18	0.47
(1,1188)	1:A:538:ALA:HB2	1:A:539:MET:HB3	18	0.47
(1,1188)	1:A:538:ALA:HB3	1:A:539:MET:HB3	18	0.47
(1,818)	1:A:505:SER:HB3	1:A:506:LEU:H	18	0.46
(1,790)	1:A:540:TRP:H	1:A:540:TRP:HB3	20	0.46
(1,735)	1:A:410:LEU:HB3	1:A:411:ARG:H	2	0.46
(1,653)	1:A:479:ARG:HD3	1:A:480:GLN:H	4	0.46
(1,636)	1:A:463:ARG:HB3	1:A:464:LEU:H	8	0.46
(1,524)	1:A:529:LYS:H	1:A:532:ARG:HD3	17	0.46
(1,394)	1:A:536:ARG:H	1:A:536:ARG:HB3	3	0.46
(1,385)	1:A:539:MET:H	1:A:539:MET:HB3	10	0.46
(1,385)	1:A:539:MET:H	1:A:539:MET:HB3	12	0.46
(1,2844)	1:A:544:GLN:HA	1:A:544:GLN:HG3	6	0.46
(1,2844)	1:A:544:GLN:HA	1:A:544:GLN:HG3	19	0.46
(1,2830)	1:A:538:ALA:HB1	1:A:541:ARG:HD3	7	0.46
(1,2830)	1:A:538:ALA:HB2	1:A:541:ARG:HD3	7	0.46
(1,2830)	1:A:538:ALA:HB3	1:A:541:ARG:HD3	7	0.46
(1,2783)	1:A:523:LYS:HG3	1:A:523:LYS:HE3	8	0.46
(1,2728)	1:A:513:LEU:HA	1:A:514:ASP:HB3	2	0.46
(1,2710)	1:A:511:VAL:HA	1:A:512:ARG:HB3	12	0.46
(1,2700)	1:A:509:GLY:H	1:A:510:LEU:HB3	20	0.46
(1,2685)	1:A:502:ASP:HB3	1:A:503:THR:H	4	0.46
(1,2615)	1:A:490:LEU:HD11	1:A:494:SER:HB3	9	0.46
(1,2615)	1:A:490:LEU:HD12	1:A:494:SER:HB3	9	0.46
(1,2615)	1:A:490:LEU:HD13	1:A:494:SER:HB3	9	0.46
(1,2615)	1:A:490:LEU:HD21	1:A:494:SER:HB3	9	0.46
(1,2615)	1:A:490:LEU:HD22	1:A:494:SER:HB3	9	0.46
(1,2615)	1:A:490:LEU:HD23	1:A:494:SER:HB3	9	0.46
(1,2569)	1:A:483:PRO:HB3	1:A:485:CYS:H	5	0.46
(1,2528)	1:A:471:GLN:HG3	1:A:471:GLN:HE21	6	0.46
(1,2528)	1:A:471:GLN:HG3	1:A:471:GLN:HE22	6	0.46
(1,2528)	1:A:471:GLN:HG3	1:A:471:GLN:HE21	19	0.46
(1,2528)	1:A:471:GLN:HG3	1:A:471:GLN:HE22	19	0.46
(1,249)	1:A:407:HIS:HB3	1:A:410:LEU:H	2	0.46
(1,2344)	1:A:430:ASP:H	1:A:430:ASP:HB3	1	0.46
(1,2238)	1:A:411:ARG:H	1:A:411:ARG:HB3	20	0.46
(1,2215)	1:A:406:GLU:HG3	1:A:409:ALA:H	4	0.46

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2215)	1:A:406:GLU:HG3	1:A:409:ALA:H	6	0.46
(1,2209)	1:A:406:GLU:H	1:A:406:GLU:HG3	2	0.46
(1,2209)	1:A:406:GLU:H	1:A:406:GLU:HG3	11	0.46
(1,2209)	1:A:406:GLU:H	1:A:406:GLU:HG3	19	0.46
(1,2145)	1:A:393:LYS:HG3	1:A:393:LYS:HE3	16	0.46
(1,2144)	1:A:393:LYS:HB3	1:A:393:LYS:HE3	15	0.46
(1,2020)	1:A:504:ALA:HB1	1:A:505:SER:HB3	16	0.46
(1,2020)	1:A:504:ALA:HB2	1:A:505:SER:HB3	16	0.46
(1,2020)	1:A:504:ALA:HB3	1:A:505:SER:HB3	16	0.46
(1,1933)	1:A:523:LYS:HA	1:A:526:ASN:HB3	5	0.46
(1,1933)	1:A:523:LYS:HA	1:A:526:ASN:HB3	7	0.46
(1,1933)	1:A:523:LYS:HA	1:A:526:ASN:HB3	18	0.46
(1,1928)	1:A:415:LYS:HA	1:A:415:LYS:HD3	15	0.46
(1,1803)	1:A:529:LYS:HA	1:A:529:LYS:HE3	2	0.46
(1,1751)	1:A:488:PRO:HB3	1:A:512:ARG:HD3	18	0.46
(1,175)	1:A:474:MET:HB3	1:A:475:SER:H	12	0.46
(1,1730)	1:A:531:HIS:HD2	1:A:532:ARG:HD3	15	0.46
(1,1684)	1:A:523:LYS:HB3	1:A:526:ASN:HB3	19	0.46
(1,1676)	1:A:416:LEU:HG	1:A:417:GLU:HG3	19	0.46
(1,1532)	1:A:490:LEU:HD21	1:A:512:ARG:HD3	14	0.46
(1,1532)	1:A:490:LEU:HD22	1:A:512:ARG:HD3	14	0.46
(1,1532)	1:A:490:LEU:HD23	1:A:512:ARG:HD3	14	0.46
(1,1188)	1:A:538:ALA:HB1	1:A:539:MET:HB3	12	0.46
(1,1188)	1:A:538:ALA:HB2	1:A:539:MET:HB3	12	0.46
(1,1188)	1:A:538:ALA:HB3	1:A:539:MET:HB3	12	0.46
(1,1188)	1:A:538:ALA:HB1	1:A:539:MET:HB3	13	0.46
(1,1188)	1:A:538:ALA:HB2	1:A:539:MET:HB3	13	0.46
(1,1188)	1:A:538:ALA:HB3	1:A:539:MET:HB3	13	0.46
(1,910)	1:A:417:GLU:HG3	1:A:418:ALA:H	14	0.45
(1,811)	1:A:391:GLU:H	1:A:391:GLU:HG3	2	0.45
(1,811)	1:A:391:GLU:H	1:A:391:GLU:HG3	17	0.45
(1,811)	1:A:391:GLU:H	1:A:391:GLU:HG3	19	0.45
(1,790)	1:A:540:TRP:H	1:A:540:TRP:HB3	8	0.45
(1,552)	1:A:542:LYS:H	1:A:542:LYS:HD3	18	0.45
(1,535)	1:A:542:LYS:HB3	1:A:543:GLU:H	7	0.45
(1,535)	1:A:542:LYS:HB3	1:A:543:GLU:H	18	0.45
(1,524)	1:A:529:LYS:H	1:A:532:ARG:HD3	8	0.45
(1,449)	1:A:543:GLU:HB3	1:A:544:GLN:H	7	0.45
(1,394)	1:A:536:ARG:H	1:A:536:ARG:HB3	12	0.45
(1,385)	1:A:539:MET:H	1:A:539:MET:HB3	14	0.45
(1,2844)	1:A:544:GLN:HA	1:A:544:GLN:HG3	2	0.45
(1,2844)	1:A:544:GLN:HA	1:A:544:GLN:HG3	16	0.45

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2844)	1:A:544:GLN:HA	1:A:544:GLN:HG3	20	0.45
(1,2813)	1:A:532:ARG:HA	1:A:532:ARG:HG3	1	0.45
(1,2783)	1:A:523:LYS:HG3	1:A:523:LYS:HE3	3	0.45
(1,2759)	1:A:516:HIS:HB3	1:A:517:SER:H	6	0.45
(1,2759)	1:A:516:HIS:HB3	1:A:517:SER:H	14	0.45
(1,2759)	1:A:516:HIS:HB3	1:A:517:SER:H	17	0.45
(1,2724)	1:A:512:ARG:HB3	1:A:512:ARG:HE	18	0.45
(1,2721)	1:A:512:ARG:H	1:A:512:ARG:HG3	17	0.45
(1,2697)	1:A:507:LEU:HB3	1:A:508:SER:H	5	0.45
(1,2685)	1:A:502:ASP:HB3	1:A:503:THR:H	3	0.45
(1,2560)	1:A:480:GLN:HB3	1:A:481:GLY:H	19	0.45
(1,2535)	1:A:473:MET:HA	1:A:473:MET:HG3	16	0.45
(1,2533)	1:A:473:MET:H	1:A:473:MET:HB3	16	0.45
(1,2524)	1:A:471:GLN:HA	1:A:471:GLN:HG3	3	0.45
(1,2524)	1:A:471:GLN:HA	1:A:471:GLN:HG3	5	0.45
(1,2524)	1:A:471:GLN:HA	1:A:471:GLN:HG3	15	0.45
(1,2472)	1:A:458:SER:HB3	1:A:459:ASN:H	18	0.45
(1,2464)	1:A:456:LEU:HB3	1:A:490:LEU:HD11	16	0.45
(1,2464)	1:A:456:LEU:HB3	1:A:490:LEU:HD12	16	0.45
(1,2464)	1:A:456:LEU:HB3	1:A:490:LEU:HD13	16	0.45
(1,2464)	1:A:456:LEU:HB3	1:A:490:LEU:HD21	16	0.45
(1,2464)	1:A:456:LEU:HB3	1:A:490:LEU:HD22	16	0.45
(1,2464)	1:A:456:LEU:HB3	1:A:490:LEU:HD23	16	0.45
(1,2464)	1:A:456:LEU:HB3	1:A:490:LEU:HD11	17	0.45
(1,2464)	1:A:456:LEU:HB3	1:A:490:LEU:HD12	17	0.45
(1,2464)	1:A:456:LEU:HB3	1:A:490:LEU:HD13	17	0.45
(1,2464)	1:A:456:LEU:HB3	1:A:490:LEU:HD21	17	0.45
(1,2464)	1:A:456:LEU:HB3	1:A:490:LEU:HD22	17	0.45
(1,2464)	1:A:456:LEU:HB3	1:A:490:LEU:HD23	17	0.45
(1,2374)	1:A:438:GLU:H	1:A:438:GLU:HB3	4	0.45
(1,2374)	1:A:438:GLU:H	1:A:438:GLU:HB3	6	0.45
(1,2374)	1:A:438:GLU:H	1:A:438:GLU:HB3	10	0.45
(1,2374)	1:A:438:GLU:H	1:A:438:GLU:HB3	18	0.45
(1,2357)	1:A:432:GLN:HB3	1:A:433:VAL:H	5	0.45
(1,2357)	1:A:432:GLN:HB3	1:A:433:VAL:H	13	0.45
(1,2253)	1:A:414:GLU:HA	1:A:414:GLU:HG3	16	0.45
(1,2252)	1:A:414:GLU:H	1:A:423:ASP:HB3	11	0.45
(1,2209)	1:A:406:GLU:H	1:A:406:GLU:HG3	3	0.45
(1,2209)	1:A:406:GLU:H	1:A:406:GLU:HG3	10	0.45
(1,2209)	1:A:406:GLU:H	1:A:406:GLU:HG3	17	0.45
(1,2209)	1:A:406:GLU:H	1:A:406:GLU:HG3	18	0.45
(1,2196)	1:A:401:HIS:HE1	1:A:406:GLU:HB3	10	0.45

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2179)	1:A:398:VAL:HG11	1:A:449:SER:HB3	17	0.45
(1,2179)	1:A:398:VAL:HG12	1:A:449:SER:HB3	17	0.45
(1,2179)	1:A:398:VAL:HG13	1:A:449:SER:HB3	17	0.45
(1,2179)	1:A:398:VAL:HG21	1:A:449:SER:HB3	17	0.45
(1,2179)	1:A:398:VAL:HG22	1:A:449:SER:HB3	17	0.45
(1,2179)	1:A:398:VAL:HG23	1:A:449:SER:HB3	17	0.45
(1,2074)	1:A:393:LYS:HD3	1:A:395:TYR:HE1	1	0.45
(1,2074)	1:A:393:LYS:HD3	1:A:395:TYR:HE2	1	0.45
(1,2052)	1:A:462:CYS:HB3	1:A:503:THR:HA	1	0.45
(1,2027)	1:A:389:SER:HB3	1:A:390:SER:H	2	0.45
(1,2027)	1:A:389:SER:HB3	1:A:390:SER:H	13	0.45
(1,2019)	1:A:505:SER:HB3	1:A:506:LEU:HD21	20	0.45
(1,2019)	1:A:505:SER:HB3	1:A:506:LEU:HD22	20	0.45
(1,2019)	1:A:505:SER:HB3	1:A:506:LEU:HD23	20	0.45
(1,175)	1:A:474:MET:HB3	1:A:475:SER:H	4	0.45
(1,175)	1:A:474:MET:HB3	1:A:475:SER:H	5	0.45
(1,1716)	1:A:529:LYS:HB3	1:A:529:LYS:HE3	6	0.45
(1,1706)	1:A:393:LYS:HE3	1:A:394:PHE:H	10	0.45
(1,1609)	1:A:394:PHE:HD1	1:A:537:LYS:HD3	15	0.45
(1,1609)	1:A:394:PHE:HD2	1:A:537:LYS:HD3	15	0.45
(1,1571)	1:A:479:ARG:H	1:A:479:ARG:HG3	18	0.45
(1,1235)	1:A:450:ALA:HB1	1:A:536:ARG:HD3	14	0.45
(1,1235)	1:A:450:ALA:HB2	1:A:536:ARG:HD3	14	0.45
(1,1235)	1:A:450:ALA:HB3	1:A:536:ARG:HD3	14	0.45
(1,1188)	1:A:538:ALA:HB1	1:A:539:MET:HB3	10	0.45
(1,1188)	1:A:538:ALA:HB2	1:A:539:MET:HB3	10	0.45
(1,1188)	1:A:538:ALA:HB3	1:A:539:MET:HB3	10	0.45
(1,910)	1:A:417:GLU:HG3	1:A:418:ALA:H	10	0.44
(1,883)	1:A:523:LYS:HB3	1:A:524:VAL:H	13	0.44
(1,883)	1:A:523:LYS:HB3	1:A:524:VAL:H	19	0.44
(1,811)	1:A:391:GLU:H	1:A:391:GLU:HG3	7	0.44
(1,811)	1:A:391:GLU:H	1:A:391:GLU:HG3	18	0.44
(1,676)	1:A:436:ARG:H	1:A:436:ARG:HG3	15	0.44
(1,559)	1:A:463:ARG:HB3	1:A:463:ARG:HE	18	0.44
(1,538)	1:A:501:SER:H	1:A:501:SER:HB3	13	0.44
(1,337)	1:A:501:SER:HB3	1:A:503:THR:H	7	0.44
(1,2839)	1:A:542:LYS:HG3	1:A:543:GLU:H	10	0.44
(1,2835)	1:A:541:ARG:HB3	1:A:541:ARG:HD3	19	0.44
(1,2825)	1:A:537:LYS:H	1:A:537:LYS:HB3	15	0.44
(1,2796)	1:A:527:THR:HA	1:A:529:LYS:HD3	2	0.44
(1,2769)	1:A:519:ILE:HD11	1:A:523:LYS:HE3	18	0.44
(1,2769)	1:A:519:ILE:HD12	1:A:523:LYS:HE3	18	0.44

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2769)	1:A:519:ILE:HD13	1:A:523:LYS:HE3	18	0.44
(1,2759)	1:A:516:HIS:HB3	1:A:517:SER:H	16	0.44
(1,2700)	1:A:509:GLY:H	1:A:510:LEU:HB3	6	0.44
(1,2697)	1:A:507:LEU:HB3	1:A:508:SER:H	13	0.44
(1,2697)	1:A:507:LEU:HB3	1:A:508:SER:H	18	0.44
(1,2685)	1:A:502:ASP:HB3	1:A:503:THR:H	9	0.44
(1,2672)	1:A:496:PRO:HD3	1:A:497:ALA:H	1	0.44
(1,2672)	1:A:496:PRO:HD3	1:A:497:ALA:H	2	0.44
(1,2672)	1:A:496:PRO:HD3	1:A:497:ALA:H	3	0.44
(1,2672)	1:A:496:PRO:HD3	1:A:497:ALA:H	4	0.44
(1,2672)	1:A:496:PRO:HD3	1:A:497:ALA:H	5	0.44
(1,2672)	1:A:496:PRO:HD3	1:A:497:ALA:H	6	0.44
(1,2672)	1:A:496:PRO:HD3	1:A:497:ALA:H	7	0.44
(1,2672)	1:A:496:PRO:HD3	1:A:497:ALA:H	8	0.44
(1,2672)	1:A:496:PRO:HD3	1:A:497:ALA:H	9	0.44
(1,2672)	1:A:496:PRO:HD3	1:A:497:ALA:H	10	0.44
(1,2672)	1:A:496:PRO:HD3	1:A:497:ALA:H	11	0.44
(1,2672)	1:A:496:PRO:HD3	1:A:497:ALA:H	12	0.44
(1,2672)	1:A:496:PRO:HD3	1:A:497:ALA:H	13	0.44
(1,2672)	1:A:496:PRO:HD3	1:A:497:ALA:H	14	0.44
(1,2672)	1:A:496:PRO:HD3	1:A:497:ALA:H	15	0.44
(1,2672)	1:A:496:PRO:HD3	1:A:497:ALA:H	17	0.44
(1,2672)	1:A:496:PRO:HD3	1:A:497:ALA:H	18	0.44
(1,2672)	1:A:496:PRO:HD3	1:A:497:ALA:H	19	0.44
(1,2672)	1:A:496:PRO:HD3	1:A:497:ALA:H	20	0.44
(1,266)	1:A:481:GLY:HA3	1:A:482:SER:H	7	0.44
(1,2624)	1:A:490:LEU:HD11	1:A:514:ASP:HB3	20	0.44
(1,2624)	1:A:490:LEU:HD12	1:A:514:ASP:HB3	20	0.44
(1,2624)	1:A:490:LEU:HD13	1:A:514:ASP:HB3	20	0.44
(1,2624)	1:A:490:LEU:HD21	1:A:514:ASP:HB3	20	0.44
(1,2624)	1:A:490:LEU:HD22	1:A:514:ASP:HB3	20	0.44
(1,2624)	1:A:490:LEU:HD23	1:A:514:ASP:HB3	20	0.44
(1,2575)	1:A:484:ASP:HB3	1:A:485:CYS:H	1	0.44
(1,2571)	1:A:484:ASP:H	1:A:484:ASP:HB3	5	0.44
(1,2560)	1:A:480:GLN:HB3	1:A:481:GLY:H	20	0.44
(1,2538)	1:A:473:MET:HE1	1:A:485:CYS:HB3	18	0.44
(1,2538)	1:A:473:MET:HE2	1:A:485:CYS:HB3	18	0.44
(1,2538)	1:A:473:MET:HE3	1:A:485:CYS:HB3	18	0.44
(1,2533)	1:A:473:MET:H	1:A:473:MET:HB3	3	0.44
(1,2533)	1:A:473:MET:H	1:A:473:MET:HB3	10	0.44
(1,2533)	1:A:473:MET:H	1:A:473:MET:HB3	13	0.44
(1,2533)	1:A:473:MET:H	1:A:473:MET:HB3	19	0.44

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2524)	1:A:471:GLN:HA	1:A:471:GLN:HG3	9	0.44
(1,2499)	1:A:466:LEU:HD11	1:A:467:HIS:HB3	12	0.44
(1,2499)	1:A:466:LEU:HD12	1:A:467:HIS:HB3	12	0.44
(1,2499)	1:A:466:LEU:HD13	1:A:467:HIS:HB3	12	0.44
(1,2499)	1:A:466:LEU:HD21	1:A:467:HIS:HB3	12	0.44
(1,2499)	1:A:466:LEU:HD22	1:A:467:HIS:HB3	12	0.44
(1,2499)	1:A:466:LEU:HD23	1:A:467:HIS:HB3	12	0.44
(1,249)	1:A:407:HIS:HB3	1:A:410:LEU:H	12	0.44
(1,2464)	1:A:456:LEU:HB3	1:A:490:LEU:HD11	10	0.44
(1,2464)	1:A:456:LEU:HB3	1:A:490:LEU:HD12	10	0.44
(1,2464)	1:A:456:LEU:HB3	1:A:490:LEU:HD13	10	0.44
(1,2464)	1:A:456:LEU:HB3	1:A:490:LEU:HD21	10	0.44
(1,2464)	1:A:456:LEU:HB3	1:A:490:LEU:HD22	10	0.44
(1,2464)	1:A:456:LEU:HB3	1:A:490:LEU:HD23	10	0.44
(1,2369)	1:A:436:ARG:H	1:A:436:ARG:HB3	12	0.44
(1,2347)	1:A:430:ASP:HB3	1:A:432:GLN:H	2	0.44
(1,2343)	1:A:429:GLU:HG3	1:A:430:ASP:H	5	0.44
(1,2264)	1:A:415:LYS:HE3	1:A:521:ALA:HB1	12	0.44
(1,2264)	1:A:415:LYS:HE3	1:A:521:ALA:HB2	12	0.44
(1,2264)	1:A:415:LYS:HE3	1:A:521:ALA:HB3	12	0.44
(1,2251)	1:A:414:GLU:H	1:A:414:GLU:HG3	3	0.44
(1,2241)	1:A:411:ARG:HA	1:A:411:ARG:HD3	17	0.44
(1,2238)	1:A:411:ARG:H	1:A:411:ARG:HB3	3	0.44
(1,2215)	1:A:406:GLU:HG3	1:A:409:ALA:H	2	0.44
(1,2209)	1:A:406:GLU:H	1:A:406:GLU:HG3	1	0.44
(1,2209)	1:A:406:GLU:H	1:A:406:GLU:HG3	8	0.44
(1,2209)	1:A:406:GLU:H	1:A:406:GLU:HG3	20	0.44
(1,2196)	1:A:401:HIS:HE1	1:A:406:GLU:HB3	19	0.44
(1,2163)	1:A:397:PHE:HB3	1:A:453:ILE:H	7	0.44
(1,2145)	1:A:393:LYS:HG3	1:A:393:LYS:HE3	1	0.44
(1,2144)	1:A:393:LYS:HB3	1:A:393:LYS:HE3	13	0.44
(1,2131)	1:A:388:SER:H	1:A:388:SER:HB3	7	0.44
(1,2129)	1:A:387:GLU:HB3	1:A:390:SER:H	5	0.44
(1,2129)	1:A:387:GLU:HB3	1:A:390:SER:H	11	0.44
(1,212)	1:A:508:SER:H	1:A:508:SER:HB3	1	0.44
(1,2021)	1:A:505:SER:HB3	1:A:506:LEU:HG	20	0.44
(1,2020)	1:A:504:ALA:HB1	1:A:505:SER:HB3	12	0.44
(1,2020)	1:A:504:ALA:HB2	1:A:505:SER:HB3	12	0.44
(1,2020)	1:A:504:ALA:HB3	1:A:505:SER:HB3	12	0.44
(1,2007)	1:A:462:CYS:HA	1:A:466:LEU:HB3	20	0.44
(1,1684)	1:A:523:LYS:HB3	1:A:526:ASN:HB3	7	0.44
(1,1655)	1:A:432:GLN:HA	1:A:432:GLN:HG3	17	0.44

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1655)	1:A:432:GLN:HA	1:A:432:GLN:HG3	19	0.44
(1,146)	1:A:508:SER:HB3	1:A:509:GLY:H	14	0.44
(1,1188)	1:A:538:ALA:HB1	1:A:539:MET:HB3	20	0.44
(1,1188)	1:A:538:ALA:HB2	1:A:539:MET:HB3	20	0.44
(1,1188)	1:A:538:ALA:HB3	1:A:539:MET:HB3	20	0.44
(1,98)	1:A:417:GLU:HG3	1:A:423:ASP:H	19	0.43
(1,883)	1:A:523:LYS:HB3	1:A:524:VAL:H	1	0.43
(1,789)	1:A:539:MET:HB3	1:A:540:TRP:H	15	0.43
(1,561)	1:A:543:GLU:HB3	1:A:545:ASP:H	16	0.43
(1,552)	1:A:542:LYS:H	1:A:542:LYS:HD3	13	0.43
(1,535)	1:A:542:LYS:HB3	1:A:543:GLU:H	3	0.43
(1,524)	1:A:529:LYS:H	1:A:532:ARG:HD3	9	0.43
(1,523)	1:A:529:LYS:H	1:A:529:LYS:HE3	11	0.43
(1,51)	1:A:436:ARG:HG3	1:A:437:GLY:H	2	0.43
(1,2825)	1:A:537:LYS:H	1:A:537:LYS:HB3	8	0.43
(1,2814)	1:A:533:LEU:H	1:A:533:LEU:HB3	9	0.43
(1,2800)	1:A:529:LYS:H	1:A:529:LYS:HD3	8	0.43
(1,2783)	1:A:523:LYS:HG3	1:A:523:LYS:HE3	13	0.43
(1,2769)	1:A:519:ILE:HD11	1:A:523:LYS:HE3	7	0.43
(1,2769)	1:A:519:ILE:HD12	1:A:523:LYS:HE3	7	0.43
(1,2769)	1:A:519:ILE:HD13	1:A:523:LYS:HE3	7	0.43
(1,2759)	1:A:516:HIS:HB3	1:A:517:SER:H	20	0.43
(1,2754)	1:A:514:ASP:HB3	1:A:517:SER:HB3	18	0.43
(1,2741)	1:A:513:LEU:HD11	1:A:523:LYS:HE3	9	0.43
(1,2741)	1:A:513:LEU:HD12	1:A:523:LYS:HE3	9	0.43
(1,2741)	1:A:513:LEU:HD13	1:A:523:LYS:HE3	9	0.43
(1,2741)	1:A:513:LEU:HD21	1:A:523:LYS:HE3	9	0.43
(1,2741)	1:A:513:LEU:HD22	1:A:523:LYS:HE3	9	0.43
(1,2741)	1:A:513:LEU:HD23	1:A:523:LYS:HE3	9	0.43
(1,2728)	1:A:513:LEU:HA	1:A:514:ASP:HB3	13	0.43
(1,2697)	1:A:507:LEU:HB3	1:A:508:SER:H	8	0.43
(1,2672)	1:A:496:PRO:HD3	1:A:497:ALA:H	16	0.43
(1,2609)	1:A:490:LEU:HB3	1:A:512:ARG:HD3	14	0.43
(1,2553)	1:A:479:ARG:H	1:A:479:ARG:HB3	18	0.43
(1,2538)	1:A:473:MET:HE1	1:A:485:CYS:HB3	14	0.43
(1,2538)	1:A:473:MET:HE2	1:A:485:CYS:HB3	14	0.43
(1,2538)	1:A:473:MET:HE3	1:A:485:CYS:HB3	14	0.43
(1,2536)	1:A:473:MET:HB3	1:A:474:MET:H	9	0.43
(1,2533)	1:A:473:MET:H	1:A:473:MET:HB3	1	0.43
(1,2533)	1:A:473:MET:H	1:A:473:MET:HB3	8	0.43
(1,2533)	1:A:473:MET:H	1:A:473:MET:HB3	15	0.43
(1,2528)	1:A:471:GLN:HG3	1:A:471:GLN:HE21	9	0.43

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2528)	1:A:471:GLN:HG3	1:A:471:GLN:HE22	9	0.43
(1,25)	1:A:479:ARG:HG3	1:A:481:GLY:H	19	0.43
(1,2433)	1:A:453:ILE:HG13	1:A:487:ILE:HD11	14	0.43
(1,2433)	1:A:453:ILE:HG13	1:A:487:ILE:HD12	14	0.43
(1,2433)	1:A:453:ILE:HG13	1:A:487:ILE:HD13	14	0.43
(1,2367)	1:A:434:HIS:HB3	1:A:435:GLY:H	6	0.43
(1,2255)	1:A:414:GLU:HB3	1:A:415:LYS:H	13	0.43
(1,2222)	1:A:408:ILE:HA	1:A:411:ARG:HB3	1	0.43
(1,2209)	1:A:406:GLU:H	1:A:406:GLU:HG3	14	0.43
(1,2131)	1:A:388:SER:H	1:A:388:SER:HB3	9	0.43
(1,212)	1:A:508:SER:H	1:A:508:SER:HB3	9	0.43
(1,1717)	1:A:526:ASN:HA	1:A:529:LYS:HE3	2	0.43
(1,1618)	1:A:463:ARG:HB3	1:A:506:LEU:HD11	6	0.43
(1,1618)	1:A:463:ARG:HB3	1:A:506:LEU:HD12	6	0.43
(1,1618)	1:A:463:ARG:HB3	1:A:506:LEU:HD13	6	0.43
(1,1616)	1:A:415:LYS:HD3	1:A:520:PHE:HE1	18	0.43
(1,1616)	1:A:415:LYS:HD3	1:A:520:PHE:HE2	18	0.43
(1,1611)	1:A:537:LYS:HD3	1:A:538:ALA:H	3	0.43
(1,1383)	1:A:462:CYS:HB3	1:A:503:THR:HG21	16	0.43
(1,1383)	1:A:462:CYS:HB3	1:A:503:THR:HG22	16	0.43
(1,1383)	1:A:462:CYS:HB3	1:A:503:THR:HG23	16	0.43
(1,636)	1:A:463:ARG:HB3	1:A:464:LEU:H	13	0.42
(1,599)	1:A:403:ARG:HG3	1:A:403:ARG:HE	6	0.42
(1,561)	1:A:543:GLU:HB3	1:A:545:ASP:H	4	0.42
(1,538)	1:A:501:SER:H	1:A:501:SER:HB3	15	0.42
(1,538)	1:A:501:SER:H	1:A:501:SER:HB3	19	0.42
(1,454)	1:A:496:PRO:HG3	1:A:497:ALA:H	6	0.42
(1,2831)	1:A:539:MET:HG3	1:A:540:TRP:H	17	0.42
(1,2825)	1:A:537:LYS:H	1:A:537:LYS:HB3	5	0.42
(1,2813)	1:A:532:ARG:HA	1:A:532:ARG:HG3	4	0.42
(1,2813)	1:A:532:ARG:HA	1:A:532:ARG:HG3	12	0.42
(1,2783)	1:A:523:LYS:HG3	1:A:523:LYS:HE3	6	0.42
(1,2783)	1:A:523:LYS:HG3	1:A:523:LYS:HE3	10	0.42
(1,2759)	1:A:516:HIS:HB3	1:A:517:SER:H	7	0.42
(1,2759)	1:A:516:HIS:HB3	1:A:517:SER:H	13	0.42
(1,2721)	1:A:512:ARG:H	1:A:512:ARG:HG3	1	0.42
(1,2721)	1:A:512:ARG:H	1:A:512:ARG:HG3	13	0.42
(1,2714)	1:A:511:VAL:HG11	1:A:513:LEU:HB3	1	0.42
(1,2714)	1:A:511:VAL:HG12	1:A:513:LEU:HB3	1	0.42
(1,2714)	1:A:511:VAL:HG13	1:A:513:LEU:HB3	1	0.42
(1,2714)	1:A:511:VAL:HG21	1:A:513:LEU:HB3	1	0.42
(1,2714)	1:A:511:VAL:HG22	1:A:513:LEU:HB3	1	0.42

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2714)	1:A:511:VAL:HG23	1:A:513:LEU:HB3	1	0.42
(1,2685)	1:A:502:ASP:HB3	1:A:503:THR:H	12	0.42
(1,2659)	1:A:494:SER:H	1:A:494:SER:HB3	9	0.42
(1,2655)	1:A:493:GLU:H	1:A:493:GLU:HG3	10	0.42
(1,2560)	1:A:480:GLN:HB3	1:A:481:GLY:H	8	0.42
(1,2553)	1:A:479:ARG:H	1:A:479:ARG:HB3	3	0.42
(1,2553)	1:A:479:ARG:H	1:A:479:ARG:HB3	17	0.42
(1,2533)	1:A:473:MET:H	1:A:473:MET:HB3	2	0.42
(1,2533)	1:A:473:MET:H	1:A:473:MET:HB3	17	0.42
(1,2533)	1:A:473:MET:H	1:A:473:MET:HB3	18	0.42
(1,2499)	1:A:466:LEU:HD11	1:A:467:HIS:HB3	14	0.42
(1,2499)	1:A:466:LEU:HD12	1:A:467:HIS:HB3	14	0.42
(1,2499)	1:A:466:LEU:HD13	1:A:467:HIS:HB3	14	0.42
(1,2499)	1:A:466:LEU:HD21	1:A:467:HIS:HB3	14	0.42
(1,2499)	1:A:466:LEU:HD22	1:A:467:HIS:HB3	14	0.42
(1,2499)	1:A:466:LEU:HD23	1:A:467:HIS:HB3	14	0.42
(1,2499)	1:A:466:LEU:HD11	1:A:467:HIS:HB3	15	0.42
(1,2499)	1:A:466:LEU:HD12	1:A:467:HIS:HB3	15	0.42
(1,2499)	1:A:466:LEU:HD13	1:A:467:HIS:HB3	15	0.42
(1,2499)	1:A:466:LEU:HD21	1:A:467:HIS:HB3	15	0.42
(1,2499)	1:A:466:LEU:HD22	1:A:467:HIS:HB3	15	0.42
(1,2499)	1:A:466:LEU:HD23	1:A:467:HIS:HB3	15	0.42
(1,2372)	1:A:436:ARG:HB3	1:A:436:ARG:HD3	13	0.42
(1,2342)	1:A:429:GLU:H	1:A:429:GLU:HG3	7	0.42
(1,2316)	1:A:420:GLY:HA2	1:A:524:VAL:HG11	6	0.42
(1,2316)	1:A:420:GLY:HA2	1:A:524:VAL:HG12	6	0.42
(1,2316)	1:A:420:GLY:HA2	1:A:524:VAL:HG13	6	0.42
(1,2316)	1:A:420:GLY:HA2	1:A:524:VAL:HG21	6	0.42
(1,2316)	1:A:420:GLY:HA2	1:A:524:VAL:HG22	6	0.42
(1,2316)	1:A:420:GLY:HA2	1:A:524:VAL:HG23	6	0.42
(1,2255)	1:A:414:GLU:HB3	1:A:415:LYS:H	16	0.42
(1,2215)	1:A:406:GLU:HG3	1:A:409:ALA:H	10	0.42
(1,2184)	1:A:400:LEU:H	1:A:400:LEU:HB3	10	0.42
(1,2161)	1:A:397:PHE:HB3	1:A:398:VAL:H	2	0.42
(1,2126)	1:A:529:LYS:HE3	1:A:531:HIS:HE1	4	0.42
(1,1881)	1:A:536:ARG:HA	1:A:536:ARG:HD3	9	0.42
(1,175)	1:A:474:MET:HB3	1:A:475:SER:H	13	0.42
(1,1706)	1:A:393:LYS:HE3	1:A:394:PHE:H	7	0.42
(1,1684)	1:A:523:LYS:HB3	1:A:526:ASN:HB3	1	0.42
(1,165)	1:A:463:ARG:HB3	1:A:465:SER:H	2	0.42
(1,1604)	1:A:542:LYS:HA	1:A:542:LYS:HD3	4	0.42
(1,1578)	1:A:462:CYS:HB3	1:A:463:ARG:HB3	9	0.42

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1188)	1:A:538:ALA:HB1	1:A:539:MET:HB3	3	0.42
(1,1188)	1:A:538:ALA:HB2	1:A:539:MET:HB3	3	0.42
(1,1188)	1:A:538:ALA:HB3	1:A:539:MET:HB3	3	0.42
(1,835)	1:A:415:LYS:H	1:A:415:LYS:HG3	17	0.41
(1,811)	1:A:391:GLU:H	1:A:391:GLU:HG3	3	0.41
(1,811)	1:A:391:GLU:H	1:A:391:GLU:HG3	9	0.41
(1,806)	1:A:434:HIS:H	1:A:438:GLU:HG3	18	0.41
(1,678)	1:A:436:ARG:H	1:A:438:GLU:HG3	8	0.41
(1,561)	1:A:543:GLU:HB3	1:A:545:ASP:H	9	0.41
(1,561)	1:A:543:GLU:HB3	1:A:545:ASP:H	19	0.41
(1,538)	1:A:501:SER:H	1:A:501:SER:HB3	8	0.41
(1,394)	1:A:536:ARG:H	1:A:536:ARG:HB3	18	0.41
(1,387)	1:A:539:MET:H	1:A:540:TRP:HB3	9	0.41
(1,385)	1:A:539:MET:H	1:A:539:MET:HB3	11	0.41
(1,385)	1:A:539:MET:H	1:A:539:MET:HB3	20	0.41
(1,2840)	1:A:543:GLU:HA	1:A:543:GLU:HG3	17	0.41
(1,2840)	1:A:543:GLU:HA	1:A:543:GLU:HG3	20	0.41
(1,2838)	1:A:542:LYS:HG3	1:A:542:LYS:HE3	11	0.41
(1,2838)	1:A:542:LYS:HG3	1:A:542:LYS:HE3	12	0.41
(1,2814)	1:A:533:LEU:H	1:A:533:LEU:HB3	13	0.41
(1,2813)	1:A:532:ARG:HA	1:A:532:ARG:HG3	9	0.41
(1,2813)	1:A:532:ARG:HA	1:A:532:ARG:HG3	17	0.41
(1,2813)	1:A:532:ARG:HA	1:A:532:ARG:HG3	18	0.41
(1,2807)	1:A:529:LYS:HB3	1:A:529:LYS:HE3	14	0.41
(1,2796)	1:A:527:THR:HA	1:A:529:LYS:HD3	1	0.41
(1,2728)	1:A:513:LEU:HA	1:A:514:ASP:HB3	9	0.41
(1,2685)	1:A:502:ASP:HB3	1:A:503:THR:H	7	0.41
(1,2632)	1:A:491:PRO:HB3	1:A:494:SER:H	7	0.41
(1,2591)	1:A:487:ILE:HG21	1:A:513:LEU:HB3	12	0.41
(1,2591)	1:A:487:ILE:HG22	1:A:513:LEU:HB3	12	0.41
(1,2591)	1:A:487:ILE:HG23	1:A:513:LEU:HB3	12	0.41
(1,2559)	1:A:480:GLN:HB3	1:A:480:GLN:HE21	15	0.41
(1,2559)	1:A:480:GLN:HB3	1:A:480:GLN:HE22	15	0.41
(1,2533)	1:A:473:MET:H	1:A:473:MET:HB3	4	0.41
(1,2533)	1:A:473:MET:H	1:A:473:MET:HB3	12	0.41
(1,2533)	1:A:473:MET:H	1:A:473:MET:HB3	20	0.41
(1,2520)	1:A:470:ASN:H	1:A:470:ASN:HB3	15	0.41
(1,2502)	1:A:467:HIS:HA	1:A:470:ASN:HB3	19	0.41
(1,2495)	1:A:466:LEU:HB3	1:A:467:HIS:HB3	13	0.41
(1,2367)	1:A:434:HIS:HB3	1:A:435:GLY:H	3	0.41
(1,2367)	1:A:434:HIS:HB3	1:A:435:GLY:H	19	0.41
(1,2316)	1:A:420:GLY:HA2	1:A:524:VAL:HG11	15	0.41

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2316)	1:A:420:GLY:HA2	1:A:524:VAL:HG12	15	0.41
(1,2316)	1:A:420:GLY:HA2	1:A:524:VAL:HG13	15	0.41
(1,2316)	1:A:420:GLY:HA2	1:A:524:VAL:HG21	15	0.41
(1,2316)	1:A:420:GLY:HA2	1:A:524:VAL:HG22	15	0.41
(1,2316)	1:A:420:GLY:HA2	1:A:524:VAL:HG23	15	0.41
(1,2255)	1:A:414:GLU:HB3	1:A:415:LYS:H	3	0.41
(1,2215)	1:A:406:GLU:HG3	1:A:409:ALA:H	5	0.41
(1,2209)	1:A:406:GLU:H	1:A:406:GLU:HG3	5	0.41
(1,2179)	1:A:398:VAL:HG11	1:A:449:SER:HB3	5	0.41
(1,2179)	1:A:398:VAL:HG12	1:A:449:SER:HB3	5	0.41
(1,2179)	1:A:398:VAL:HG13	1:A:449:SER:HB3	5	0.41
(1,2179)	1:A:398:VAL:HG21	1:A:449:SER:HB3	5	0.41
(1,2179)	1:A:398:VAL:HG22	1:A:449:SER:HB3	5	0.41
(1,2179)	1:A:398:VAL:HG23	1:A:449:SER:HB3	5	0.41
(1,2179)	1:A:398:VAL:HG11	1:A:449:SER:HB3	9	0.41
(1,2179)	1:A:398:VAL:HG12	1:A:449:SER:HB3	9	0.41
(1,2179)	1:A:398:VAL:HG13	1:A:449:SER:HB3	9	0.41
(1,2179)	1:A:398:VAL:HG21	1:A:449:SER:HB3	9	0.41
(1,2179)	1:A:398:VAL:HG22	1:A:449:SER:HB3	9	0.41
(1,2179)	1:A:398:VAL:HG23	1:A:449:SER:HB3	9	0.41
(1,2163)	1:A:397:PHE:HB3	1:A:453:ILE:H	14	0.41
(1,2141)	1:A:393:LYS:H	1:A:393:LYS:HG3	20	0.41
(1,2134)	1:A:392:GLN:H	1:A:392:GLN:HG3	13	0.41
(1,2129)	1:A:387:GLU:HB3	1:A:390:SER:H	20	0.41
(1,2027)	1:A:389:SER:HB3	1:A:390:SER:H	11	0.41
(1,2007)	1:A:462:CYS:HA	1:A:466:LEU:HB3	2	0.41
(1,1933)	1:A:523:LYS:HA	1:A:526:ASN:HB3	4	0.41
(1,1928)	1:A:415:LYS:HA	1:A:415:LYS:HD3	16	0.41
(1,1847)	1:A:387:GLU:HA	1:A:387:GLU:HG3	8	0.41
(1,1847)	1:A:387:GLU:HA	1:A:387:GLU:HG3	14	0.41
(1,1844)	1:A:479:ARG:HA	1:A:479:ARG:HG3	10	0.41
(1,1706)	1:A:393:LYS:HE3	1:A:394:PHE:H	20	0.41
(1,1684)	1:A:523:LYS:HB3	1:A:526:ASN:HB3	18	0.41
(1,1571)	1:A:479:ARG:H	1:A:479:ARG:HG3	7	0.41
(1,818)	1:A:505:SER:HB3	1:A:506:LEU:H	11	0.4
(1,812)	1:A:390:SER:HB3	1:A:391:GLU:H	7	0.4
(1,811)	1:A:391:GLU:H	1:A:391:GLU:HG3	11	0.4
(1,552)	1:A:542:LYS:H	1:A:542:LYS:HD3	2	0.4
(1,538)	1:A:501:SER:H	1:A:501:SER:HB3	11	0.4
(1,524)	1:A:529:LYS:H	1:A:532:ARG:HD3	18	0.4
(1,511)	1:A:403:ARG:HD3	1:A:404:ALA:H	19	0.4
(1,454)	1:A:496:PRO:HG3	1:A:497:ALA:H	9	0.4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,454)	1:A:496:PRO:HG3	1:A:497:ALA:H	16	0.4
(1,454)	1:A:496:PRO:HG3	1:A:497:ALA:H	18	0.4
(1,385)	1:A:539:MET:H	1:A:539:MET:HB3	2	0.4
(1,2839)	1:A:542:LYS:HG3	1:A:543:GLU:H	15	0.4
(1,2838)	1:A:542:LYS:HG3	1:A:542:LYS:HE3	17	0.4
(1,2825)	1:A:537:LYS:H	1:A:537:LYS:HB3	20	0.4
(1,2813)	1:A:532:ARG:HA	1:A:532:ARG:HG3	8	0.4
(1,2783)	1:A:523:LYS:HG3	1:A:523:LYS:HE3	14	0.4
(1,2769)	1:A:519:ILE:HD11	1:A:523:LYS:HE3	16	0.4
(1,2769)	1:A:519:ILE:HD12	1:A:523:LYS:HE3	16	0.4
(1,2769)	1:A:519:ILE:HD13	1:A:523:LYS:HE3	16	0.4
(1,2769)	1:A:519:ILE:HD11	1:A:523:LYS:HE3	17	0.4
(1,2769)	1:A:519:ILE:HD12	1:A:523:LYS:HE3	17	0.4
(1,2769)	1:A:519:ILE:HD13	1:A:523:LYS:HE3	17	0.4
(1,2759)	1:A:516:HIS:HB3	1:A:517:SER:H	9	0.4
(1,2728)	1:A:513:LEU:HA	1:A:514:ASP:HB3	18	0.4
(1,2721)	1:A:512:ARG:H	1:A:512:ARG:HG3	5	0.4
(1,2721)	1:A:512:ARG:H	1:A:512:ARG:HG3	7	0.4
(1,2700)	1:A:509:GLY:H	1:A:510:LEU:HB3	14	0.4
(1,2697)	1:A:507:LEU:HB3	1:A:508:SER:H	14	0.4
(1,2685)	1:A:502:ASP:HB3	1:A:503:THR:H	1	0.4
(1,2611)	1:A:490:LEU:HG	1:A:494:SER:HB3	11	0.4
(1,2611)	1:A:490:LEU:HG	1:A:494:SER:HB3	12	0.4
(1,2575)	1:A:484:ASP:HB3	1:A:485:CYS:H	5	0.4
(1,2575)	1:A:484:ASP:HB3	1:A:485:CYS:H	17	0.4
(1,2571)	1:A:484:ASP:H	1:A:484:ASP:HB3	7	0.4
(1,2561)	1:A:480:GLN:HB3	1:A:482:SER:H	15	0.4
(1,2559)	1:A:480:GLN:HB3	1:A:480:GLN:HE21	19	0.4
(1,2559)	1:A:480:GLN:HB3	1:A:480:GLN:HE22	19	0.4
(1,2559)	1:A:480:GLN:HB3	1:A:480:GLN:HE21	20	0.4
(1,2559)	1:A:480:GLN:HB3	1:A:480:GLN:HE22	20	0.4
(1,2553)	1:A:479:ARG:H	1:A:479:ARG:HB3	15	0.4
(1,2542)	1:A:475:SER:HB3	1:A:476:ASN:H	10	0.4
(1,2520)	1:A:470:ASN:H	1:A:470:ASN:HB3	16	0.4
(1,2520)	1:A:470:ASN:H	1:A:470:ASN:HB3	17	0.4
(1,2371)	1:A:436:ARG:HB3	1:A:436:ARG:HG3	20	0.4
(1,2369)	1:A:436:ARG:H	1:A:436:ARG:HB3	18	0.4
(1,2353)	1:A:431:PHE:HB3	1:A:433:VAL:H	5	0.4
(1,2342)	1:A:429:GLU:H	1:A:429:GLU:HG3	4	0.4
(1,2316)	1:A:420:GLY:HA2	1:A:524:VAL:HG11	14	0.4
(1,2316)	1:A:420:GLY:HA2	1:A:524:VAL:HG12	14	0.4
(1,2316)	1:A:420:GLY:HA2	1:A:524:VAL:HG13	14	0.4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2316)	1:A:420:GLY:HA2	1:A:524:VAL:HG21	14	0.4
(1,2316)	1:A:420:GLY:HA2	1:A:524:VAL:HG22	14	0.4
(1,2316)	1:A:420:GLY:HA2	1:A:524:VAL:HG23	14	0.4
(1,2255)	1:A:414:GLU:HB3	1:A:415:LYS:H	14	0.4
(1,2253)	1:A:414:GLU:HA	1:A:414:GLU:HG3	9	0.4
(1,2251)	1:A:414:GLU:H	1:A:414:GLU:HG3	16	0.4
(1,2225)	1:A:408:ILE:HG21	1:A:493:GLU:HB3	8	0.4
(1,2225)	1:A:408:ILE:HG22	1:A:493:GLU:HB3	8	0.4
(1,2225)	1:A:408:ILE:HG23	1:A:493:GLU:HB3	8	0.4
(1,2196)	1:A:401:HIS:HE1	1:A:406:GLU:HB3	14	0.4
(1,2188)	1:A:400:LEU:HB3	1:A:401:HIS:H	18	0.4
(1,2137)	1:A:392:GLN:HA	1:A:393:LYS:HB3	6	0.4
(1,2132)	1:A:388:SER:HA	1:A:388:SER:HB3	2	0.4
(1,2132)	1:A:388:SER:HA	1:A:388:SER:HB3	3	0.4
(1,2131)	1:A:388:SER:H	1:A:388:SER:HB3	17	0.4
(1,2131)	1:A:388:SER:H	1:A:388:SER:HB3	19	0.4
(1,2129)	1:A:387:GLU:HB3	1:A:390:SER:H	6	0.4
(1,1928)	1:A:415:LYS:HA	1:A:415:LYS:HD3	8	0.4
(1,1730)	1:A:531:HIS:HD2	1:A:532:ARG:HD3	2	0.4
(1,1717)	1:A:526:ASN:HA	1:A:529:LYS:HE3	10	0.4
(1,1709)	1:A:542:LYS:HB3	1:A:542:LYS:HE3	7	0.4
(1,1707)	1:A:542:LYS:HG3	1:A:542:LYS:HE3	5	0.4
(1,1707)	1:A:542:LYS:HG3	1:A:542:LYS:HE3	8	0.4
(1,1676)	1:A:416:LEU:HG	1:A:417:GLU:HG3	1	0.4
(1,1618)	1:A:463:ARG:HB3	1:A:506:LEU:HD11	13	0.4
(1,1618)	1:A:463:ARG:HB3	1:A:506:LEU:HD12	13	0.4
(1,1618)	1:A:463:ARG:HB3	1:A:506:LEU:HD13	13	0.4
(1,1611)	1:A:537:LYS:HD3	1:A:538:ALA:H	2	0.4
(1,1604)	1:A:542:LYS:HA	1:A:542:LYS:HD3	18	0.4
(1,1576)	1:A:462:CYS:HB3	1:A:506:LEU:HD11	7	0.4
(1,1576)	1:A:462:CYS:HB3	1:A:506:LEU:HD12	7	0.4
(1,1576)	1:A:462:CYS:HB3	1:A:506:LEU:HD13	7	0.4
(1,146)	1:A:508:SER:HB3	1:A:509:GLY:H	2	0.4
(1,1203)	1:A:471:GLN:HB3	1:A:472:ALA:HB1	2	0.4
(1,1203)	1:A:471:GLN:HB3	1:A:472:ALA:HB2	2	0.4
(1,1203)	1:A:471:GLN:HB3	1:A:472:ALA:HB3	2	0.4
(1,1203)	1:A:471:GLN:HB3	1:A:472:ALA:HB1	10	0.4
(1,1203)	1:A:471:GLN:HB3	1:A:472:ALA:HB2	10	0.4
(1,1203)	1:A:471:GLN:HB3	1:A:472:ALA:HB3	10	0.4
(1,789)	1:A:539:MET:HB3	1:A:540:TRP:H	13	0.39
(1,763)	1:A:393:LYS:HD3	1:A:394:PHE:H	14	0.39
(1,710)	1:A:466:LEU:HB3	1:A:469:VAL:H	17	0.39

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,600)	1:A:403:ARG:HB3	1:A:403:ARG:HE	8	0.39
(1,555)	1:A:542:LYS:H	1:A:542:LYS:HE3	15	0.39
(1,552)	1:A:542:LYS:H	1:A:542:LYS:HD3	1	0.39
(1,508)	1:A:403:ARG:HB3	1:A:404:ALA:H	6	0.39
(1,454)	1:A:496:PRO:HG3	1:A:497:ALA:H	5	0.39
(1,454)	1:A:496:PRO:HG3	1:A:497:ALA:H	10	0.39
(1,454)	1:A:496:PRO:HG3	1:A:497:ALA:H	17	0.39
(1,454)	1:A:496:PRO:HG3	1:A:497:ALA:H	20	0.39
(1,385)	1:A:539:MET:H	1:A:539:MET:HB3	1	0.39
(1,385)	1:A:539:MET:H	1:A:539:MET:HB3	3	0.39
(1,358)	1:A:387:GLU:HG3	1:A:390:SER:H	9	0.39
(1,2844)	1:A:544:GLN:HA	1:A:544:GLN:HG3	14	0.39
(1,2842)	1:A:544:GLN:H	1:A:544:GLN:HG3	5	0.39
(1,2840)	1:A:543:GLU:HA	1:A:543:GLU:HG3	8	0.39
(1,2840)	1:A:543:GLU:HA	1:A:543:GLU:HG3	9	0.39
(1,2825)	1:A:537:LYS:H	1:A:537:LYS:HB3	7	0.39
(1,2796)	1:A:527:THR:HA	1:A:529:LYS:HD3	14	0.39
(1,2759)	1:A:516:HIS:HB3	1:A:517:SER:H	5	0.39
(1,2721)	1:A:512:ARG:H	1:A:512:ARG:HG3	2	0.39
(1,2721)	1:A:512:ARG:H	1:A:512:ARG:HG3	8	0.39
(1,2710)	1:A:511:VAL:HA	1:A:512:ARG:HB3	13	0.39
(1,2702)	1:A:510:LEU:H	1:A:510:LEU:HB3	5	0.39
(1,2700)	1:A:509:GLY:H	1:A:510:LEU:HB3	12	0.39
(1,2697)	1:A:507:LEU:HB3	1:A:508:SER:H	3	0.39
(1,2685)	1:A:502:ASP:HB3	1:A:503:THR:H	18	0.39
(1,2648)	1:A:492:LEU:HD11	1:A:515:GLU:HG3	8	0.39
(1,2648)	1:A:492:LEU:HD12	1:A:515:GLU:HG3	8	0.39
(1,2648)	1:A:492:LEU:HD13	1:A:515:GLU:HG3	8	0.39
(1,2648)	1:A:492:LEU:HD21	1:A:515:GLU:HG3	8	0.39
(1,2648)	1:A:492:LEU:HD22	1:A:515:GLU:HG3	8	0.39
(1,2648)	1:A:492:LEU:HD23	1:A:515:GLU:HG3	8	0.39
(1,2641)	1:A:492:LEU:HB3	1:A:493:GLU:H	13	0.39
(1,2611)	1:A:490:LEU:HG	1:A:494:SER:HB3	18	0.39
(1,2571)	1:A:484:ASP:H	1:A:484:ASP:HB3	8	0.39
(1,2571)	1:A:484:ASP:H	1:A:484:ASP:HB3	17	0.39
(1,2560)	1:A:480:GLN:HB3	1:A:481:GLY:H	1	0.39
(1,2520)	1:A:470:ASN:H	1:A:470:ASN:HB3	9	0.39
(1,2508)	1:A:468:GLN:HA	1:A:468:GLN:HG3	19	0.39
(1,2502)	1:A:467:HIS:HA	1:A:470:ASN:HB3	16	0.39
(1,2472)	1:A:458:SER:HB3	1:A:459:ASN:H	2	0.39
(1,2409)	1:A:446:ILE:HG21	1:A:473:MET:HG3	19	0.39
(1,2409)	1:A:446:ILE:HG22	1:A:473:MET:HG3	19	0.39

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2409)	1:A:446:ILE:HG23	1:A:473:MET:HG3	19	0.39
(1,2377)	1:A:438:GLU:HB3	1:A:439:LEU:H	16	0.39
(1,2352)	1:A:431:PHE:HB3	1:A:432:GLN:H	18	0.39
(1,2346)	1:A:430:ASP:HB3	1:A:431:PHE:H	3	0.39
(1,2316)	1:A:420:GLY:HA2	1:A:524:VAL:HG11	13	0.39
(1,2316)	1:A:420:GLY:HA2	1:A:524:VAL:HG12	13	0.39
(1,2316)	1:A:420:GLY:HA2	1:A:524:VAL:HG13	13	0.39
(1,2316)	1:A:420:GLY:HA2	1:A:524:VAL:HG21	13	0.39
(1,2316)	1:A:420:GLY:HA2	1:A:524:VAL:HG22	13	0.39
(1,2316)	1:A:420:GLY:HA2	1:A:524:VAL:HG23	13	0.39
(1,2251)	1:A:414:GLU:H	1:A:414:GLU:HG3	17	0.39
(1,2225)	1:A:408:ILE:HG21	1:A:493:GLU:HB3	17	0.39
(1,2225)	1:A:408:ILE:HG22	1:A:493:GLU:HB3	17	0.39
(1,2225)	1:A:408:ILE:HG23	1:A:493:GLU:HB3	17	0.39
(1,2209)	1:A:406:GLU:H	1:A:406:GLU:HG3	12	0.39
(1,2200)	1:A:402:ALA:HB1	1:A:460:PHE:HB3	6	0.39
(1,2200)	1:A:402:ALA:HB2	1:A:460:PHE:HB3	6	0.39
(1,2200)	1:A:402:ALA:HB3	1:A:460:PHE:HB3	6	0.39
(1,2179)	1:A:398:VAL:HG11	1:A:449:SER:HB3	20	0.39
(1,2179)	1:A:398:VAL:HG12	1:A:449:SER:HB3	20	0.39
(1,2179)	1:A:398:VAL:HG13	1:A:449:SER:HB3	20	0.39
(1,2179)	1:A:398:VAL:HG21	1:A:449:SER:HB3	20	0.39
(1,2179)	1:A:398:VAL:HG22	1:A:449:SER:HB3	20	0.39
(1,2179)	1:A:398:VAL:HG23	1:A:449:SER:HB3	20	0.39
(1,2146)	1:A:393:LYS:HG3	1:A:394:PHE:H	12	0.39
(1,2132)	1:A:388:SER:HA	1:A:388:SER:HB3	4	0.39
(1,175)	1:A:474:MET:HB3	1:A:475:SER:H	17	0.39
(1,1742)	1:A:479:ARG:HG3	1:A:479:ARG:HD3	1	0.39
(1,1742)	1:A:479:ARG:HG3	1:A:479:ARG:HD3	2	0.39
(1,1716)	1:A:529:LYS:HB3	1:A:529:LYS:HE3	20	0.39
(1,1616)	1:A:415:LYS:HD3	1:A:520:PHE:HE1	11	0.39
(1,1616)	1:A:415:LYS:HD3	1:A:520:PHE:HE2	11	0.39
(1,146)	1:A:508:SER:HB3	1:A:509:GLY:H	1	0.39
(1,146)	1:A:508:SER:HB3	1:A:509:GLY:H	11	0.39
(1,1010)	1:A:454:LEU:HB3	1:A:489:PHE:H	4	0.39
(1,910)	1:A:417:GLU:HG3	1:A:418:ALA:H	17	0.38
(1,806)	1:A:434:HIS:H	1:A:438:GLU:HG3	11	0.38
(1,653)	1:A:479:ARG:HD3	1:A:480:GLN:H	12	0.38
(1,653)	1:A:479:ARG:HD3	1:A:480:GLN:H	15	0.38
(1,543)	1:A:462:CYS:HB3	1:A:463:ARG:H	5	0.38
(1,538)	1:A:501:SER:H	1:A:501:SER:HB3	12	0.38
(1,449)	1:A:543:GLU:HB3	1:A:544:GLN:H	17	0.38

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2838)	1:A:542:LYS:HG3	1:A:542:LYS:HE3	16	0.38
(1,2831)	1:A:539:MET:HG3	1:A:540:TRP:H	6	0.38
(1,2827)	1:A:537:LYS:HG3	1:A:537:LYS:HE3	5	0.38
(1,2796)	1:A:527:THR:HA	1:A:529:LYS:HD3	6	0.38
(1,2769)	1:A:519:ILE:HD11	1:A:523:LYS:HE3	14	0.38
(1,2769)	1:A:519:ILE:HD12	1:A:523:LYS:HE3	14	0.38
(1,2769)	1:A:519:ILE:HD13	1:A:523:LYS:HE3	14	0.38
(1,2760)	1:A:517:SER:HB3	1:A:518:GLN:H	13	0.38
(1,2759)	1:A:516:HIS:HB3	1:A:517:SER:H	2	0.38
(1,2759)	1:A:516:HIS:HB3	1:A:517:SER:H	3	0.38
(1,2729)	1:A:513:LEU:HA	1:A:523:LYS:HE3	3	0.38
(1,2728)	1:A:513:LEU:HA	1:A:514:ASP:HB3	15	0.38
(1,2714)	1:A:511:VAL:HG11	1:A:513:LEU:HB3	6	0.38
(1,2714)	1:A:511:VAL:HG12	1:A:513:LEU:HB3	6	0.38
(1,2714)	1:A:511:VAL:HG13	1:A:513:LEU:HB3	6	0.38
(1,2714)	1:A:511:VAL:HG21	1:A:513:LEU:HB3	6	0.38
(1,2714)	1:A:511:VAL:HG22	1:A:513:LEU:HB3	6	0.38
(1,2714)	1:A:511:VAL:HG23	1:A:513:LEU:HB3	6	0.38
(1,2714)	1:A:511:VAL:HG11	1:A:513:LEU:HB3	9	0.38
(1,2714)	1:A:511:VAL:HG12	1:A:513:LEU:HB3	9	0.38
(1,2714)	1:A:511:VAL:HG13	1:A:513:LEU:HB3	9	0.38
(1,2714)	1:A:511:VAL:HG21	1:A:513:LEU:HB3	9	0.38
(1,2714)	1:A:511:VAL:HG22	1:A:513:LEU:HB3	9	0.38
(1,2714)	1:A:511:VAL:HG23	1:A:513:LEU:HB3	9	0.38
(1,2697)	1:A:507:LEU:HB3	1:A:508:SER:H	11	0.38
(1,2656)	1:A:493:GLU:HA	1:A:493:GLU:HG3	19	0.38
(1,2648)	1:A:492:LEU:HD11	1:A:515:GLU:HG3	2	0.38
(1,2648)	1:A:492:LEU:HD12	1:A:515:GLU:HG3	2	0.38
(1,2648)	1:A:492:LEU:HD13	1:A:515:GLU:HG3	2	0.38
(1,2648)	1:A:492:LEU:HD21	1:A:515:GLU:HG3	2	0.38
(1,2648)	1:A:492:LEU:HD22	1:A:515:GLU:HG3	2	0.38
(1,2648)	1:A:492:LEU:HD23	1:A:515:GLU:HG3	2	0.38
(1,2638)	1:A:492:LEU:H	1:A:515:GLU:HG3	3	0.38
(1,2611)	1:A:490:LEU:HG	1:A:494:SER:HB3	2	0.38
(1,2571)	1:A:484:ASP:H	1:A:484:ASP:HB3	11	0.38
(1,2571)	1:A:484:ASP:H	1:A:484:ASP:HB3	20	0.38
(1,2569)	1:A:483:PRO:HB3	1:A:485:CYS:H	15	0.38
(1,2560)	1:A:480:GLN:HB3	1:A:481:GLY:H	12	0.38
(1,2553)	1:A:479:ARG:H	1:A:479:ARG:HB3	16	0.38
(1,2542)	1:A:475:SER:HB3	1:A:476:ASN:H	19	0.38
(1,2537)	1:A:473:MET:HG3	1:A:474:MET:H	14	0.38
(1,2533)	1:A:473:MET:H	1:A:473:MET:HB3	7	0.38

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2524)	1:A:471:GLN:HA	1:A:471:GLN:HG3	10	0.38
(1,2524)	1:A:471:GLN:HA	1:A:471:GLN:HG3	20	0.38
(1,2520)	1:A:470:ASN:H	1:A:470:ASN:HB3	3	0.38
(1,2520)	1:A:470:ASN:H	1:A:470:ASN:HB3	12	0.38
(1,2502)	1:A:467:HIS:HA	1:A:470:ASN:HB3	1	0.38
(1,2502)	1:A:467:HIS:HA	1:A:470:ASN:HB3	10	0.38
(1,249)	1:A:407:HIS:HB3	1:A:410:LEU:H	19	0.38
(1,2437)	1:A:454:LEU:H	1:A:489:PHE:HB3	5	0.38
(1,2412)	1:A:446:ILE:HG13	1:A:473:MET:HE1	18	0.38
(1,2412)	1:A:446:ILE:HG13	1:A:473:MET:HE2	18	0.38
(1,2412)	1:A:446:ILE:HG13	1:A:473:MET:HE3	18	0.38
(1,2372)	1:A:436:ARG:HB3	1:A:436:ARG:HD3	14	0.38
(1,2372)	1:A:436:ARG:HB3	1:A:436:ARG:HD3	16	0.38
(1,2350)	1:A:431:PHE:HA	1:A:432:GLN:HB3	13	0.38
(1,2346)	1:A:430:ASP:HB3	1:A:431:PHE:H	13	0.38
(1,2344)	1:A:430:ASP:H	1:A:430:ASP:HB3	8	0.38
(1,2344)	1:A:430:ASP:H	1:A:430:ASP:HB3	14	0.38
(1,2342)	1:A:429:GLU:H	1:A:429:GLU:HG3	6	0.38
(1,2255)	1:A:414:GLU:HB3	1:A:415:LYS:H	4	0.38
(1,2252)	1:A:414:GLU:H	1:A:423:ASP:HB3	15	0.38
(1,2209)	1:A:406:GLU:H	1:A:406:GLU:HG3	16	0.38
(1,2161)	1:A:397:PHE:HB3	1:A:398:VAL:H	3	0.38
(1,2132)	1:A:388:SER:HA	1:A:388:SER:HB3	11	0.38
(1,2131)	1:A:388:SER:H	1:A:388:SER:HB3	16	0.38
(1,1920)	1:A:390:SER:HA	1:A:390:SER:HB3	7	0.38
(1,1920)	1:A:390:SER:HA	1:A:390:SER:HB3	14	0.38
(1,1742)	1:A:479:ARG:HG3	1:A:479:ARG:HD3	6	0.38
(1,1742)	1:A:479:ARG:HG3	1:A:479:ARG:HD3	9	0.38
(1,1742)	1:A:479:ARG:HG3	1:A:479:ARG:HD3	16	0.38
(1,1742)	1:A:479:ARG:HG3	1:A:479:ARG:HD3	17	0.38
(1,1742)	1:A:479:ARG:HG3	1:A:479:ARG:HD3	20	0.38
(1,1684)	1:A:523:LYS:HB3	1:A:526:ASN:HB3	4	0.38
(1,146)	1:A:508:SER:HB3	1:A:509:GLY:H	9	0.38
(1,1432)	1:A:462:CYS:HB3	1:A:506:LEU:HD21	16	0.38
(1,1432)	1:A:462:CYS:HB3	1:A:506:LEU:HD22	16	0.38
(1,1432)	1:A:462:CYS:HB3	1:A:506:LEU:HD23	16	0.38
(1,1332)	1:A:398:VAL:HG11	1:A:449:SER:HB3	11	0.38
(1,1332)	1:A:398:VAL:HG12	1:A:449:SER:HB3	11	0.38
(1,1332)	1:A:398:VAL:HG13	1:A:449:SER:HB3	11	0.38
(1,1203)	1:A:471:GLN:HB3	1:A:472:ALA:HB1	8	0.38
(1,1203)	1:A:471:GLN:HB3	1:A:472:ALA:HB2	8	0.38
(1,1203)	1:A:471:GLN:HB3	1:A:472:ALA:HB3	8	0.38

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1203)	1:A:471:GLN:HB3	1:A:472:ALA:HB1	16	0.38
(1,1203)	1:A:471:GLN:HB3	1:A:472:ALA:HB2	16	0.38
(1,1203)	1:A:471:GLN:HB3	1:A:472:ALA:HB3	16	0.38
(1,789)	1:A:539:MET:HB3	1:A:540:TRP:H	2	0.37
(1,68)	1:A:518:GLN:HG3	1:A:519:ILE:H	19	0.37
(1,652)	1:A:480:GLN:H	1:A:480:GLN:HG3	2	0.37
(1,553)	1:A:541:ARG:HB3	1:A:542:LYS:H	18	0.37
(1,523)	1:A:529:LYS:H	1:A:529:LYS:HE3	4	0.37
(1,523)	1:A:529:LYS:H	1:A:529:LYS:HE3	17	0.37
(1,454)	1:A:496:PRO:HG3	1:A:497:ALA:H	3	0.37
(1,385)	1:A:539:MET:H	1:A:539:MET:HB3	6	0.37
(1,385)	1:A:539:MET:H	1:A:539:MET:HB3	16	0.37
(1,361)	1:A:387:GLU:HG3	1:A:388:SER:H	14	0.37
(1,2838)	1:A:542:LYS:HG3	1:A:542:LYS:HE3	9	0.37
(1,2836)	1:A:541:ARG:HG3	1:A:541:ARG:HE	11	0.37
(1,2828)	1:A:537:LYS:HG3	1:A:538:ALA:H	7	0.37
(1,2825)	1:A:537:LYS:H	1:A:537:LYS:HB3	16	0.37
(1,2796)	1:A:527:THR:HA	1:A:529:LYS:HD3	9	0.37
(1,2760)	1:A:517:SER:HB3	1:A:518:GLN:H	10	0.37
(1,2759)	1:A:516:HIS:HB3	1:A:517:SER:H	1	0.37
(1,2759)	1:A:516:HIS:HB3	1:A:517:SER:H	15	0.37
(1,2759)	1:A:516:HIS:HB3	1:A:517:SER:H	19	0.37
(1,2729)	1:A:513:LEU:HA	1:A:523:LYS:HE3	1	0.37
(1,2728)	1:A:513:LEU:HA	1:A:514:ASP:HB3	5	0.37
(1,2697)	1:A:507:LEU:HB3	1:A:508:SER:H	2	0.37
(1,2697)	1:A:507:LEU:HB3	1:A:508:SER:H	7	0.37
(1,2656)	1:A:493:GLU:HA	1:A:493:GLU:HG3	7	0.37
(1,2656)	1:A:493:GLU:HA	1:A:493:GLU:HG3	16	0.37
(1,2656)	1:A:493:GLU:HA	1:A:493:GLU:HG3	17	0.37
(1,2648)	1:A:492:LEU:HD11	1:A:515:GLU:HG3	20	0.37
(1,2648)	1:A:492:LEU:HD12	1:A:515:GLU:HG3	20	0.37
(1,2648)	1:A:492:LEU:HD13	1:A:515:GLU:HG3	20	0.37
(1,2648)	1:A:492:LEU:HD21	1:A:515:GLU:HG3	20	0.37
(1,2648)	1:A:492:LEU:HD22	1:A:515:GLU:HG3	20	0.37
(1,2648)	1:A:492:LEU:HD23	1:A:515:GLU:HG3	20	0.37
(1,2609)	1:A:490:LEU:HB3	1:A:512:ARG:HD3	17	0.37
(1,2563)	1:A:480:GLN:HG3	1:A:480:GLN:HE21	7	0.37
(1,2563)	1:A:480:GLN:HG3	1:A:480:GLN:HE22	7	0.37
(1,2559)	1:A:480:GLN:HB3	1:A:480:GLN:HE21	6	0.37
(1,2559)	1:A:480:GLN:HB3	1:A:480:GLN:HE22	6	0.37
(1,2553)	1:A:479:ARG:H	1:A:479:ARG:HB3	6	0.37
(1,2538)	1:A:473:MET:HE1	1:A:485:CYS:HB3	2	0.37

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2538)	1:A:473:MET:HE2	1:A:485:CYS:HB3	2	0.37
(1,2538)	1:A:473:MET:HE3	1:A:485:CYS:HB3	2	0.37
(1,2538)	1:A:473:MET:HE1	1:A:485:CYS:HB3	4	0.37
(1,2538)	1:A:473:MET:HE2	1:A:485:CYS:HB3	4	0.37
(1,2538)	1:A:473:MET:HE3	1:A:485:CYS:HB3	4	0.37
(1,2524)	1:A:471:GLN:HA	1:A:471:GLN:HG3	16	0.37
(1,2520)	1:A:470:ASN:H	1:A:470:ASN:HB3	5	0.37
(1,2520)	1:A:470:ASN:H	1:A:470:ASN:HB3	10	0.37
(1,2520)	1:A:470:ASN:H	1:A:470:ASN:HB3	13	0.37
(1,2520)	1:A:470:ASN:H	1:A:470:ASN:HB3	19	0.37
(1,2472)	1:A:458:SER:HB3	1:A:459:ASN:H	7	0.37
(1,2472)	1:A:458:SER:HB3	1:A:459:ASN:H	11	0.37
(1,2472)	1:A:458:SER:HB3	1:A:459:ASN:H	15	0.37
(1,2372)	1:A:436:ARG:HB3	1:A:436:ARG:HD3	15	0.37
(1,2342)	1:A:429:GLU:H	1:A:429:GLU:HG3	17	0.37
(1,2342)	1:A:429:GLU:H	1:A:429:GLU:HG3	20	0.37
(1,2263)	1:A:415:LYS:HE3	1:A:520:PHE:HZ	12	0.37
(1,2252)	1:A:414:GLU:H	1:A:423:ASP:HB3	20	0.37
(1,2161)	1:A:397:PHE:HB3	1:A:398:VAL:H	14	0.37
(1,2152)	1:A:395:TYR:HB3	1:A:397:PHE:HA	1	0.37
(1,2144)	1:A:393:LYS:HB3	1:A:393:LYS:HE3	12	0.37
(1,2134)	1:A:392:GLN:H	1:A:392:GLN:HG3	3	0.37
(1,2134)	1:A:392:GLN:H	1:A:392:GLN:HG3	10	0.37
(1,2132)	1:A:388:SER:HA	1:A:388:SER:HB3	5	0.37
(1,2132)	1:A:388:SER:HA	1:A:388:SER:HB3	8	0.37
(1,2132)	1:A:388:SER:HA	1:A:388:SER:HB3	12	0.37
(1,2132)	1:A:388:SER:HA	1:A:388:SER:HB3	13	0.37
(1,2027)	1:A:389:SER:HB3	1:A:390:SER:H	6	0.37
(1,1964)	1:A:540:TRP:HA	1:A:541:ARG:HB3	12	0.37
(1,1920)	1:A:390:SER:HA	1:A:390:SER:HB3	1	0.37
(1,1920)	1:A:390:SER:HA	1:A:390:SER:HB3	2	0.37
(1,1920)	1:A:390:SER:HA	1:A:390:SER:HB3	5	0.37
(1,1920)	1:A:390:SER:HA	1:A:390:SER:HB3	16	0.37
(1,1853)	1:A:436:ARG:HA	1:A:436:ARG:HG3	12	0.37
(1,1742)	1:A:479:ARG:HG3	1:A:479:ARG:HD3	3	0.37
(1,1742)	1:A:479:ARG:HG3	1:A:479:ARG:HD3	12	0.37
(1,1716)	1:A:529:LYS:HB3	1:A:529:LYS:HE3	3	0.37
(1,1616)	1:A:415:LYS:HD3	1:A:520:PHE:HE1	2	0.37
(1,1616)	1:A:415:LYS:HD3	1:A:520:PHE:HE2	2	0.37
(1,1605)	1:A:539:MET:HA	1:A:542:LYS:HD3	5	0.37
(1,1604)	1:A:542:LYS:HA	1:A:542:LYS:HD3	1	0.37
(1,1592)	1:A:466:LEU:HB3	1:A:467:HIS:HB3	17	0.37

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1532)	1:A:490:LEU:HD21	1:A:512:ARG:HD3	17	0.37
(1,1532)	1:A:490:LEU:HD22	1:A:512:ARG:HD3	17	0.37
(1,1532)	1:A:490:LEU:HD23	1:A:512:ARG:HD3	17	0.37
(1,1332)	1:A:398:VAL:HG11	1:A:449:SER:HB3	7	0.37
(1,1332)	1:A:398:VAL:HG12	1:A:449:SER:HB3	7	0.37
(1,1332)	1:A:398:VAL:HG13	1:A:449:SER:HB3	7	0.37
(1,1275)	1:A:398:VAL:HG21	1:A:449:SER:HB3	5	0.37
(1,1275)	1:A:398:VAL:HG22	1:A:449:SER:HB3	5	0.37
(1,1275)	1:A:398:VAL:HG23	1:A:449:SER:HB3	5	0.37
(1,1203)	1:A:471:GLN:HB3	1:A:472:ALA:HB1	18	0.37
(1,1203)	1:A:471:GLN:HB3	1:A:472:ALA:HB2	18	0.37
(1,1203)	1:A:471:GLN:HB3	1:A:472:ALA:HB3	18	0.37
(1,1198)	1:A:532:ARG:HB3	1:A:535:ALA:HB1	16	0.37
(1,1198)	1:A:532:ARG:HB3	1:A:535:ALA:HB2	16	0.37
(1,1198)	1:A:532:ARG:HB3	1:A:535:ALA:HB3	16	0.37
(1,910)	1:A:417:GLU:HG3	1:A:418:ALA:H	8	0.36
(1,786)	1:A:471:GLN:HB3	1:A:472:ALA:H	5	0.36
(1,763)	1:A:393:LYS:HD3	1:A:394:PHE:H	11	0.36
(1,652)	1:A:480:GLN:H	1:A:480:GLN:HG3	5	0.36
(1,553)	1:A:541:ARG:HB3	1:A:542:LYS:H	1	0.36
(1,538)	1:A:501:SER:H	1:A:501:SER:HB3	14	0.36
(1,524)	1:A:529:LYS:H	1:A:532:ARG:HD3	14	0.36
(1,454)	1:A:496:PRO:HG3	1:A:497:ALA:H	1	0.36
(1,385)	1:A:539:MET:H	1:A:539:MET:HB3	17	0.36
(1,337)	1:A:501:SER:HB3	1:A:503:THR:H	13	0.36
(1,2840)	1:A:543:GLU:HA	1:A:543:GLU:HG3	18	0.36
(1,2821)	1:A:534:GLN:H	1:A:534:GLN:HG3	18	0.36
(1,2821)	1:A:534:GLN:H	1:A:534:GLN:HG3	20	0.36
(1,2814)	1:A:533:LEU:H	1:A:533:LEU:HB3	6	0.36
(1,2814)	1:A:533:LEU:H	1:A:533:LEU:HB3	14	0.36
(1,2769)	1:A:519:ILE:HD11	1:A:523:LYS:HE3	4	0.36
(1,2769)	1:A:519:ILE:HD12	1:A:523:LYS:HE3	4	0.36
(1,2769)	1:A:519:ILE:HD13	1:A:523:LYS:HE3	4	0.36
(1,2769)	1:A:519:ILE:HD11	1:A:523:LYS:HE3	5	0.36
(1,2769)	1:A:519:ILE:HD12	1:A:523:LYS:HE3	5	0.36
(1,2769)	1:A:519:ILE:HD13	1:A:523:LYS:HE3	5	0.36
(1,2759)	1:A:516:HIS:HB3	1:A:517:SER:H	10	0.36
(1,2759)	1:A:516:HIS:HB3	1:A:517:SER:H	11	0.36
(1,2754)	1:A:514:ASP:HB3	1:A:517:SER:HB3	16	0.36
(1,2721)	1:A:512:ARG:H	1:A:512:ARG:HG3	4	0.36
(1,2721)	1:A:512:ARG:H	1:A:512:ARG:HG3	11	0.36
(1,2721)	1:A:512:ARG:H	1:A:512:ARG:HG3	12	0.36

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2714)	1:A:511:VAL:HG11	1:A:513:LEU:HB3	13	0.36
(1,2714)	1:A:511:VAL:HG12	1:A:513:LEU:HB3	13	0.36
(1,2714)	1:A:511:VAL:HG13	1:A:513:LEU:HB3	13	0.36
(1,2714)	1:A:511:VAL:HG21	1:A:513:LEU:HB3	13	0.36
(1,2714)	1:A:511:VAL:HG22	1:A:513:LEU:HB3	13	0.36
(1,2714)	1:A:511:VAL:HG23	1:A:513:LEU:HB3	13	0.36
(1,2669)	1:A:495:SER:HB3	1:A:498:GLN:HB3	17	0.36
(1,2656)	1:A:493:GLU:HA	1:A:493:GLU:HG3	4	0.36
(1,2648)	1:A:492:LEU:HD11	1:A:515:GLU:HG3	3	0.36
(1,2648)	1:A:492:LEU:HD12	1:A:515:GLU:HG3	3	0.36
(1,2648)	1:A:492:LEU:HD13	1:A:515:GLU:HG3	3	0.36
(1,2648)	1:A:492:LEU:HD21	1:A:515:GLU:HG3	3	0.36
(1,2648)	1:A:492:LEU:HD22	1:A:515:GLU:HG3	3	0.36
(1,2648)	1:A:492:LEU:HD23	1:A:515:GLU:HG3	3	0.36
(1,2575)	1:A:484:ASP:HB3	1:A:485:CYS:H	2	0.36
(1,2575)	1:A:484:ASP:HB3	1:A:485:CYS:H	8	0.36
(1,2575)	1:A:484:ASP:HB3	1:A:485:CYS:H	11	0.36
(1,2533)	1:A:473:MET:H	1:A:473:MET:HB3	6	0.36
(1,2528)	1:A:471:GLN:HG3	1:A:471:GLN:HE21	15	0.36
(1,2528)	1:A:471:GLN:HG3	1:A:471:GLN:HE22	15	0.36
(1,2526)	1:A:471:GLN:HB3	1:A:471:GLN:HG3	12	0.36
(1,2526)	1:A:471:GLN:HB3	1:A:471:GLN:HG3	14	0.36
(1,2524)	1:A:471:GLN:HA	1:A:471:GLN:HG3	1	0.36
(1,2524)	1:A:471:GLN:HA	1:A:471:GLN:HG3	2	0.36
(1,2524)	1:A:471:GLN:HA	1:A:471:GLN:HG3	4	0.36
(1,2524)	1:A:471:GLN:HA	1:A:471:GLN:HG3	7	0.36
(1,2524)	1:A:471:GLN:HA	1:A:471:GLN:HG3	13	0.36
(1,2524)	1:A:471:GLN:HA	1:A:471:GLN:HG3	18	0.36
(1,2502)	1:A:467:HIS:HA	1:A:470:ASN:HB3	15	0.36
(1,249)	1:A:407:HIS:HB3	1:A:410:LEU:H	6	0.36
(1,2374)	1:A:438:GLU:H	1:A:438:GLU:HB3	8	0.36
(1,2372)	1:A:436:ARG:HB3	1:A:436:ARG:HD3	3	0.36
(1,2369)	1:A:436:ARG:H	1:A:436:ARG:HB3	8	0.36
(1,2369)	1:A:436:ARG:H	1:A:436:ARG:HB3	10	0.36
(1,2369)	1:A:436:ARG:H	1:A:436:ARG:HB3	16	0.36
(1,2367)	1:A:434:HIS:HB3	1:A:435:GLY:H	7	0.36
(1,2350)	1:A:431:PHE:HA	1:A:432:GLN:HB3	5	0.36
(1,2346)	1:A:430:ASP:HB3	1:A:431:PHE:H	5	0.36
(1,2346)	1:A:430:ASP:HB3	1:A:431:PHE:H	10	0.36
(1,2255)	1:A:414:GLU:HB3	1:A:415:LYS:H	11	0.36
(1,2209)	1:A:406:GLU:H	1:A:406:GLU:HG3	9	0.36
(1,2196)	1:A:401:HIS:HE1	1:A:406:GLU:HB3	4	0.36

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2137)	1:A:392:GLN:HA	1:A:393:LYS:HB3	3	0.36
(1,2134)	1:A:392:GLN:H	1:A:392:GLN:HG3	1	0.36
(1,2134)	1:A:392:GLN:H	1:A:392:GLN:HG3	2	0.36
(1,2134)	1:A:392:GLN:H	1:A:392:GLN:HG3	9	0.36
(1,2134)	1:A:392:GLN:H	1:A:392:GLN:HG3	19	0.36
(1,2126)	1:A:529:LYS:HE3	1:A:531:HIS:HE1	15	0.36
(1,2126)	1:A:529:LYS:HE3	1:A:531:HIS:HE1	17	0.36
(1,2052)	1:A:462:CYS:HB3	1:A:503:THR:HA	11	0.36
(1,2007)	1:A:462:CYS:HA	1:A:466:LEU:HB3	7	0.36
(1,1920)	1:A:390:SER:HA	1:A:390:SER:HB3	9	0.36
(1,1920)	1:A:390:SER:HA	1:A:390:SER:HB3	10	0.36
(1,1742)	1:A:479:ARG:HG3	1:A:479:ARG:HD3	11	0.36
(1,1742)	1:A:479:ARG:HG3	1:A:479:ARG:HD3	19	0.36
(1,1740)	1:A:436:ARG:HA	1:A:436:ARG:HD3	4	0.36
(1,1728)	1:A:532:ARG:HB3	1:A:532:ARG:HD3	2	0.36
(1,1716)	1:A:529:LYS:HB3	1:A:529:LYS:HE3	12	0.36
(1,1684)	1:A:523:LYS:HB3	1:A:526:ASN:HB3	5	0.36
(1,1611)	1:A:537:LYS:HD3	1:A:538:ALA:H	7	0.36
(1,146)	1:A:508:SER:HB3	1:A:509:GLY:H	8	0.36
(1,812)	1:A:390:SER:HB3	1:A:391:GLU:H	19	0.35
(1,68)	1:A:518:GLN:HG3	1:A:519:ILE:H	11	0.35
(1,676)	1:A:436:ARG:H	1:A:436:ARG:HG3	12	0.35
(1,652)	1:A:480:GLN:H	1:A:480:GLN:HG3	3	0.35
(1,600)	1:A:403:ARG:HB3	1:A:403:ARG:HE	3	0.35
(1,600)	1:A:403:ARG:HB3	1:A:403:ARG:HE	13	0.35
(1,561)	1:A:543:GLU:HB3	1:A:545:ASP:H	14	0.35
(1,553)	1:A:541:ARG:HB3	1:A:542:LYS:H	10	0.35
(1,543)	1:A:462:CYS:HB3	1:A:463:ARG:H	16	0.35
(1,536)	1:A:543:GLU:H	1:A:543:GLU:HB3	19	0.35
(1,535)	1:A:542:LYS:HB3	1:A:543:GLU:H	17	0.35
(1,508)	1:A:403:ARG:HB3	1:A:404:ALA:H	2	0.35
(1,454)	1:A:496:PRO:HG3	1:A:497:ALA:H	2	0.35
(1,454)	1:A:496:PRO:HG3	1:A:497:ALA:H	7	0.35
(1,454)	1:A:496:PRO:HG3	1:A:497:ALA:H	8	0.35
(1,454)	1:A:496:PRO:HG3	1:A:497:ALA:H	11	0.35
(1,454)	1:A:496:PRO:HG3	1:A:497:ALA:H	13	0.35
(1,421)	1:A:466:LEU:HB3	1:A:468:GLN:H	19	0.35
(1,385)	1:A:539:MET:H	1:A:539:MET:HB3	9	0.35
(1,385)	1:A:539:MET:H	1:A:539:MET:HB3	13	0.35
(1,2803)	1:A:529:LYS:HA	1:A:529:LYS:HD3	19	0.35
(1,2769)	1:A:519:ILE:HD11	1:A:523:LYS:HE3	13	0.35
(1,2769)	1:A:519:ILE:HD12	1:A:523:LYS:HE3	13	0.35

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2769)	1:A:519:ILE:HD13	1:A:523:LYS:HE3	13	0.35
(1,2769)	1:A:519:ILE:HD11	1:A:523:LYS:HE3	15	0.35
(1,2769)	1:A:519:ILE:HD12	1:A:523:LYS:HE3	15	0.35
(1,2769)	1:A:519:ILE:HD13	1:A:523:LYS:HE3	15	0.35
(1,2769)	1:A:519:ILE:HD11	1:A:523:LYS:HE3	19	0.35
(1,2769)	1:A:519:ILE:HD12	1:A:523:LYS:HE3	19	0.35
(1,2769)	1:A:519:ILE:HD13	1:A:523:LYS:HE3	19	0.35
(1,2758)	1:A:515:GLU:HG3	1:A:520:PHE:HE1	5	0.35
(1,2758)	1:A:515:GLU:HG3	1:A:520:PHE:HE2	5	0.35
(1,2741)	1:A:513:LEU:HD11	1:A:523:LYS:HE3	3	0.35
(1,2741)	1:A:513:LEU:HD12	1:A:523:LYS:HE3	3	0.35
(1,2741)	1:A:513:LEU:HD13	1:A:523:LYS:HE3	3	0.35
(1,2741)	1:A:513:LEU:HD21	1:A:523:LYS:HE3	3	0.35
(1,2741)	1:A:513:LEU:HD22	1:A:523:LYS:HE3	3	0.35
(1,2741)	1:A:513:LEU:HD23	1:A:523:LYS:HE3	3	0.35
(1,2723)	1:A:512:ARG:HB3	1:A:512:ARG:HD3	1	0.35
(1,2721)	1:A:512:ARG:H	1:A:512:ARG:HG3	14	0.35
(1,2702)	1:A:510:LEU:H	1:A:510:LEU:HB3	7	0.35
(1,2702)	1:A:510:LEU:H	1:A:510:LEU:HB3	12	0.35
(1,2681)	1:A:500:SER:H	1:A:500:SER:HB3	6	0.35
(1,2656)	1:A:493:GLU:HA	1:A:493:GLU:HG3	3	0.35
(1,2656)	1:A:493:GLU:HA	1:A:493:GLU:HG3	14	0.35
(1,2638)	1:A:492:LEU:H	1:A:515:GLU:HG3	2	0.35
(1,2575)	1:A:484:ASP:HB3	1:A:485:CYS:H	7	0.35
(1,2558)	1:A:480:GLN:H	1:A:480:GLN:HB3	7	0.35
(1,2528)	1:A:471:GLN:HG3	1:A:471:GLN:HE21	16	0.35
(1,2528)	1:A:471:GLN:HG3	1:A:471:GLN:HE22	16	0.35
(1,2526)	1:A:471:GLN:HB3	1:A:471:GLN:HG3	11	0.35
(1,2524)	1:A:471:GLN:HA	1:A:471:GLN:HG3	8	0.35
(1,2524)	1:A:471:GLN:HA	1:A:471:GLN:HG3	17	0.35
(1,2520)	1:A:470:ASN:H	1:A:470:ASN:HB3	1	0.35
(1,2520)	1:A:470:ASN:H	1:A:470:ASN:HB3	2	0.35
(1,2520)	1:A:470:ASN:H	1:A:470:ASN:HB3	7	0.35
(1,2520)	1:A:470:ASN:H	1:A:470:ASN:HB3	14	0.35
(1,2499)	1:A:466:LEU:HD11	1:A:467:HIS:HB3	18	0.35
(1,2499)	1:A:466:LEU:HD12	1:A:467:HIS:HB3	18	0.35
(1,2499)	1:A:466:LEU:HD13	1:A:467:HIS:HB3	18	0.35
(1,2499)	1:A:466:LEU:HD21	1:A:467:HIS:HB3	18	0.35
(1,2499)	1:A:466:LEU:HD22	1:A:467:HIS:HB3	18	0.35
(1,2499)	1:A:466:LEU:HD23	1:A:467:HIS:HB3	18	0.35
(1,249)	1:A:407:HIS:HB3	1:A:410:LEU:H	4	0.35
(1,249)	1:A:407:HIS:HB3	1:A:410:LEU:H	17	0.35

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2472)	1:A:458:SER:HB3	1:A:459:ASN:H	20	0.35
(1,2417)	1:A:448:HIS:H	1:A:448:HIS:HB3	18	0.35
(1,2377)	1:A:438:GLU:HB3	1:A:439:LEU:H	2	0.35
(1,2377)	1:A:438:GLU:HB3	1:A:439:LEU:H	4	0.35
(1,2372)	1:A:436:ARG:HB3	1:A:436:ARG:HD3	11	0.35
(1,2372)	1:A:436:ARG:HB3	1:A:436:ARG:HD3	19	0.35
(1,2369)	1:A:436:ARG:H	1:A:436:ARG:HB3	19	0.35
(1,2316)	1:A:420:GLY:HA2	1:A:524:VAL:HG11	18	0.35
(1,2316)	1:A:420:GLY:HA2	1:A:524:VAL:HG12	18	0.35
(1,2316)	1:A:420:GLY:HA2	1:A:524:VAL:HG13	18	0.35
(1,2316)	1:A:420:GLY:HA2	1:A:524:VAL:HG21	18	0.35
(1,2316)	1:A:420:GLY:HA2	1:A:524:VAL:HG22	18	0.35
(1,2316)	1:A:420:GLY:HA2	1:A:524:VAL:HG23	18	0.35
(1,2252)	1:A:414:GLU:H	1:A:423:ASP:HB3	3	0.35
(1,2196)	1:A:401:HIS:HE1	1:A:406:GLU:HB3	12	0.35
(1,2134)	1:A:392:GLN:H	1:A:392:GLN:HG3	11	0.35
(1,2128)	1:A:387:GLU:HB3	1:A:388:SER:H	18	0.35
(1,2027)	1:A:389:SER:HB3	1:A:390:SER:H	4	0.35
(1,2027)	1:A:389:SER:HB3	1:A:390:SER:H	8	0.35
(1,1964)	1:A:540:TRP:HA	1:A:541:ARG:HB3	20	0.35
(1,1920)	1:A:390:SER:HA	1:A:390:SER:HB3	6	0.35
(1,1920)	1:A:390:SER:HA	1:A:390:SER:HB3	8	0.35
(1,1920)	1:A:390:SER:HA	1:A:390:SER:HB3	18	0.35
(1,1920)	1:A:390:SER:HA	1:A:390:SER:HB3	19	0.35
(1,1920)	1:A:390:SER:HA	1:A:390:SER:HB3	20	0.35
(1,1742)	1:A:479:ARG:HG3	1:A:479:ARG:HD3	4	0.35
(1,1742)	1:A:479:ARG:HG3	1:A:479:ARG:HD3	15	0.35
(1,1729)	1:A:532:ARG:HA	1:A:532:ARG:HD3	14	0.35
(1,1718)	1:A:536:ARG:HB3	1:A:536:ARG:HD3	17	0.35
(1,1718)	1:A:536:ARG:HB3	1:A:536:ARG:HD3	18	0.35
(1,1607)	1:A:537:LYS:HA	1:A:537:LYS:HD3	18	0.35
(1,1605)	1:A:539:MET:HA	1:A:542:LYS:HD3	8	0.35
(1,1603)	1:A:536:ARG:HB3	1:A:537:LYS:H	3	0.35
(1,1592)	1:A:466:LEU:HB3	1:A:467:HIS:HB3	1	0.35
(1,1571)	1:A:479:ARG:H	1:A:479:ARG:HG3	6	0.35
(1,1203)	1:A:471:GLN:HB3	1:A:472:ALA:HB1	6	0.35
(1,1203)	1:A:471:GLN:HB3	1:A:472:ALA:HB2	6	0.35
(1,1203)	1:A:471:GLN:HB3	1:A:472:ALA:HB3	6	0.35
(1,1198)	1:A:532:ARG:HB3	1:A:535:ALA:HB1	7	0.35
(1,1198)	1:A:532:ARG:HB3	1:A:535:ALA:HB2	7	0.35
(1,1198)	1:A:532:ARG:HB3	1:A:535:ALA:HB3	7	0.35
(1,883)	1:A:523:LYS:HB3	1:A:524:VAL:H	5	0.34

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,812)	1:A:390:SER:HB3	1:A:391:GLU:H	8	0.34
(1,699)	1:A:541:ARG:HB3	1:A:541:ARG:HE	19	0.34
(1,600)	1:A:403:ARG:HB3	1:A:403:ARG:HE	9	0.34
(1,600)	1:A:403:ARG:HB3	1:A:403:ARG:HE	16	0.34
(1,579)	1:A:532:ARG:HB3	1:A:533:LEU:H	17	0.34
(1,561)	1:A:543:GLU:HB3	1:A:545:ASP:H	2	0.34
(1,543)	1:A:462:CYS:HB3	1:A:463:ARG:H	14	0.34
(1,543)	1:A:462:CYS:HB3	1:A:463:ARG:H	18	0.34
(1,535)	1:A:542:LYS:HB3	1:A:543:GLU:H	19	0.34
(1,454)	1:A:496:PRO:HG3	1:A:497:ALA:H	19	0.34
(1,2842)	1:A:544:GLN:H	1:A:544:GLN:HG3	15	0.34
(1,2840)	1:A:543:GLU:HA	1:A:543:GLU:HG3	2	0.34
(1,2831)	1:A:539:MET:HG3	1:A:540:TRP:H	5	0.34
(1,2825)	1:A:537:LYS:H	1:A:537:LYS:HB3	13	0.34
(1,2814)	1:A:533:LEU:H	1:A:533:LEU:HB3	10	0.34
(1,2769)	1:A:519:ILE:HD11	1:A:523:LYS:HE3	1	0.34
(1,2769)	1:A:519:ILE:HD12	1:A:523:LYS:HE3	1	0.34
(1,2769)	1:A:519:ILE:HD13	1:A:523:LYS:HE3	1	0.34
(1,2769)	1:A:519:ILE:HD11	1:A:523:LYS:HE3	3	0.34
(1,2769)	1:A:519:ILE:HD12	1:A:523:LYS:HE3	3	0.34
(1,2769)	1:A:519:ILE:HD13	1:A:523:LYS:HE3	3	0.34
(1,2769)	1:A:519:ILE:HD11	1:A:523:LYS:HE3	6	0.34
(1,2769)	1:A:519:ILE:HD12	1:A:523:LYS:HE3	6	0.34
(1,2769)	1:A:519:ILE:HD13	1:A:523:LYS:HE3	6	0.34
(1,2759)	1:A:516:HIS:HB3	1:A:517:SER:H	8	0.34
(1,2710)	1:A:511:VAL:HA	1:A:512:ARG:HB3	14	0.34
(1,2702)	1:A:510:LEU:H	1:A:510:LEU:HB3	2	0.34
(1,2702)	1:A:510:LEU:H	1:A:510:LEU:HB3	3	0.34
(1,2681)	1:A:500:SER:H	1:A:500:SER:HB3	3	0.34
(1,2681)	1:A:500:SER:H	1:A:500:SER:HB3	8	0.34
(1,2681)	1:A:500:SER:H	1:A:500:SER:HB3	9	0.34
(1,2681)	1:A:500:SER:H	1:A:500:SER:HB3	12	0.34
(1,2656)	1:A:493:GLU:HA	1:A:493:GLU:HG3	8	0.34
(1,2656)	1:A:493:GLU:HA	1:A:493:GLU:HG3	10	0.34
(1,2656)	1:A:493:GLU:HA	1:A:493:GLU:HG3	12	0.34
(1,2611)	1:A:490:LEU:HG	1:A:494:SER:HB3	1	0.34
(1,2560)	1:A:480:GLN:HB3	1:A:481:GLY:H	17	0.34
(1,2553)	1:A:479:ARG:H	1:A:479:ARG:HB3	1	0.34
(1,2533)	1:A:473:MET:H	1:A:473:MET:HB3	11	0.34
(1,2520)	1:A:470:ASN:H	1:A:470:ASN:HB3	4	0.34
(1,2520)	1:A:470:ASN:H	1:A:470:ASN:HB3	20	0.34
(1,2508)	1:A:468:GLN:HA	1:A:468:GLN:HG3	16	0.34

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2502)	1:A:467:HIS:HA	1:A:470:ASN:HB3	12	0.34
(1,249)	1:A:407:HIS:HB3	1:A:410:LEU:H	5	0.34
(1,2479)	1:A:463:ARG:HD3	1:A:464:LEU:H	16	0.34
(1,2367)	1:A:434:HIS:HB3	1:A:435:GLY:H	16	0.34
(1,2352)	1:A:431:PHE:HB3	1:A:432:GLN:H	4	0.34
(1,2255)	1:A:414:GLU:HB3	1:A:415:LYS:H	6	0.34
(1,2255)	1:A:414:GLU:HB3	1:A:415:LYS:H	15	0.34
(1,2255)	1:A:414:GLU:HB3	1:A:415:LYS:H	18	0.34
(1,2251)	1:A:414:GLU:H	1:A:414:GLU:HG3	15	0.34
(1,2239)	1:A:411:ARG:H	1:A:411:ARG:HD3	19	0.34
(1,2215)	1:A:406:GLU:HG3	1:A:409:ALA:H	1	0.34
(1,2215)	1:A:406:GLU:HG3	1:A:409:ALA:H	15	0.34
(1,2188)	1:A:400:LEU:HB3	1:A:401:HIS:H	8	0.34
(1,2152)	1:A:395:TYR:HB3	1:A:397:PHE:HA	20	0.34
(1,2141)	1:A:393:LYS:H	1:A:393:LYS:HG3	10	0.34
(1,2137)	1:A:392:GLN:HA	1:A:393:LYS:HB3	5	0.34
(1,2137)	1:A:392:GLN:HA	1:A:393:LYS:HB3	16	0.34
(1,2134)	1:A:392:GLN:H	1:A:392:GLN:HG3	6	0.34
(1,2128)	1:A:387:GLU:HB3	1:A:388:SER:H	14	0.34
(1,205)	1:A:482:SER:HB3	1:A:485:CYS:H	3	0.34
(1,205)	1:A:482:SER:HB3	1:A:485:CYS:H	9	0.34
(1,1988)	1:A:403:ARG:HA	1:A:403:ARG:HD3	9	0.34
(1,1964)	1:A:540:TRP:HA	1:A:541:ARG:HB3	1	0.34
(1,1925)	1:A:427:PHE:HA	1:A:428:CYS:HB3	8	0.34
(1,1791)	1:A:538:ALA:HA	1:A:541:ARG:HB3	15	0.34
(1,175)	1:A:474:MET:HB3	1:A:475:SER:H	14	0.34
(1,1742)	1:A:479:ARG:HG3	1:A:479:ARG:HD3	13	0.34
(1,1739)	1:A:436:ARG:HG3	1:A:436:ARG:HD3	3	0.34
(1,1739)	1:A:436:ARG:HG3	1:A:436:ARG:HD3	10	0.34
(1,1739)	1:A:436:ARG:HG3	1:A:436:ARG:HD3	12	0.34
(1,1739)	1:A:436:ARG:HG3	1:A:436:ARG:HD3	18	0.34
(1,1728)	1:A:532:ARG:HB3	1:A:532:ARG:HD3	7	0.34
(1,1717)	1:A:526:ASN:HA	1:A:529:LYS:HE3	15	0.34
(1,1706)	1:A:393:LYS:HE3	1:A:394:PHE:H	17	0.34
(1,1671)	1:A:438:GLU:HG3	1:A:439:LEU:H	18	0.34
(1,1203)	1:A:471:GLN:HB3	1:A:472:ALA:HB1	1	0.34
(1,1203)	1:A:471:GLN:HB3	1:A:472:ALA:HB2	1	0.34
(1,1203)	1:A:471:GLN:HB3	1:A:472:ALA:HB3	1	0.34
(1,1136)	1:A:473:MET:HE1	1:A:482:SER:HB3	4	0.34
(1,1136)	1:A:473:MET:HE2	1:A:482:SER:HB3	4	0.34
(1,1136)	1:A:473:MET:HE3	1:A:482:SER:HB3	4	0.34
(1,786)	1:A:471:GLN:HB3	1:A:472:ALA:H	15	0.33

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,68)	1:A:518:GLN:HG3	1:A:519:ILE:H	20	0.33
(1,652)	1:A:480:GLN:H	1:A:480:GLN:HG3	4	0.33
(1,652)	1:A:480:GLN:H	1:A:480:GLN:HG3	9	0.33
(1,636)	1:A:463:ARG:HB3	1:A:464:LEU:H	7	0.33
(1,636)	1:A:463:ARG:HB3	1:A:464:LEU:H	11	0.33
(1,561)	1:A:543:GLU:HB3	1:A:545:ASP:H	15	0.33
(1,543)	1:A:462:CYS:HB3	1:A:463:ARG:H	10	0.33
(1,535)	1:A:542:LYS:HB3	1:A:543:GLU:H	1	0.33
(1,454)	1:A:496:PRO:HG3	1:A:497:ALA:H	12	0.33
(1,421)	1:A:466:LEU:HB3	1:A:468:GLN:H	17	0.33
(1,387)	1:A:539:MET:H	1:A:540:TRP:HB3	2	0.33
(1,385)	1:A:539:MET:H	1:A:539:MET:HB3	7	0.33
(1,361)	1:A:387:GLU:HG3	1:A:388:SER:H	8	0.33
(1,337)	1:A:501:SER:HB3	1:A:503:THR:H	11	0.33
(1,2832)	1:A:541:ARG:H	1:A:541:ARG:HG3	20	0.33
(1,2831)	1:A:539:MET:HG3	1:A:540:TRP:H	7	0.33
(1,2814)	1:A:533:LEU:H	1:A:533:LEU:HB3	4	0.33
(1,2814)	1:A:533:LEU:H	1:A:533:LEU:HB3	18	0.33
(1,2803)	1:A:529:LYS:HA	1:A:529:LYS:HD3	20	0.33
(1,2783)	1:A:523:LYS:HG3	1:A:523:LYS:HE3	5	0.33
(1,2769)	1:A:519:ILE:HD11	1:A:523:LYS:HE3	10	0.33
(1,2769)	1:A:519:ILE:HD12	1:A:523:LYS:HE3	10	0.33
(1,2769)	1:A:519:ILE:HD13	1:A:523:LYS:HE3	10	0.33
(1,2769)	1:A:519:ILE:HD11	1:A:523:LYS:HE3	12	0.33
(1,2769)	1:A:519:ILE:HD12	1:A:523:LYS:HE3	12	0.33
(1,2769)	1:A:519:ILE:HD13	1:A:523:LYS:HE3	12	0.33
(1,2759)	1:A:516:HIS:HB3	1:A:517:SER:H	12	0.33
(1,2721)	1:A:512:ARG:H	1:A:512:ARG:HG3	18	0.33
(1,2714)	1:A:511:VAL:HG11	1:A:513:LEU:HB3	10	0.33
(1,2714)	1:A:511:VAL:HG12	1:A:513:LEU:HB3	10	0.33
(1,2714)	1:A:511:VAL:HG13	1:A:513:LEU:HB3	10	0.33
(1,2714)	1:A:511:VAL:HG21	1:A:513:LEU:HB3	10	0.33
(1,2714)	1:A:511:VAL:HG22	1:A:513:LEU:HB3	10	0.33
(1,2714)	1:A:511:VAL:HG23	1:A:513:LEU:HB3	10	0.33
(1,2702)	1:A:510:LEU:H	1:A:510:LEU:HB3	1	0.33
(1,2685)	1:A:502:ASP:HB3	1:A:503:THR:H	19	0.33
(1,2681)	1:A:500:SER:H	1:A:500:SER:HB3	2	0.33
(1,2681)	1:A:500:SER:H	1:A:500:SER:HB3	16	0.33
(1,2680)	1:A:499:LEU:HB3	1:A:500:SER:HB3	15	0.33
(1,2656)	1:A:493:GLU:HA	1:A:493:GLU:HG3	18	0.33
(1,2655)	1:A:493:GLU:H	1:A:493:GLU:HG3	14	0.33
(1,2621)	1:A:490:LEU:HD11	1:A:512:ARG:HD3	20	0.33

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2621)	1:A:490:LEU:HD12	1:A:512:ARG:HD3	20	0.33
(1,2621)	1:A:490:LEU:HD13	1:A:512:ARG:HD3	20	0.33
(1,2621)	1:A:490:LEU:HD21	1:A:512:ARG:HD3	20	0.33
(1,2621)	1:A:490:LEU:HD22	1:A:512:ARG:HD3	20	0.33
(1,2621)	1:A:490:LEU:HD23	1:A:512:ARG:HD3	20	0.33
(1,2571)	1:A:484:ASP:H	1:A:484:ASP:HB3	2	0.33
(1,2571)	1:A:484:ASP:H	1:A:484:ASP:HB3	16	0.33
(1,2555)	1:A:479:ARG:HB3	1:A:479:ARG:HD3	16	0.33
(1,2547)	1:A:476:ASN:HB3	1:A:480:GLN:H	13	0.33
(1,2542)	1:A:475:SER:HB3	1:A:476:ASN:H	4	0.33
(1,2538)	1:A:473:MET:HE1	1:A:485:CYS:HB3	6	0.33
(1,2538)	1:A:473:MET:HE2	1:A:485:CYS:HB3	6	0.33
(1,2538)	1:A:473:MET:HE3	1:A:485:CYS:HB3	6	0.33
(1,2520)	1:A:470:ASN:H	1:A:470:ASN:HB3	6	0.33
(1,249)	1:A:407:HIS:HB3	1:A:410:LEU:H	10	0.33
(1,2472)	1:A:458:SER:HB3	1:A:459:ASN:H	12	0.33
(1,2472)	1:A:458:SER:HB3	1:A:459:ASN:H	16	0.33
(1,2417)	1:A:448:HIS:H	1:A:448:HIS:HB3	8	0.33
(1,2374)	1:A:438:GLU:H	1:A:438:GLU:HB3	7	0.33
(1,2369)	1:A:436:ARG:H	1:A:436:ARG:HB3	9	0.33
(1,2353)	1:A:431:PHE:HB3	1:A:433:VAL:H	12	0.33
(1,2316)	1:A:420:GLY:HA2	1:A:524:VAL:HG11	9	0.33
(1,2316)	1:A:420:GLY:HA2	1:A:524:VAL:HG12	9	0.33
(1,2316)	1:A:420:GLY:HA2	1:A:524:VAL:HG13	9	0.33
(1,2316)	1:A:420:GLY:HA2	1:A:524:VAL:HG21	9	0.33
(1,2316)	1:A:420:GLY:HA2	1:A:524:VAL:HG22	9	0.33
(1,2316)	1:A:420:GLY:HA2	1:A:524:VAL:HG23	9	0.33
(1,2316)	1:A:420:GLY:HA2	1:A:524:VAL:HG11	10	0.33
(1,2316)	1:A:420:GLY:HA2	1:A:524:VAL:HG12	10	0.33
(1,2316)	1:A:420:GLY:HA2	1:A:524:VAL:HG13	10	0.33
(1,2316)	1:A:420:GLY:HA2	1:A:524:VAL:HG21	10	0.33
(1,2316)	1:A:420:GLY:HA2	1:A:524:VAL:HG22	10	0.33
(1,2316)	1:A:420:GLY:HA2	1:A:524:VAL:HG23	10	0.33
(1,2264)	1:A:415:LYS:HE3	1:A:521:ALA:HB1	17	0.33
(1,2264)	1:A:415:LYS:HE3	1:A:521:ALA:HB2	17	0.33
(1,2264)	1:A:415:LYS:HE3	1:A:521:ALA:HB3	17	0.33
(1,2252)	1:A:414:GLU:H	1:A:423:ASP:HB3	1	0.33
(1,2214)	1:A:406:GLU:HG3	1:A:407:HIS:HA	16	0.33
(1,2188)	1:A:400:LEU:HB3	1:A:401:HIS:H	12	0.33
(1,1739)	1:A:436:ARG:HG3	1:A:436:ARG:HD3	6	0.33
(1,1728)	1:A:532:ARG:HB3	1:A:532:ARG:HD3	5	0.33
(1,1728)	1:A:532:ARG:HB3	1:A:532:ARG:HD3	15	0.33

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1718)	1:A:536:ARG:HB3	1:A:536:ARG:HD3	12	0.33
(1,1709)	1:A:542:LYS:HB3	1:A:542:LYS:HE3	15	0.33
(1,1705)	1:A:393:LYS:HE3	1:A:395:TYR:HE1	5	0.33
(1,1705)	1:A:393:LYS:HE3	1:A:395:TYR:HE2	5	0.33
(1,1656)	1:A:432:GLN:HG3	1:A:433:VAL:H	14	0.33
(1,1633)	1:A:474:MET:HB3	1:A:474:MET:HG3	13	0.33
(1,1611)	1:A:537:LYS:HD3	1:A:538:ALA:H	19	0.33
(1,1571)	1:A:479:ARG:H	1:A:479:ARG:HG3	1	0.33
(1,1235)	1:A:450:ALA:HB1	1:A:536:ARG:HD3	13	0.33
(1,1235)	1:A:450:ALA:HB2	1:A:536:ARG:HD3	13	0.33
(1,1235)	1:A:450:ALA:HB3	1:A:536:ARG:HD3	13	0.33
(1,1203)	1:A:471:GLN:HB3	1:A:472:ALA:HB1	20	0.33
(1,1203)	1:A:471:GLN:HB3	1:A:472:ALA:HB2	20	0.33
(1,1203)	1:A:471:GLN:HB3	1:A:472:ALA:HB3	20	0.33
(1,1198)	1:A:532:ARG:HB3	1:A:535:ALA:HB1	19	0.33
(1,1198)	1:A:532:ARG:HB3	1:A:535:ALA:HB2	19	0.33
(1,1198)	1:A:532:ARG:HB3	1:A:535:ALA:HB3	19	0.33
(1,98)	1:A:417:GLU:HG3	1:A:423:ASP:H	5	0.32
(1,818)	1:A:505:SER:HB3	1:A:506:LEU:H	13	0.32
(1,811)	1:A:391:GLU:H	1:A:391:GLU:HG3	20	0.32
(1,636)	1:A:463:ARG:HB3	1:A:464:LEU:H	12	0.32
(1,636)	1:A:463:ARG:HB3	1:A:464:LEU:H	19	0.32
(1,523)	1:A:529:LYS:H	1:A:529:LYS:HE3	18	0.32
(1,431)	1:A:534:GLN:H	1:A:534:GLN:HB3	8	0.32
(1,421)	1:A:466:LEU:HB3	1:A:468:GLN:H	1	0.32
(1,39)	1:A:435:GLY:H	1:A:438:GLU:HG3	2	0.32
(1,39)	1:A:435:GLY:H	1:A:438:GLU:HG3	13	0.32
(1,385)	1:A:539:MET:H	1:A:539:MET:HB3	5	0.32
(1,2844)	1:A:544:GLN:HA	1:A:544:GLN:HG3	3	0.32
(1,2840)	1:A:543:GLU:HA	1:A:543:GLU:HG3	13	0.32
(1,2839)	1:A:542:LYS:HG3	1:A:543:GLU:H	12	0.32
(1,2836)	1:A:541:ARG:HG3	1:A:541:ARG:HE	17	0.32
(1,2825)	1:A:537:LYS:H	1:A:537:LYS:HB3	3	0.32
(1,2821)	1:A:534:GLN:H	1:A:534:GLN:HG3	13	0.32
(1,2814)	1:A:533:LEU:H	1:A:533:LEU:HB3	1	0.32
(1,2814)	1:A:533:LEU:H	1:A:533:LEU:HB3	8	0.32
(1,2803)	1:A:529:LYS:HA	1:A:529:LYS:HD3	5	0.32
(1,2803)	1:A:529:LYS:HA	1:A:529:LYS:HD3	15	0.32
(1,2800)	1:A:529:LYS:H	1:A:529:LYS:HD3	11	0.32
(1,2769)	1:A:519:ILE:HD11	1:A:523:LYS:HE3	8	0.32
(1,2769)	1:A:519:ILE:HD12	1:A:523:LYS:HE3	8	0.32
(1,2769)	1:A:519:ILE:HD13	1:A:523:LYS:HE3	8	0.32

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2769)	1:A:519:ILE:HD11	1:A:523:LYS:HE3	11	0.32
(1,2769)	1:A:519:ILE:HD12	1:A:523:LYS:HE3	11	0.32
(1,2769)	1:A:519:ILE:HD13	1:A:523:LYS:HE3	11	0.32
(1,2769)	1:A:519:ILE:HD11	1:A:523:LYS:HE3	20	0.32
(1,2769)	1:A:519:ILE:HD12	1:A:523:LYS:HE3	20	0.32
(1,2769)	1:A:519:ILE:HD13	1:A:523:LYS:HE3	20	0.32
(1,2754)	1:A:514:ASP:HB3	1:A:517:SER:HB3	8	0.32
(1,2721)	1:A:512:ARG:H	1:A:512:ARG:HG3	20	0.32
(1,2702)	1:A:510:LEU:H	1:A:510:LEU:HB3	8	0.32
(1,2702)	1:A:510:LEU:H	1:A:510:LEU:HB3	10	0.32
(1,2687)	1:A:502:ASP:HB3	1:A:505:SER:HB3	11	0.32
(1,2674)	1:A:496:PRO:HD3	1:A:516:HIS:HE1	20	0.32
(1,2673)	1:A:496:PRO:HD3	1:A:497:ALA:HB1	20	0.32
(1,2673)	1:A:496:PRO:HD3	1:A:497:ALA:HB2	20	0.32
(1,2673)	1:A:496:PRO:HD3	1:A:497:ALA:HB3	20	0.32
(1,2659)	1:A:494:SER:H	1:A:494:SER:HB3	4	0.32
(1,2656)	1:A:493:GLU:HA	1:A:493:GLU:HG3	5	0.32
(1,2656)	1:A:493:GLU:HA	1:A:493:GLU:HG3	11	0.32
(1,2575)	1:A:484:ASP:HB3	1:A:485:CYS:H	20	0.32
(1,2570)	1:A:483:PRO:HD3	1:A:484:ASP:H	2	0.32
(1,2570)	1:A:483:PRO:HD3	1:A:484:ASP:H	3	0.32
(1,2570)	1:A:483:PRO:HD3	1:A:484:ASP:H	4	0.32
(1,2570)	1:A:483:PRO:HD3	1:A:484:ASP:H	5	0.32
(1,2570)	1:A:483:PRO:HD3	1:A:484:ASP:H	9	0.32
(1,2569)	1:A:483:PRO:HB3	1:A:485:CYS:H	19	0.32
(1,2555)	1:A:479:ARG:HB3	1:A:479:ARG:HD3	6	0.32
(1,2541)	1:A:475:SER:H	1:A:476:ASN:HB3	6	0.32
(1,2533)	1:A:473:MET:H	1:A:473:MET:HB3	14	0.32
(1,2485)	1:A:464:LEU:HD11	1:A:467:HIS:HB3	1	0.32
(1,2485)	1:A:464:LEU:HD12	1:A:467:HIS:HB3	1	0.32
(1,2485)	1:A:464:LEU:HD13	1:A:467:HIS:HB3	1	0.32
(1,2407)	1:A:446:ILE:H	1:A:446:ILE:HG13	13	0.32
(1,2369)	1:A:436:ARG:H	1:A:436:ARG:HB3	7	0.32
(1,2353)	1:A:431:PHE:HB3	1:A:433:VAL:H	15	0.32
(1,2352)	1:A:431:PHE:HB3	1:A:432:GLN:H	20	0.32
(1,2347)	1:A:430:ASP:HB3	1:A:432:GLN:H	6	0.32
(1,2255)	1:A:414:GLU:HB3	1:A:415:LYS:H	2	0.32
(1,2241)	1:A:411:ARG:HA	1:A:411:ARG:HD3	1	0.32
(1,2215)	1:A:406:GLU:HG3	1:A:409:ALA:H	12	0.32
(1,2214)	1:A:406:GLU:HG3	1:A:407:HIS:HA	12	0.32
(1,2161)	1:A:397:PHE:HB3	1:A:398:VAL:H	11	0.32
(1,2161)	1:A:397:PHE:HB3	1:A:398:VAL:H	15	0.32

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2131)	1:A:388:SER:H	1:A:388:SER:HB3	15	0.32
(1,2126)	1:A:529:LYS:HE3	1:A:531:HIS:HE1	20	0.32
(1,2122)	1:A:529:LYS:HG3	1:A:531:HIS:HE1	17	0.32
(1,2052)	1:A:462:CYS:HB3	1:A:503:THR:HA	20	0.32
(1,2027)	1:A:389:SER:HB3	1:A:390:SER:H	3	0.32
(1,1928)	1:A:415:LYS:HA	1:A:415:LYS:HD3	14	0.32
(1,175)	1:A:474:MET:HB3	1:A:475:SER:H	20	0.32
(1,1717)	1:A:526:ASN:HA	1:A:529:LYS:HE3	14	0.32
(1,1676)	1:A:416:LEU:HG	1:A:417:GLU:HG3	12	0.32
(1,164)	1:A:465:SER:H	1:A:466:LEU:HB3	6	0.32
(1,164)	1:A:465:SER:H	1:A:466:LEU:HB3	11	0.32
(1,1636)	1:A:471:GLN:HA	1:A:474:MET:HB3	4	0.32
(1,1633)	1:A:474:MET:HB3	1:A:474:MET:HG3	5	0.32
(1,1607)	1:A:537:LYS:HA	1:A:537:LYS:HD3	1	0.32
(1,1572)	1:A:479:ARG:HG3	1:A:480:GLN:H	2	0.32
(1,1532)	1:A:490:LEU:HD21	1:A:512:ARG:HD3	20	0.32
(1,1532)	1:A:490:LEU:HD22	1:A:512:ARG:HD3	20	0.32
(1,1532)	1:A:490:LEU:HD23	1:A:512:ARG:HD3	20	0.32
(1,1203)	1:A:471:GLN:HB3	1:A:472:ALA:HB1	13	0.32
(1,1203)	1:A:471:GLN:HB3	1:A:472:ALA:HB2	13	0.32
(1,1203)	1:A:471:GLN:HB3	1:A:472:ALA:HB3	13	0.32
(1,812)	1:A:390:SER:HB3	1:A:391:GLU:H	14	0.31
(1,652)	1:A:480:GLN:H	1:A:480:GLN:HG3	14	0.31
(1,555)	1:A:542:LYS:H	1:A:542:LYS:HE3	18	0.31
(1,538)	1:A:501:SER:H	1:A:501:SER:HB3	9	0.31
(1,535)	1:A:542:LYS:HB3	1:A:543:GLU:H	12	0.31
(1,449)	1:A:543:GLU:HB3	1:A:544:GLN:H	9	0.31
(1,397)	1:A:536:ARG:H	1:A:536:ARG:HD3	11	0.31
(1,39)	1:A:435:GLY:H	1:A:438:GLU:HG3	16	0.31
(1,39)	1:A:435:GLY:H	1:A:438:GLU:HG3	19	0.31
(1,387)	1:A:539:MET:H	1:A:540:TRP:HB3	11	0.31
(1,2836)	1:A:541:ARG:HG3	1:A:541:ARG:HE	6	0.31
(1,2824)	1:A:534:GLN:HG3	1:A:535:ALA:HB1	2	0.31
(1,2824)	1:A:534:GLN:HG3	1:A:535:ALA:HB2	2	0.31
(1,2824)	1:A:534:GLN:HG3	1:A:535:ALA:HB3	2	0.31
(1,2821)	1:A:534:GLN:H	1:A:534:GLN:HG3	17	0.31
(1,2803)	1:A:529:LYS:HA	1:A:529:LYS:HD3	13	0.31
(1,2769)	1:A:519:ILE:HD11	1:A:523:LYS:HE3	9	0.31
(1,2769)	1:A:519:ILE:HD12	1:A:523:LYS:HE3	9	0.31
(1,2769)	1:A:519:ILE:HD13	1:A:523:LYS:HE3	9	0.31
(1,2756)	1:A:515:GLU:HA	1:A:515:GLU:HG3	10	0.31
(1,2723)	1:A:512:ARG:HB3	1:A:512:ARG:HD3	2	0.31

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2723)	1:A:512:ARG:HB3	1:A:512:ARG:HD3	7	0.31
(1,2714)	1:A:511:VAL:HG11	1:A:513:LEU:HB3	5	0.31
(1,2714)	1:A:511:VAL:HG12	1:A:513:LEU:HB3	5	0.31
(1,2714)	1:A:511:VAL:HG13	1:A:513:LEU:HB3	5	0.31
(1,2714)	1:A:511:VAL:HG21	1:A:513:LEU:HB3	5	0.31
(1,2714)	1:A:511:VAL:HG22	1:A:513:LEU:HB3	5	0.31
(1,2714)	1:A:511:VAL:HG23	1:A:513:LEU:HB3	5	0.31
(1,2702)	1:A:510:LEU:H	1:A:510:LEU:HB3	4	0.31
(1,2702)	1:A:510:LEU:H	1:A:510:LEU:HB3	11	0.31
(1,2702)	1:A:510:LEU:H	1:A:510:LEU:HB3	17	0.31
(1,2673)	1:A:496:PRO:HD3	1:A:497:ALA:HB1	1	0.31
(1,2673)	1:A:496:PRO:HD3	1:A:497:ALA:HB2	1	0.31
(1,2673)	1:A:496:PRO:HD3	1:A:497:ALA:HB3	1	0.31
(1,2673)	1:A:496:PRO:HD3	1:A:497:ALA:HB1	2	0.31
(1,2673)	1:A:496:PRO:HD3	1:A:497:ALA:HB2	2	0.31
(1,2673)	1:A:496:PRO:HD3	1:A:497:ALA:HB3	2	0.31
(1,2673)	1:A:496:PRO:HD3	1:A:497:ALA:HB1	3	0.31
(1,2673)	1:A:496:PRO:HD3	1:A:497:ALA:HB2	3	0.31
(1,2673)	1:A:496:PRO:HD3	1:A:497:ALA:HB3	3	0.31
(1,2673)	1:A:496:PRO:HD3	1:A:497:ALA:HB1	7	0.31
(1,2673)	1:A:496:PRO:HD3	1:A:497:ALA:HB2	7	0.31
(1,2673)	1:A:496:PRO:HD3	1:A:497:ALA:HB3	7	0.31
(1,2673)	1:A:496:PRO:HD3	1:A:497:ALA:HB1	8	0.31
(1,2673)	1:A:496:PRO:HD3	1:A:497:ALA:HB2	8	0.31
(1,2673)	1:A:496:PRO:HD3	1:A:497:ALA:HB3	8	0.31
(1,2673)	1:A:496:PRO:HD3	1:A:497:ALA:HB1	9	0.31
(1,2673)	1:A:496:PRO:HD3	1:A:497:ALA:HB2	9	0.31
(1,2673)	1:A:496:PRO:HD3	1:A:497:ALA:HB3	9	0.31
(1,2673)	1:A:496:PRO:HD3	1:A:497:ALA:HB1	10	0.31
(1,2673)	1:A:496:PRO:HD3	1:A:497:ALA:HB2	10	0.31
(1,2673)	1:A:496:PRO:HD3	1:A:497:ALA:HB3	10	0.31
(1,2673)	1:A:496:PRO:HD3	1:A:497:ALA:HB1	11	0.31
(1,2673)	1:A:496:PRO:HD3	1:A:497:ALA:HB2	11	0.31
(1,2673)	1:A:496:PRO:HD3	1:A:497:ALA:HB3	11	0.31
(1,2673)	1:A:496:PRO:HD3	1:A:497:ALA:HB1	12	0.31
(1,2673)	1:A:496:PRO:HD3	1:A:497:ALA:HB2	12	0.31
(1,2673)	1:A:496:PRO:HD3	1:A:497:ALA:HB3	12	0.31
(1,2673)	1:A:496:PRO:HD3	1:A:497:ALA:HB1	13	0.31
(1,2673)	1:A:496:PRO:HD3	1:A:497:ALA:HB2	13	0.31
(1,2673)	1:A:496:PRO:HD3	1:A:497:ALA:HB3	13	0.31
(1,2673)	1:A:496:PRO:HD3	1:A:497:ALA:HB1	16	0.31
(1,2673)	1:A:496:PRO:HD3	1:A:497:ALA:HB2	16	0.31

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2673)	1:A:496:PRO:HD3	1:A:497:ALA:HB3	16	0.31
(1,2673)	1:A:496:PRO:HD3	1:A:497:ALA:HB1	18	0.31
(1,2673)	1:A:496:PRO:HD3	1:A:497:ALA:HB2	18	0.31
(1,2673)	1:A:496:PRO:HD3	1:A:497:ALA:HB3	18	0.31
(1,2673)	1:A:496:PRO:HD3	1:A:497:ALA:HB1	19	0.31
(1,2673)	1:A:496:PRO:HD3	1:A:497:ALA:HB2	19	0.31
(1,2673)	1:A:496:PRO:HD3	1:A:497:ALA:HB3	19	0.31
(1,2656)	1:A:493:GLU:HA	1:A:493:GLU:HG3	1	0.31
(1,2656)	1:A:493:GLU:HA	1:A:493:GLU:HG3	2	0.31
(1,2656)	1:A:493:GLU:HA	1:A:493:GLU:HG3	20	0.31
(1,2641)	1:A:492:LEU:HB3	1:A:493:GLU:H	9	0.31
(1,2611)	1:A:490:LEU:HG	1:A:494:SER:HB3	19	0.31
(1,2570)	1:A:483:PRO:HD3	1:A:484:ASP:H	1	0.31
(1,2570)	1:A:483:PRO:HD3	1:A:484:ASP:H	6	0.31
(1,2570)	1:A:483:PRO:HD3	1:A:484:ASP:H	7	0.31
(1,2570)	1:A:483:PRO:HD3	1:A:484:ASP:H	8	0.31
(1,2570)	1:A:483:PRO:HD3	1:A:484:ASP:H	10	0.31
(1,2570)	1:A:483:PRO:HD3	1:A:484:ASP:H	11	0.31
(1,2570)	1:A:483:PRO:HD3	1:A:484:ASP:H	12	0.31
(1,2570)	1:A:483:PRO:HD3	1:A:484:ASP:H	13	0.31
(1,2570)	1:A:483:PRO:HD3	1:A:484:ASP:H	14	0.31
(1,2570)	1:A:483:PRO:HD3	1:A:484:ASP:H	15	0.31
(1,2570)	1:A:483:PRO:HD3	1:A:484:ASP:H	16	0.31
(1,2570)	1:A:483:PRO:HD3	1:A:484:ASP:H	17	0.31
(1,2570)	1:A:483:PRO:HD3	1:A:484:ASP:H	18	0.31
(1,2570)	1:A:483:PRO:HD3	1:A:484:ASP:H	19	0.31
(1,2570)	1:A:483:PRO:HD3	1:A:484:ASP:H	20	0.31
(1,2538)	1:A:473:MET:HE1	1:A:485:CYS:HB3	15	0.31
(1,2538)	1:A:473:MET:HE2	1:A:485:CYS:HB3	15	0.31
(1,2538)	1:A:473:MET:HE3	1:A:485:CYS:HB3	15	0.31
(1,2520)	1:A:470:ASN:H	1:A:470:ASN:HB3	18	0.31
(1,2496)	1:A:466:LEU:HB3	1:A:469:VAL:HG11	13	0.31
(1,2496)	1:A:466:LEU:HB3	1:A:469:VAL:HG12	13	0.31
(1,2496)	1:A:466:LEU:HB3	1:A:469:VAL:HG13	13	0.31
(1,2496)	1:A:466:LEU:HB3	1:A:469:VAL:HG21	13	0.31
(1,2496)	1:A:466:LEU:HB3	1:A:469:VAL:HG22	13	0.31
(1,2496)	1:A:466:LEU:HB3	1:A:469:VAL:HG23	13	0.31
(1,2480)	1:A:463:ARG:HD3	1:A:506:LEU:HD21	12	0.31
(1,2480)	1:A:463:ARG:HD3	1:A:506:LEU:HD22	12	0.31
(1,2480)	1:A:463:ARG:HD3	1:A:506:LEU:HD23	12	0.31
(1,2478)	1:A:463:ARG:H	1:A:463:ARG:HD3	8	0.31
(1,2437)	1:A:454:LEU:H	1:A:489:PHE:HB3	14	0.31

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2377)	1:A:438:GLU:HB3	1:A:439:LEU:H	10	0.31
(1,2369)	1:A:436:ARG:H	1:A:436:ARG:HB3	5	0.31
(1,2344)	1:A:430:ASP:H	1:A:430:ASP:HB3	9	0.31
(1,2316)	1:A:420:GLY:HA2	1:A:524:VAL:HG11	2	0.31
(1,2316)	1:A:420:GLY:HA2	1:A:524:VAL:HG12	2	0.31
(1,2316)	1:A:420:GLY:HA2	1:A:524:VAL:HG13	2	0.31
(1,2316)	1:A:420:GLY:HA2	1:A:524:VAL:HG21	2	0.31
(1,2316)	1:A:420:GLY:HA2	1:A:524:VAL:HG22	2	0.31
(1,2316)	1:A:420:GLY:HA2	1:A:524:VAL:HG23	2	0.31
(1,2316)	1:A:420:GLY:HA2	1:A:524:VAL:HG11	12	0.31
(1,2316)	1:A:420:GLY:HA2	1:A:524:VAL:HG12	12	0.31
(1,2316)	1:A:420:GLY:HA2	1:A:524:VAL:HG13	12	0.31
(1,2316)	1:A:420:GLY:HA2	1:A:524:VAL:HG21	12	0.31
(1,2316)	1:A:420:GLY:HA2	1:A:524:VAL:HG22	12	0.31
(1,2316)	1:A:420:GLY:HA2	1:A:524:VAL:HG23	12	0.31
(1,2214)	1:A:406:GLU:HG3	1:A:407:HIS:HA	5	0.31
(1,2179)	1:A:398:VAL:HG11	1:A:449:SER:HB3	12	0.31
(1,2179)	1:A:398:VAL:HG12	1:A:449:SER:HB3	12	0.31
(1,2179)	1:A:398:VAL:HG13	1:A:449:SER:HB3	12	0.31
(1,2179)	1:A:398:VAL:HG21	1:A:449:SER:HB3	12	0.31
(1,2179)	1:A:398:VAL:HG22	1:A:449:SER:HB3	12	0.31
(1,2179)	1:A:398:VAL:HG23	1:A:449:SER:HB3	12	0.31
(1,2141)	1:A:393:LYS:H	1:A:393:LYS:HG3	17	0.31
(1,2139)	1:A:392:GLN:HG3	1:A:393:LYS:H	8	0.31
(1,2137)	1:A:392:GLN:HA	1:A:393:LYS:HB3	1	0.31
(1,2131)	1:A:388:SER:H	1:A:388:SER:HB3	6	0.31
(1,2074)	1:A:393:LYS:HD3	1:A:395:TYR:HE1	14	0.31
(1,2074)	1:A:393:LYS:HD3	1:A:395:TYR:HE2	14	0.31
(1,2027)	1:A:389:SER:HB3	1:A:390:SER:H	18	0.31
(1,2027)	1:A:389:SER:HB3	1:A:390:SER:H	19	0.31
(1,1920)	1:A:390:SER:HA	1:A:390:SER:HB3	4	0.31
(1,1920)	1:A:390:SER:HA	1:A:390:SER:HB3	15	0.31
(1,1853)	1:A:436:ARG:HA	1:A:436:ARG:HG3	1	0.31
(1,1803)	1:A:529:LYS:HA	1:A:529:LYS:HE3	15	0.31
(1,175)	1:A:474:MET:HB3	1:A:475:SER:H	11	0.31
(1,1739)	1:A:436:ARG:HG3	1:A:436:ARG:HD3	9	0.31
(1,1725)	1:A:463:ARG:HB3	1:A:463:ARG:HD3	4	0.31
(1,1676)	1:A:416:LEU:HG	1:A:417:GLU:HG3	5	0.31
(1,1656)	1:A:432:GLN:HG3	1:A:433:VAL:H	7	0.31
(1,164)	1:A:465:SER:H	1:A:466:LEU:HB3	19	0.31
(1,1633)	1:A:474:MET:HB3	1:A:474:MET:HG3	4	0.31
(1,1633)	1:A:474:MET:HB3	1:A:474:MET:HG3	17	0.31

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1618)	1:A:463:ARG:HB3	1:A:506:LEU:HD11	14	0.31
(1,1618)	1:A:463:ARG:HB3	1:A:506:LEU:HD12	14	0.31
(1,1618)	1:A:463:ARG:HB3	1:A:506:LEU:HD13	14	0.31
(1,1610)	1:A:394:PHE:HE1	1:A:537:LYS:HD3	20	0.31
(1,1610)	1:A:394:PHE:HE2	1:A:537:LYS:HD3	20	0.31
(1,1608)	1:A:534:GLN:HA	1:A:537:LYS:HD3	13	0.31
(1,1599)	1:A:393:LYS:HD3	1:A:395:TYR:HD1	4	0.31
(1,1599)	1:A:393:LYS:HD3	1:A:395:TYR:HD2	4	0.31
(1,1575)	1:A:456:LEU:HD21	1:A:462:CYS:HB3	13	0.31
(1,1575)	1:A:456:LEU:HD22	1:A:462:CYS:HB3	13	0.31
(1,1575)	1:A:456:LEU:HD23	1:A:462:CYS:HB3	13	0.31
(1,1571)	1:A:479:ARG:H	1:A:479:ARG:HG3	12	0.31
(1,1200)	1:A:532:ARG:HD3	1:A:535:ALA:HB1	10	0.31
(1,1200)	1:A:532:ARG:HD3	1:A:535:ALA:HB2	10	0.31
(1,1200)	1:A:532:ARG:HD3	1:A:535:ALA:HB3	10	0.31
(1,910)	1:A:417:GLU:HG3	1:A:418:ALA:H	7	0.3
(1,891)	1:A:393:LYS:H	1:A:393:LYS:HE3	20	0.3
(1,835)	1:A:415:LYS:H	1:A:415:LYS:HG3	7	0.3
(1,812)	1:A:390:SER:HB3	1:A:391:GLU:H	2	0.3
(1,763)	1:A:393:LYS:HD3	1:A:394:PHE:H	6	0.3
(1,679)	1:A:436:ARG:H	1:A:436:ARG:HD3	5	0.3
(1,652)	1:A:480:GLN:H	1:A:480:GLN:HG3	16	0.3
(1,636)	1:A:463:ARG:HB3	1:A:464:LEU:H	2	0.3
(1,606)	1:A:438:GLU:H	1:A:438:GLU:HG3	17	0.3
(1,600)	1:A:403:ARG:HB3	1:A:403:ARG:HE	5	0.3
(1,600)	1:A:403:ARG:HB3	1:A:403:ARG:HE	7	0.3
(1,599)	1:A:403:ARG:HG3	1:A:403:ARG:HE	10	0.3
(1,543)	1:A:462:CYS:HB3	1:A:463:ARG:H	1	0.3
(1,536)	1:A:543:GLU:H	1:A:543:GLU:HB3	3	0.3
(1,535)	1:A:542:LYS:HB3	1:A:543:GLU:H	6	0.3
(1,484)	1:A:419:LEU:H	1:A:420:GLY:HA3	13	0.3
(1,2840)	1:A:543:GLU:HA	1:A:543:GLU:HG3	15	0.3
(1,2832)	1:A:541:ARG:H	1:A:541:ARG:HG3	16	0.3
(1,2831)	1:A:539:MET:HG3	1:A:540:TRP:H	13	0.3
(1,2821)	1:A:534:GLN:H	1:A:534:GLN:HG3	9	0.3
(1,2821)	1:A:534:GLN:H	1:A:534:GLN:HG3	19	0.3
(1,2814)	1:A:533:LEU:H	1:A:533:LEU:HB3	20	0.3
(1,2810)	1:A:530:PRO:HA	1:A:533:LEU:HB3	10	0.3
(1,2757)	1:A:515:GLU:HG3	1:A:516:HIS:H	2	0.3
(1,2741)	1:A:513:LEU:HD11	1:A:523:LYS:HE3	12	0.3
(1,2741)	1:A:513:LEU:HD12	1:A:523:LYS:HE3	12	0.3
(1,2741)	1:A:513:LEU:HD13	1:A:523:LYS:HE3	12	0.3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2741)	1:A:513:LEU:HD21	1:A:523:LYS:HE3	12	0.3
(1,2741)	1:A:513:LEU:HD22	1:A:523:LYS:HE3	12	0.3
(1,2741)	1:A:513:LEU:HD23	1:A:523:LYS:HE3	12	0.3
(1,2723)	1:A:512:ARG:HB3	1:A:512:ARG:HD3	8	0.3
(1,2710)	1:A:511:VAL:HA	1:A:512:ARG:HB3	4	0.3
(1,2702)	1:A:510:LEU:H	1:A:510:LEU:HB3	6	0.3
(1,2702)	1:A:510:LEU:H	1:A:510:LEU:HB3	13	0.3
(1,2702)	1:A:510:LEU:H	1:A:510:LEU:HB3	18	0.3
(1,2699)	1:A:507:LEU:HD11	1:A:512:ARG:HD3	20	0.3
(1,2699)	1:A:507:LEU:HD12	1:A:512:ARG:HD3	20	0.3
(1,2699)	1:A:507:LEU:HD13	1:A:512:ARG:HD3	20	0.3
(1,2699)	1:A:507:LEU:HD21	1:A:512:ARG:HD3	20	0.3
(1,2699)	1:A:507:LEU:HD22	1:A:512:ARG:HD3	20	0.3
(1,2699)	1:A:507:LEU:HD23	1:A:512:ARG:HD3	20	0.3
(1,2680)	1:A:499:LEU:HB3	1:A:500:SER:HB3	14	0.3
(1,2673)	1:A:496:PRO:HD3	1:A:497:ALA:HB1	4	0.3
(1,2673)	1:A:496:PRO:HD3	1:A:497:ALA:HB2	4	0.3
(1,2673)	1:A:496:PRO:HD3	1:A:497:ALA:HB3	4	0.3
(1,2673)	1:A:496:PRO:HD3	1:A:497:ALA:HB1	5	0.3
(1,2673)	1:A:496:PRO:HD3	1:A:497:ALA:HB2	5	0.3
(1,2673)	1:A:496:PRO:HD3	1:A:497:ALA:HB3	5	0.3
(1,2673)	1:A:496:PRO:HD3	1:A:497:ALA:HB1	6	0.3
(1,2673)	1:A:496:PRO:HD3	1:A:497:ALA:HB2	6	0.3
(1,2673)	1:A:496:PRO:HD3	1:A:497:ALA:HB3	6	0.3
(1,2673)	1:A:496:PRO:HD3	1:A:497:ALA:HB1	14	0.3
(1,2673)	1:A:496:PRO:HD3	1:A:497:ALA:HB2	14	0.3
(1,2673)	1:A:496:PRO:HD3	1:A:497:ALA:HB3	14	0.3
(1,2673)	1:A:496:PRO:HD3	1:A:497:ALA:HB1	15	0.3
(1,2673)	1:A:496:PRO:HD3	1:A:497:ALA:HB2	15	0.3
(1,2673)	1:A:496:PRO:HD3	1:A:497:ALA:HB3	15	0.3
(1,2673)	1:A:496:PRO:HD3	1:A:497:ALA:HB1	17	0.3
(1,2673)	1:A:496:PRO:HD3	1:A:497:ALA:HB2	17	0.3
(1,2673)	1:A:496:PRO:HD3	1:A:497:ALA:HB3	17	0.3
(1,2656)	1:A:493:GLU:HA	1:A:493:GLU:HG3	13	0.3
(1,2641)	1:A:492:LEU:HB3	1:A:493:GLU:H	11	0.3
(1,2569)	1:A:483:PRO:HB3	1:A:485:CYS:H	1	0.3
(1,2569)	1:A:483:PRO:HB3	1:A:485:CYS:H	2	0.3
(1,2560)	1:A:480:GLN:HB3	1:A:481:GLY:H	14	0.3
(1,2542)	1:A:475:SER:HB3	1:A:476:ASN:H	15	0.3
(1,2538)	1:A:473:MET:HE1	1:A:485:CYS:HB3	20	0.3
(1,2538)	1:A:473:MET:HE2	1:A:485:CYS:HB3	20	0.3
(1,2538)	1:A:473:MET:HE3	1:A:485:CYS:HB3	20	0.3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2536)	1:A:473:MET:HB3	1:A:474:MET:H	8	0.3
(1,2535)	1:A:473:MET:HA	1:A:473:MET:HG3	8	0.3
(1,2512)	1:A:468:GLN:HG3	1:A:469:VAL:H	2	0.3
(1,249)	1:A:407:HIS:HB3	1:A:410:LEU:H	13	0.3
(1,2479)	1:A:463:ARG:HD3	1:A:464:LEU:H	11	0.3
(1,2416)	1:A:447:ASP:HB3	1:A:448:HIS:H	7	0.3
(1,2389)	1:A:442:LEU:HD11	1:A:443:GLN:HG3	10	0.3
(1,2389)	1:A:442:LEU:HD12	1:A:443:GLN:HG3	10	0.3
(1,2389)	1:A:442:LEU:HD13	1:A:443:GLN:HG3	10	0.3
(1,2389)	1:A:442:LEU:HD21	1:A:443:GLN:HG3	10	0.3
(1,2389)	1:A:442:LEU:HD22	1:A:443:GLN:HG3	10	0.3
(1,2389)	1:A:442:LEU:HD23	1:A:443:GLN:HG3	10	0.3
(1,2372)	1:A:436:ARG:HB3	1:A:436:ARG:HD3	7	0.3
(1,2346)	1:A:430:ASP:HB3	1:A:431:PHE:H	16	0.3
(1,2336)	1:A:423:ASP:HB3	1:A:424:GLY:H	13	0.3
(1,2316)	1:A:420:GLY:HA2	1:A:524:VAL:HG11	11	0.3
(1,2316)	1:A:420:GLY:HA2	1:A:524:VAL:HG12	11	0.3
(1,2316)	1:A:420:GLY:HA2	1:A:524:VAL:HG13	11	0.3
(1,2316)	1:A:420:GLY:HA2	1:A:524:VAL:HG21	11	0.3
(1,2316)	1:A:420:GLY:HA2	1:A:524:VAL:HG22	11	0.3
(1,2316)	1:A:420:GLY:HA2	1:A:524:VAL:HG23	11	0.3
(1,2225)	1:A:408:ILE:HG21	1:A:493:GLU:HB3	14	0.3
(1,2225)	1:A:408:ILE:HG22	1:A:493:GLU:HB3	14	0.3
(1,2225)	1:A:408:ILE:HG23	1:A:493:GLU:HB3	14	0.3
(1,2215)	1:A:406:GLU:HG3	1:A:409:ALA:H	8	0.3
(1,2179)	1:A:398:VAL:HG11	1:A:449:SER:HB3	10	0.3
(1,2179)	1:A:398:VAL:HG12	1:A:449:SER:HB3	10	0.3
(1,2179)	1:A:398:VAL:HG13	1:A:449:SER:HB3	10	0.3
(1,2179)	1:A:398:VAL:HG21	1:A:449:SER:HB3	10	0.3
(1,2179)	1:A:398:VAL:HG22	1:A:449:SER:HB3	10	0.3
(1,2179)	1:A:398:VAL:HG23	1:A:449:SER:HB3	10	0.3
(1,2137)	1:A:392:GLN:HA	1:A:393:LYS:HB3	8	0.3
(1,2027)	1:A:389:SER:HB3	1:A:390:SER:H	7	0.3
(1,175)	1:A:474:MET:HB3	1:A:475:SER:H	18	0.3
(1,175)	1:A:474:MET:HB3	1:A:475:SER:H	19	0.3
(1,1739)	1:A:436:ARG:HG3	1:A:436:ARG:HD3	17	0.3
(1,1739)	1:A:436:ARG:HG3	1:A:436:ARG:HD3	20	0.3
(1,1728)	1:A:532:ARG:HB3	1:A:532:ARG:HD3	3	0.3
(1,1707)	1:A:542:LYS:HG3	1:A:542:LYS:HE3	4	0.3
(1,1659)	1:A:480:GLN:HA	1:A:480:GLN:HG3	4	0.3
(1,1656)	1:A:432:GLN:HG3	1:A:433:VAL:H	3	0.3
(1,164)	1:A:465:SER:H	1:A:466:LEU:HB3	15	0.3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,164)	1:A:465:SER:H	1:A:466:LEU:HB3	17	0.3
(1,1633)	1:A:474:MET:HB3	1:A:474:MET:HG3	3	0.3
(1,1618)	1:A:463:ARG:HB3	1:A:506:LEU:HD11	20	0.3
(1,1618)	1:A:463:ARG:HB3	1:A:506:LEU:HD12	20	0.3
(1,1618)	1:A:463:ARG:HB3	1:A:506:LEU:HD13	20	0.3
(1,1576)	1:A:462:CYS:HB3	1:A:506:LEU:HD11	1	0.3
(1,1576)	1:A:462:CYS:HB3	1:A:506:LEU:HD12	1	0.3
(1,1576)	1:A:462:CYS:HB3	1:A:506:LEU:HD13	1	0.3
(1,1275)	1:A:398:VAL:HG21	1:A:449:SER:HB3	6	0.3
(1,1275)	1:A:398:VAL:HG22	1:A:449:SER:HB3	6	0.3
(1,1275)	1:A:398:VAL:HG23	1:A:449:SER:HB3	6	0.3
(1,1198)	1:A:532:ARG:HB3	1:A:535:ALA:HB1	2	0.3
(1,1198)	1:A:532:ARG:HB3	1:A:535:ALA:HB2	2	0.3
(1,1198)	1:A:532:ARG:HB3	1:A:535:ALA:HB3	2	0.3
(1,811)	1:A:391:GLU:H	1:A:391:GLU:HG3	13	0.29
(1,789)	1:A:539:MET:HB3	1:A:540:TRP:H	14	0.29
(1,768)	1:A:537:LYS:H	1:A:537:LYS:HD3	3	0.29
(1,763)	1:A:393:LYS:HD3	1:A:394:PHE:H	17	0.29
(1,731)	1:A:538:ALA:H	1:A:539:MET:HB3	19	0.29
(1,636)	1:A:463:ARG:HB3	1:A:464:LEU:H	9	0.29
(1,636)	1:A:463:ARG:HB3	1:A:464:LEU:H	20	0.29
(1,600)	1:A:403:ARG:HB3	1:A:403:ARG:HE	1	0.29
(1,569)	1:A:465:SER:HB3	1:A:466:LEU:H	20	0.29
(1,568)	1:A:466:LEU:H	1:A:466:LEU:HB3	10	0.29
(1,543)	1:A:462:CYS:HB3	1:A:463:ARG:H	7	0.29
(1,508)	1:A:403:ARG:HB3	1:A:404:ALA:H	12	0.29
(1,421)	1:A:466:LEU:HB3	1:A:468:GLN:H	4	0.29
(1,421)	1:A:466:LEU:HB3	1:A:468:GLN:H	7	0.29
(1,337)	1:A:501:SER:HB3	1:A:503:THR:H	15	0.29
(1,2840)	1:A:543:GLU:HA	1:A:543:GLU:HG3	11	0.29
(1,2835)	1:A:541:ARG:HB3	1:A:541:ARG:HD3	12	0.29
(1,2821)	1:A:534:GLN:H	1:A:534:GLN:HG3	16	0.29
(1,2814)	1:A:533:LEU:H	1:A:533:LEU:HB3	3	0.29
(1,2814)	1:A:533:LEU:H	1:A:533:LEU:HB3	7	0.29
(1,2814)	1:A:533:LEU:H	1:A:533:LEU:HB3	11	0.29
(1,2814)	1:A:533:LEU:H	1:A:533:LEU:HB3	15	0.29
(1,2814)	1:A:533:LEU:H	1:A:533:LEU:HB3	17	0.29
(1,2814)	1:A:533:LEU:H	1:A:533:LEU:HB3	19	0.29
(1,2813)	1:A:532:ARG:HA	1:A:532:ARG:HG3	10	0.29
(1,2803)	1:A:529:LYS:HA	1:A:529:LYS:HD3	1	0.29
(1,2803)	1:A:529:LYS:HA	1:A:529:LYS:HD3	2	0.29
(1,2803)	1:A:529:LYS:HA	1:A:529:LYS:HD3	7	0.29

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2803)	1:A:529:LYS:HA	1:A:529:LYS:HD3	11	0.29
(1,2800)	1:A:529:LYS:H	1:A:529:LYS:HD3	10	0.29
(1,2796)	1:A:527:THR:HA	1:A:529:LYS:HD3	3	0.29
(1,2769)	1:A:519:ILE:HD11	1:A:523:LYS:HE3	2	0.29
(1,2769)	1:A:519:ILE:HD12	1:A:523:LYS:HE3	2	0.29
(1,2769)	1:A:519:ILE:HD13	1:A:523:LYS:HE3	2	0.29
(1,2723)	1:A:512:ARG:HB3	1:A:512:ARG:HD3	18	0.29
(1,2714)	1:A:511:VAL:HG11	1:A:513:LEU:HB3	2	0.29
(1,2714)	1:A:511:VAL:HG12	1:A:513:LEU:HB3	2	0.29
(1,2714)	1:A:511:VAL:HG13	1:A:513:LEU:HB3	2	0.29
(1,2714)	1:A:511:VAL:HG21	1:A:513:LEU:HB3	2	0.29
(1,2714)	1:A:511:VAL:HG22	1:A:513:LEU:HB3	2	0.29
(1,2714)	1:A:511:VAL:HG23	1:A:513:LEU:HB3	2	0.29
(1,2685)	1:A:502:ASP:HB3	1:A:503:THR:H	15	0.29
(1,2680)	1:A:499:LEU:HB3	1:A:500:SER:HB3	4	0.29
(1,2669)	1:A:495:SER:HB3	1:A:498:GLN:HB3	14	0.29
(1,2656)	1:A:493:GLU:HA	1:A:493:GLU:HG3	9	0.29
(1,2655)	1:A:493:GLU:H	1:A:493:GLU:HG3	8	0.29
(1,264)	1:A:480:GLN:HG3	1:A:482:SER:H	15	0.29
(1,2560)	1:A:480:GLN:HB3	1:A:481:GLY:H	10	0.29
(1,2560)	1:A:480:GLN:HB3	1:A:481:GLY:H	11	0.29
(1,2560)	1:A:480:GLN:HB3	1:A:481:GLY:H	16	0.29
(1,2553)	1:A:479:ARG:H	1:A:479:ARG:HB3	13	0.29
(1,2546)	1:A:476:ASN:HB3	1:A:479:ARG:HG3	13	0.29
(1,2528)	1:A:471:GLN:HG3	1:A:471:GLN:HE21	10	0.29
(1,2528)	1:A:471:GLN:HG3	1:A:471:GLN:HE22	10	0.29
(1,2526)	1:A:471:GLN:HB3	1:A:471:GLN:HG3	8	0.29
(1,2496)	1:A:466:LEU:HB3	1:A:469:VAL:HG11	3	0.29
(1,2496)	1:A:466:LEU:HB3	1:A:469:VAL:HG12	3	0.29
(1,2496)	1:A:466:LEU:HB3	1:A:469:VAL:HG13	3	0.29
(1,2496)	1:A:466:LEU:HB3	1:A:469:VAL:HG21	3	0.29
(1,2496)	1:A:466:LEU:HB3	1:A:469:VAL:HG22	3	0.29
(1,2496)	1:A:466:LEU:HB3	1:A:469:VAL:HG23	3	0.29
(1,249)	1:A:407:HIS:HB3	1:A:410:LEU:H	15	0.29
(1,2479)	1:A:463:ARG:HD3	1:A:464:LEU:H	10	0.29
(1,2478)	1:A:463:ARG:H	1:A:463:ARG:HD3	9	0.29
(1,2437)	1:A:454:LEU:H	1:A:489:PHE:HB3	12	0.29
(1,2407)	1:A:446:ILE:H	1:A:446:ILE:HG13	19	0.29
(1,2406)	1:A:444:ASP:HB3	1:A:445:ALA:H	13	0.29
(1,2377)	1:A:438:GLU:HB3	1:A:439:LEU:H	9	0.29
(1,2342)	1:A:429:GLU:H	1:A:429:GLU:HG3	1	0.29
(1,2341)	1:A:428:CYS:HA	1:A:429:GLU:HB3	8	0.29

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2316)	1:A:420:GLY:HA2	1:A:524:VAL:HG11	16	0.29
(1,2316)	1:A:420:GLY:HA2	1:A:524:VAL:HG12	16	0.29
(1,2316)	1:A:420:GLY:HA2	1:A:524:VAL:HG13	16	0.29
(1,2316)	1:A:420:GLY:HA2	1:A:524:VAL:HG21	16	0.29
(1,2316)	1:A:420:GLY:HA2	1:A:524:VAL:HG22	16	0.29
(1,2316)	1:A:420:GLY:HA2	1:A:524:VAL:HG23	16	0.29
(1,2256)	1:A:414:GLU:HG3	1:A:415:LYS:H	16	0.29
(1,2214)	1:A:406:GLU:HG3	1:A:407:HIS:HA	2	0.29
(1,2188)	1:A:400:LEU:HB3	1:A:401:HIS:H	13	0.29
(1,2179)	1:A:398:VAL:HG11	1:A:449:SER:HB3	3	0.29
(1,2179)	1:A:398:VAL:HG12	1:A:449:SER:HB3	3	0.29
(1,2179)	1:A:398:VAL:HG13	1:A:449:SER:HB3	3	0.29
(1,2179)	1:A:398:VAL:HG21	1:A:449:SER:HB3	3	0.29
(1,2179)	1:A:398:VAL:HG22	1:A:449:SER:HB3	3	0.29
(1,2179)	1:A:398:VAL:HG23	1:A:449:SER:HB3	3	0.29
(1,2156)	1:A:396:ASN:HB3	1:A:397:PHE:HE1	10	0.29
(1,2156)	1:A:396:ASN:HB3	1:A:397:PHE:HE2	10	0.29
(1,2145)	1:A:393:LYS:HG3	1:A:393:LYS:HE3	17	0.29
(1,2137)	1:A:392:GLN:HA	1:A:393:LYS:HB3	18	0.29
(1,2027)	1:A:389:SER:HB3	1:A:390:SER:H	5	0.29
(1,2008)	1:A:462:CYS:HA	1:A:465:SER:HB3	16	0.29
(1,1964)	1:A:540:TRP:HA	1:A:541:ARG:HB3	10	0.29
(1,1881)	1:A:536:ARG:HA	1:A:536:ARG:HD3	16	0.29
(1,1739)	1:A:436:ARG:HG3	1:A:436:ARG:HD3	2	0.29
(1,1739)	1:A:436:ARG:HG3	1:A:436:ARG:HD3	4	0.29
(1,1728)	1:A:532:ARG:HB3	1:A:532:ARG:HD3	13	0.29
(1,1705)	1:A:393:LYS:HE3	1:A:395:TYR:HE1	9	0.29
(1,1705)	1:A:393:LYS:HE3	1:A:395:TYR:HE2	9	0.29
(1,1656)	1:A:432:GLN:HG3	1:A:433:VAL:H	6	0.29
(1,1633)	1:A:474:MET:HB3	1:A:474:MET:HG3	15	0.29
(1,1617)	1:A:415:LYS:H	1:A:415:LYS:HD3	16	0.29
(1,1616)	1:A:415:LYS:HD3	1:A:520:PHE:HE1	9	0.29
(1,1616)	1:A:415:LYS:HD3	1:A:520:PHE:HE2	9	0.29
(1,1609)	1:A:394:PHE:HD1	1:A:537:LYS:HD3	11	0.29
(1,1609)	1:A:394:PHE:HD2	1:A:537:LYS:HD3	11	0.29
(1,1608)	1:A:534:GLN:HA	1:A:537:LYS:HD3	17	0.29
(1,1571)	1:A:479:ARG:H	1:A:479:ARG:HG3	4	0.29
(1,1571)	1:A:479:ARG:H	1:A:479:ARG:HG3	9	0.29
(1,1203)	1:A:471:GLN:HB3	1:A:472:ALA:HB1	17	0.29
(1,1203)	1:A:471:GLN:HB3	1:A:472:ALA:HB2	17	0.29
(1,1203)	1:A:471:GLN:HB3	1:A:472:ALA:HB3	17	0.29
(1,1090)	1:A:518:GLN:HG3	1:A:519:ILE:HD11	15	0.29

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1090)	1:A:518:GLN:HG3	1:A:519:ILE:HD12	15	0.29
(1,1090)	1:A:518:GLN:HG3	1:A:519:ILE:HD13	15	0.29
(1,910)	1:A:417:GLU:HG3	1:A:418:ALA:H	1	0.28
(1,811)	1:A:391:GLU:H	1:A:391:GLU:HG3	12	0.28
(1,786)	1:A:471:GLN:HB3	1:A:472:ALA:H	8	0.28
(1,756)	1:A:479:ARG:H	1:A:479:ARG:HD3	19	0.28
(1,636)	1:A:463:ARG:HB3	1:A:464:LEU:H	3	0.28
(1,431)	1:A:534:GLN:H	1:A:534:GLN:HB3	1	0.28
(1,2839)	1:A:542:LYS:HG3	1:A:543:GLU:H	9	0.28
(1,2824)	1:A:534:GLN:HG3	1:A:535:ALA:HB1	5	0.28
(1,2824)	1:A:534:GLN:HG3	1:A:535:ALA:HB2	5	0.28
(1,2824)	1:A:534:GLN:HG3	1:A:535:ALA:HB3	5	0.28
(1,2814)	1:A:533:LEU:H	1:A:533:LEU:HB3	2	0.28
(1,2808)	1:A:529:LYS:HB3	1:A:531:HIS:HE1	18	0.28
(1,2803)	1:A:529:LYS:HA	1:A:529:LYS:HD3	3	0.28
(1,2803)	1:A:529:LYS:HA	1:A:529:LYS:HD3	6	0.28
(1,2803)	1:A:529:LYS:HA	1:A:529:LYS:HD3	10	0.28
(1,2800)	1:A:529:LYS:H	1:A:529:LYS:HD3	16	0.28
(1,2796)	1:A:527:THR:HA	1:A:529:LYS:HD3	18	0.28
(1,2759)	1:A:516:HIS:HB3	1:A:517:SER:H	18	0.28
(1,2757)	1:A:515:GLU:HG3	1:A:516:HIS:H	8	0.28
(1,2741)	1:A:513:LEU:HD11	1:A:523:LYS:HE3	1	0.28
(1,2741)	1:A:513:LEU:HD12	1:A:523:LYS:HE3	1	0.28
(1,2741)	1:A:513:LEU:HD13	1:A:523:LYS:HE3	1	0.28
(1,2741)	1:A:513:LEU:HD21	1:A:523:LYS:HE3	1	0.28
(1,2741)	1:A:513:LEU:HD22	1:A:523:LYS:HE3	1	0.28
(1,2741)	1:A:513:LEU:HD23	1:A:523:LYS:HE3	1	0.28
(1,2741)	1:A:513:LEU:HD11	1:A:523:LYS:HE3	10	0.28
(1,2741)	1:A:513:LEU:HD12	1:A:523:LYS:HE3	10	0.28
(1,2741)	1:A:513:LEU:HD13	1:A:523:LYS:HE3	10	0.28
(1,2741)	1:A:513:LEU:HD21	1:A:523:LYS:HE3	10	0.28
(1,2741)	1:A:513:LEU:HD22	1:A:523:LYS:HE3	10	0.28
(1,2741)	1:A:513:LEU:HD23	1:A:523:LYS:HE3	10	0.28
(1,2741)	1:A:513:LEU:HD11	1:A:523:LYS:HE3	13	0.28
(1,2741)	1:A:513:LEU:HD12	1:A:523:LYS:HE3	13	0.28
(1,2741)	1:A:513:LEU:HD13	1:A:523:LYS:HE3	13	0.28
(1,2741)	1:A:513:LEU:HD21	1:A:523:LYS:HE3	13	0.28
(1,2741)	1:A:513:LEU:HD22	1:A:523:LYS:HE3	13	0.28
(1,2741)	1:A:513:LEU:HD23	1:A:523:LYS:HE3	13	0.28
(1,2723)	1:A:512:ARG:HB3	1:A:512:ARG:HD3	11	0.28
(1,2723)	1:A:512:ARG:HB3	1:A:512:ARG:HD3	16	0.28
(1,2721)	1:A:512:ARG:H	1:A:512:ARG:HG3	6	0.28

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2699)	1:A:507:LEU:HD11	1:A:512:ARG:HD3	11	0.28
(1,2699)	1:A:507:LEU:HD12	1:A:512:ARG:HD3	11	0.28
(1,2699)	1:A:507:LEU:HD13	1:A:512:ARG:HD3	11	0.28
(1,2699)	1:A:507:LEU:HD21	1:A:512:ARG:HD3	11	0.28
(1,2699)	1:A:507:LEU:HD22	1:A:512:ARG:HD3	11	0.28
(1,2699)	1:A:507:LEU:HD23	1:A:512:ARG:HD3	11	0.28
(1,2685)	1:A:502:ASP:HB3	1:A:503:THR:H	10	0.28
(1,2669)	1:A:495:SER:HB3	1:A:498:GLN:HB3	6	0.28
(1,2576)	1:A:485:CYS:H	1:A:485:CYS:HB3	16	0.28
(1,2576)	1:A:485:CYS:H	1:A:485:CYS:HB3	17	0.28
(1,2575)	1:A:484:ASP:HB3	1:A:485:CYS:H	16	0.28
(1,2569)	1:A:483:PRO:HB3	1:A:485:CYS:H	9	0.28
(1,2560)	1:A:480:GLN:HB3	1:A:481:GLY:H	18	0.28
(1,2536)	1:A:473:MET:HB3	1:A:474:MET:H	3	0.28
(1,2508)	1:A:468:GLN:HA	1:A:468:GLN:HG3	3	0.28
(1,249)	1:A:407:HIS:HB3	1:A:410:LEU:H	16	0.28
(1,2481)	1:A:463:ARG:HE	1:A:502:ASP:HB3	2	0.28
(1,2480)	1:A:463:ARG:HD3	1:A:506:LEU:HD21	20	0.28
(1,2480)	1:A:463:ARG:HD3	1:A:506:LEU:HD22	20	0.28
(1,2480)	1:A:463:ARG:HD3	1:A:506:LEU:HD23	20	0.28
(1,2472)	1:A:458:SER:HB3	1:A:459:ASN:H	5	0.28
(1,2437)	1:A:454:LEU:H	1:A:489:PHE:HB3	10	0.28
(1,2385)	1:A:439:LEU:HD11	1:A:444:ASP:HB3	16	0.28
(1,2385)	1:A:439:LEU:HD12	1:A:444:ASP:HB3	16	0.28
(1,2385)	1:A:439:LEU:HD13	1:A:444:ASP:HB3	16	0.28
(1,2385)	1:A:439:LEU:HD21	1:A:444:ASP:HB3	16	0.28
(1,2385)	1:A:439:LEU:HD22	1:A:444:ASP:HB3	16	0.28
(1,2385)	1:A:439:LEU:HD23	1:A:444:ASP:HB3	16	0.28
(1,2372)	1:A:436:ARG:HB3	1:A:436:ARG:HD3	1	0.28
(1,2369)	1:A:436:ARG:H	1:A:436:ARG:HB3	15	0.28
(1,2357)	1:A:432:GLN:HB3	1:A:433:VAL:H	16	0.28
(1,2354)	1:A:432:GLN:H	1:A:432:GLN:HB3	15	0.28
(1,2353)	1:A:431:PHE:HB3	1:A:433:VAL:H	13	0.28
(1,2352)	1:A:431:PHE:HB3	1:A:432:GLN:H	14	0.28
(1,2344)	1:A:430:ASP:H	1:A:430:ASP:HB3	11	0.28
(1,2254)	1:A:414:GLU:HB3	1:A:414:GLU:HG3	16	0.28
(1,2241)	1:A:411:ARG:HA	1:A:411:ARG:HD3	6	0.28
(1,2214)	1:A:406:GLU:HG3	1:A:407:HIS:HA	11	0.28
(1,2202)	1:A:405:ASP:HB3	1:A:406:GLU:H	19	0.28
(1,2130)	1:A:387:GLU:HB3	1:A:390:SER:HA	17	0.28
(1,1964)	1:A:540:TRP:HA	1:A:541:ARG:HB3	8	0.28
(1,1911)	1:A:389:SER:HA	1:A:389:SER:HB3	7	0.28

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1911)	1:A:389:SER:HA	1:A:389:SER:HB3	9	0.28
(1,1911)	1:A:389:SER:HA	1:A:389:SER:HB3	15	0.28
(1,1881)	1:A:536:ARG:HA	1:A:536:ARG:HD3	10	0.28
(1,1765)	1:A:402:ALA:HA	1:A:403:ARG:HB3	4	0.28
(1,175)	1:A:474:MET:HB3	1:A:475:SER:H	1	0.28
(1,175)	1:A:474:MET:HB3	1:A:475:SER:H	2	0.28
(1,175)	1:A:474:MET:HB3	1:A:475:SER:H	9	0.28
(1,175)	1:A:474:MET:HB3	1:A:475:SER:H	10	0.28
(1,1709)	1:A:542:LYS:HB3	1:A:542:LYS:HE3	12	0.28
(1,1676)	1:A:416:LEU:HG	1:A:417:GLU:HG3	14	0.28
(1,1633)	1:A:474:MET:HB3	1:A:474:MET:HG3	6	0.28
(1,1633)	1:A:474:MET:HB3	1:A:474:MET:HG3	8	0.28
(1,1633)	1:A:474:MET:HB3	1:A:474:MET:HG3	12	0.28
(1,1605)	1:A:539:MET:HA	1:A:542:LYS:HD3	6	0.28
(1,1578)	1:A:462:CYS:HB3	1:A:463:ARG:HB3	13	0.28
(1,1532)	1:A:490:LEU:HD21	1:A:512:ARG:HD3	5	0.28
(1,1532)	1:A:490:LEU:HD22	1:A:512:ARG:HD3	5	0.28
(1,1532)	1:A:490:LEU:HD23	1:A:512:ARG:HD3	5	0.28
(1,1275)	1:A:398:VAL:HG21	1:A:449:SER:HB3	19	0.28
(1,1275)	1:A:398:VAL:HG22	1:A:449:SER:HB3	19	0.28
(1,1275)	1:A:398:VAL:HG23	1:A:449:SER:HB3	19	0.28
(1,1275)	1:A:398:VAL:HG21	1:A:449:SER:HB3	20	0.28
(1,1275)	1:A:398:VAL:HG22	1:A:449:SER:HB3	20	0.28
(1,1275)	1:A:398:VAL:HG23	1:A:449:SER:HB3	20	0.28
(1,1203)	1:A:471:GLN:HB3	1:A:472:ALA:HB1	7	0.28
(1,1203)	1:A:471:GLN:HB3	1:A:472:ALA:HB2	7	0.28
(1,1203)	1:A:471:GLN:HB3	1:A:472:ALA:HB3	7	0.28
(1,835)	1:A:415:LYS:H	1:A:415:LYS:HG3	12	0.27
(1,829)	1:A:534:GLN:HB3	1:A:535:ALA:H	12	0.27
(1,679)	1:A:436:ARG:H	1:A:436:ARG:HD3	10	0.27
(1,553)	1:A:541:ARG:HB3	1:A:542:LYS:H	9	0.27
(1,552)	1:A:542:LYS:H	1:A:542:LYS:HD3	17	0.27
(1,543)	1:A:462:CYS:HB3	1:A:463:ARG:H	19	0.27
(1,543)	1:A:462:CYS:HB3	1:A:463:ARG:H	20	0.27
(1,449)	1:A:543:GLU:HB3	1:A:544:GLN:H	1	0.27
(1,2840)	1:A:543:GLU:HA	1:A:543:GLU:HG3	4	0.27
(1,2839)	1:A:542:LYS:HG3	1:A:543:GLU:H	18	0.27
(1,2814)	1:A:533:LEU:H	1:A:533:LEU:HB3	5	0.27
(1,2814)	1:A:533:LEU:H	1:A:533:LEU:HB3	12	0.27
(1,2814)	1:A:533:LEU:H	1:A:533:LEU:HB3	16	0.27
(1,2803)	1:A:529:LYS:HA	1:A:529:LYS:HD3	16	0.27
(1,2803)	1:A:529:LYS:HA	1:A:529:LYS:HD3	18	0.27

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2800)	1:A:529:LYS:H	1:A:529:LYS:HD3	15	0.27
(1,2800)	1:A:529:LYS:H	1:A:529:LYS:HD3	20	0.27
(1,2783)	1:A:523:LYS:HG3	1:A:523:LYS:HE3	16	0.27
(1,2721)	1:A:512:ARG:H	1:A:512:ARG:HG3	19	0.27
(1,2710)	1:A:511:VAL:HA	1:A:512:ARG:HB3	8	0.27
(1,2702)	1:A:510:LEU:H	1:A:510:LEU:HB3	14	0.27
(1,2702)	1:A:510:LEU:H	1:A:510:LEU:HB3	19	0.27
(1,2699)	1:A:507:LEU:HD11	1:A:512:ARG:HD3	1	0.27
(1,2699)	1:A:507:LEU:HD12	1:A:512:ARG:HD3	1	0.27
(1,2699)	1:A:507:LEU:HD13	1:A:512:ARG:HD3	1	0.27
(1,2699)	1:A:507:LEU:HD21	1:A:512:ARG:HD3	1	0.27
(1,2699)	1:A:507:LEU:HD22	1:A:512:ARG:HD3	1	0.27
(1,2699)	1:A:507:LEU:HD23	1:A:512:ARG:HD3	1	0.27
(1,2681)	1:A:500:SER:H	1:A:500:SER:HB3	1	0.27
(1,2681)	1:A:500:SER:H	1:A:500:SER:HB3	17	0.27
(1,2681)	1:A:500:SER:H	1:A:500:SER:HB3	19	0.27
(1,2669)	1:A:495:SER:HB3	1:A:498:GLN:HB3	13	0.27
(1,2669)	1:A:495:SER:HB3	1:A:498:GLN:HB3	19	0.27
(1,2659)	1:A:494:SER:H	1:A:494:SER:HB3	18	0.27
(1,2656)	1:A:493:GLU:HA	1:A:493:GLU:HG3	15	0.27
(1,2641)	1:A:492:LEU:HB3	1:A:493:GLU:H	20	0.27
(1,2541)	1:A:475:SER:H	1:A:476:ASN:HB3	14	0.27
(1,2541)	1:A:475:SER:H	1:A:476:ASN:HB3	15	0.27
(1,2526)	1:A:471:GLN:HB3	1:A:471:GLN:HG3	9	0.27
(1,2520)	1:A:470:ASN:H	1:A:470:ASN:HB3	8	0.27
(1,2499)	1:A:466:LEU:HD11	1:A:467:HIS:HB3	20	0.27
(1,2499)	1:A:466:LEU:HD12	1:A:467:HIS:HB3	20	0.27
(1,2499)	1:A:466:LEU:HD13	1:A:467:HIS:HB3	20	0.27
(1,2499)	1:A:466:LEU:HD21	1:A:467:HIS:HB3	20	0.27
(1,2499)	1:A:466:LEU:HD22	1:A:467:HIS:HB3	20	0.27
(1,2499)	1:A:466:LEU:HD23	1:A:467:HIS:HB3	20	0.27
(1,2495)	1:A:466:LEU:HB3	1:A:467:HIS:HB3	19	0.27
(1,2479)	1:A:463:ARG:HD3	1:A:464:LEU:H	19	0.27
(1,2432)	1:A:453:ILE:HG13	1:A:454:LEU:H	17	0.27
(1,2352)	1:A:431:PHE:HB3	1:A:432:GLN:H	7	0.27
(1,2350)	1:A:431:PHE:HA	1:A:432:GLN:HB3	4	0.27
(1,2344)	1:A:430:ASP:H	1:A:430:ASP:HB3	10	0.27
(1,2342)	1:A:429:GLU:H	1:A:429:GLU:HG3	14	0.27
(1,2255)	1:A:414:GLU:HB3	1:A:415:LYS:H	5	0.27
(1,2240)	1:A:411:ARG:HA	1:A:411:ARG:HG3	2	0.27
(1,2161)	1:A:397:PHE:HB3	1:A:398:VAL:H	8	0.27
(1,2152)	1:A:395:TYR:HB3	1:A:397:PHE:HA	19	0.27

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2139)	1:A:392:GLN:HG3	1:A:393:LYS:H	7	0.27
(1,2074)	1:A:393:LYS:HD3	1:A:395:TYR:HE1	12	0.27
(1,2074)	1:A:393:LYS:HD3	1:A:395:TYR:HE2	12	0.27
(1,2027)	1:A:389:SER:HB3	1:A:390:SER:H	17	0.27
(1,2020)	1:A:504:ALA:HB1	1:A:505:SER:HB3	17	0.27
(1,2020)	1:A:504:ALA:HB2	1:A:505:SER:HB3	17	0.27
(1,2020)	1:A:504:ALA:HB3	1:A:505:SER:HB3	17	0.27
(1,1988)	1:A:403:ARG:HA	1:A:403:ARG:HD3	16	0.27
(1,1911)	1:A:389:SER:HA	1:A:389:SER:HB3	3	0.27
(1,1911)	1:A:389:SER:HA	1:A:389:SER:HB3	17	0.27
(1,1731)	1:A:532:ARG:HD3	1:A:533:LEU:H	5	0.27
(1,1723)	1:A:403:ARG:HD3	1:A:403:ARG:HH22	13	0.27
(1,1709)	1:A:542:LYS:HB3	1:A:542:LYS:HE3	11	0.27
(1,1676)	1:A:416:LEU:HG	1:A:417:GLU:HG3	15	0.27
(1,1659)	1:A:480:GLN:HA	1:A:480:GLN:HG3	9	0.27
(1,165)	1:A:463:ARG:HB3	1:A:465:SER:H	17	0.27
(1,165)	1:A:463:ARG:HB3	1:A:465:SER:H	18	0.27
(1,1625)	1:A:514:ASP:HA	1:A:515:GLU:HB3	17	0.27
(1,1618)	1:A:463:ARG:HB3	1:A:506:LEU:HD11	4	0.27
(1,1618)	1:A:463:ARG:HB3	1:A:506:LEU:HD12	4	0.27
(1,1618)	1:A:463:ARG:HB3	1:A:506:LEU:HD13	4	0.27
(1,1598)	1:A:393:LYS:HA	1:A:393:LYS:HD3	19	0.27
(1,1198)	1:A:532:ARG:HB3	1:A:535:ALA:HB1	5	0.27
(1,1198)	1:A:532:ARG:HB3	1:A:535:ALA:HB2	5	0.27
(1,1198)	1:A:532:ARG:HB3	1:A:535:ALA:HB3	5	0.27
(1,1000)	1:A:515:GLU:H	1:A:515:GLU:HB3	10	0.27
(1,829)	1:A:534:GLN:HB3	1:A:535:ALA:H	11	0.26
(1,768)	1:A:537:LYS:H	1:A:537:LYS:HD3	14	0.26
(1,756)	1:A:479:ARG:H	1:A:479:ARG:HD3	11	0.26
(1,681)	1:A:479:ARG:HG3	1:A:479:ARG:HE	7	0.26
(1,652)	1:A:480:GLN:H	1:A:480:GLN:HG3	1	0.26
(1,600)	1:A:403:ARG:HB3	1:A:403:ARG:HE	4	0.26
(1,579)	1:A:532:ARG:HB3	1:A:533:LEU:H	1	0.26
(1,561)	1:A:543:GLU:HB3	1:A:545:ASP:H	11	0.26
(1,543)	1:A:462:CYS:HB3	1:A:463:ARG:H	4	0.26
(1,536)	1:A:543:GLU:H	1:A:543:GLU:HB3	18	0.26
(1,536)	1:A:543:GLU:H	1:A:543:GLU:HB3	20	0.26
(1,535)	1:A:542:LYS:HB3	1:A:543:GLU:H	9	0.26
(1,523)	1:A:529:LYS:H	1:A:529:LYS:HE3	7	0.26
(1,484)	1:A:419:LEU:H	1:A:420:GLY:HA3	3	0.26
(1,345)	1:A:467:HIS:H	1:A:467:HIS:HB3	18	0.26
(1,337)	1:A:501:SER:HB3	1:A:503:THR:H	8	0.26

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2831)	1:A:539:MET:HG3	1:A:540:TRP:H	11	0.26
(1,2828)	1:A:537:LYS:HG3	1:A:538:ALA:H	5	0.26
(1,2808)	1:A:529:LYS:HB3	1:A:531:HIS:HE1	6	0.26
(1,2803)	1:A:529:LYS:HA	1:A:529:LYS:HD3	12	0.26
(1,2757)	1:A:515:GLU:HG3	1:A:516:HIS:H	3	0.26
(1,2757)	1:A:515:GLU:HG3	1:A:516:HIS:H	20	0.26
(1,2756)	1:A:515:GLU:HA	1:A:515:GLU:HG3	14	0.26
(1,2723)	1:A:512:ARG:HB3	1:A:512:ARG:HD3	19	0.26
(1,2702)	1:A:510:LEU:H	1:A:510:LEU:HB3	15	0.26
(1,2700)	1:A:509:GLY:H	1:A:510:LEU:HB3	5	0.26
(1,2681)	1:A:500:SER:H	1:A:500:SER:HB3	10	0.26
(1,2674)	1:A:496:PRO:HD3	1:A:516:HIS:HE1	7	0.26
(1,2648)	1:A:492:LEU:HD11	1:A:515:GLU:HG3	17	0.26
(1,2648)	1:A:492:LEU:HD12	1:A:515:GLU:HG3	17	0.26
(1,2648)	1:A:492:LEU:HD13	1:A:515:GLU:HG3	17	0.26
(1,2648)	1:A:492:LEU:HD21	1:A:515:GLU:HG3	17	0.26
(1,2648)	1:A:492:LEU:HD22	1:A:515:GLU:HG3	17	0.26
(1,2648)	1:A:492:LEU:HD23	1:A:515:GLU:HG3	17	0.26
(1,2641)	1:A:492:LEU:HB3	1:A:493:GLU:H	8	0.26
(1,2641)	1:A:492:LEU:HB3	1:A:493:GLU:H	15	0.26
(1,2571)	1:A:484:ASP:H	1:A:484:ASP:HB3	6	0.26
(1,2563)	1:A:480:GLN:HG3	1:A:480:GLN:HE21	4	0.26
(1,2563)	1:A:480:GLN:HG3	1:A:480:GLN:HE22	4	0.26
(1,2538)	1:A:473:MET:HE1	1:A:485:CYS:HB3	10	0.26
(1,2538)	1:A:473:MET:HE2	1:A:485:CYS:HB3	10	0.26
(1,2538)	1:A:473:MET:HE3	1:A:485:CYS:HB3	10	0.26
(1,2520)	1:A:470:ASN:H	1:A:470:ASN:HB3	11	0.26
(1,2499)	1:A:466:LEU:HD11	1:A:467:HIS:HB3	5	0.26
(1,2499)	1:A:466:LEU:HD12	1:A:467:HIS:HB3	5	0.26
(1,2499)	1:A:466:LEU:HD13	1:A:467:HIS:HB3	5	0.26
(1,2499)	1:A:466:LEU:HD21	1:A:467:HIS:HB3	5	0.26
(1,2499)	1:A:466:LEU:HD22	1:A:467:HIS:HB3	5	0.26
(1,2499)	1:A:466:LEU:HD23	1:A:467:HIS:HB3	5	0.26
(1,2406)	1:A:444:ASP:HB3	1:A:445:ALA:H	11	0.26
(1,2369)	1:A:436:ARG:H	1:A:436:ARG:HB3	1	0.26
(1,2350)	1:A:431:PHE:HA	1:A:432:GLN:HB3	9	0.26
(1,2350)	1:A:431:PHE:HA	1:A:432:GLN:HB3	18	0.26
(1,2350)	1:A:431:PHE:HA	1:A:432:GLN:HB3	19	0.26
(1,2336)	1:A:423:ASP:HB3	1:A:424:GLY:H	11	0.26
(1,2316)	1:A:420:GLY:HA2	1:A:524:VAL:HG11	20	0.26
(1,2316)	1:A:420:GLY:HA2	1:A:524:VAL:HG12	20	0.26
(1,2316)	1:A:420:GLY:HA2	1:A:524:VAL:HG13	20	0.26

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2316)	1:A:420:GLY:HA2	1:A:524:VAL:HG21	20	0.26
(1,2316)	1:A:420:GLY:HA2	1:A:524:VAL:HG22	20	0.26
(1,2316)	1:A:420:GLY:HA2	1:A:524:VAL:HG23	20	0.26
(1,2257)	1:A:415:LYS:H	1:A:415:LYS:HE3	16	0.26
(1,2252)	1:A:414:GLU:H	1:A:423:ASP:HB3	10	0.26
(1,2252)	1:A:414:GLU:H	1:A:423:ASP:HB3	16	0.26
(1,2241)	1:A:411:ARG:HA	1:A:411:ARG:HD3	11	0.26
(1,2203)	1:A:405:ASP:HB3	1:A:408:ILE:H	9	0.26
(1,2128)	1:A:387:GLU:HB3	1:A:388:SER:H	8	0.26
(1,2021)	1:A:505:SER:HB3	1:A:506:LEU:HG	18	0.26
(1,2020)	1:A:504:ALA:HB1	1:A:505:SER:HB3	19	0.26
(1,2020)	1:A:504:ALA:HB2	1:A:505:SER:HB3	19	0.26
(1,2020)	1:A:504:ALA:HB3	1:A:505:SER:HB3	19	0.26
(1,1911)	1:A:389:SER:HA	1:A:389:SER:HB3	10	0.26
(1,1881)	1:A:536:ARG:HA	1:A:536:ARG:HD3	6	0.26
(1,1881)	1:A:536:ARG:HA	1:A:536:ARG:HD3	12	0.26
(1,1707)	1:A:542:LYS:HG3	1:A:542:LYS:HE3	3	0.26
(1,1707)	1:A:542:LYS:HG3	1:A:542:LYS:HE3	6	0.26
(1,1705)	1:A:393:LYS:HE3	1:A:395:TYR:HE1	10	0.26
(1,1705)	1:A:393:LYS:HE3	1:A:395:TYR:HE2	10	0.26
(1,1704)	1:A:393:LYS:HA	1:A:393:LYS:HE3	10	0.26
(1,1701)	1:A:393:LYS:HG3	1:A:393:LYS:HE3	2	0.26
(1,1670)	1:A:438:GLU:HA	1:A:438:GLU:HG3	13	0.26
(1,1659)	1:A:480:GLN:HA	1:A:480:GLN:HG3	3	0.26
(1,1656)	1:A:432:GLN:HG3	1:A:433:VAL:H	15	0.26
(1,164)	1:A:465:SER:H	1:A:466:LEU:HB3	1	0.26
(1,164)	1:A:465:SER:H	1:A:466:LEU:HB3	7	0.26
(1,1618)	1:A:463:ARG:HB3	1:A:506:LEU:HD11	15	0.26
(1,1618)	1:A:463:ARG:HB3	1:A:506:LEU:HD12	15	0.26
(1,1618)	1:A:463:ARG:HB3	1:A:506:LEU:HD13	15	0.26
(1,1617)	1:A:415:LYS:H	1:A:415:LYS:HD3	14	0.26
(1,1616)	1:A:415:LYS:HD3	1:A:520:PHE:HE1	12	0.26
(1,1616)	1:A:415:LYS:HD3	1:A:520:PHE:HE2	12	0.26
(1,1611)	1:A:537:LYS:HD3	1:A:538:ALA:H	17	0.26
(1,1607)	1:A:537:LYS:HA	1:A:537:LYS:HD3	2	0.26
(1,1203)	1:A:471:GLN:HB3	1:A:472:ALA:HB1	4	0.26
(1,1203)	1:A:471:GLN:HB3	1:A:472:ALA:HB2	4	0.26
(1,1203)	1:A:471:GLN:HB3	1:A:472:ALA:HB3	4	0.26
(1,98)	1:A:417:GLU:HG3	1:A:423:ASP:H	18	0.25
(1,731)	1:A:538:ALA:H	1:A:539:MET:HB3	8	0.25
(1,676)	1:A:436:ARG:H	1:A:436:ARG:HG3	6	0.25
(1,652)	1:A:480:GLN:H	1:A:480:GLN:HG3	18	0.25

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,579)	1:A:532:ARG:HB3	1:A:533:LEU:H	7	0.25
(1,552)	1:A:542:LYS:H	1:A:542:LYS:HD3	14	0.25
(1,536)	1:A:543:GLU:H	1:A:543:GLU:HB3	8	0.25
(1,536)	1:A:543:GLU:H	1:A:543:GLU:HB3	10	0.25
(1,536)	1:A:543:GLU:H	1:A:543:GLU:HB3	14	0.25
(1,431)	1:A:534:GLN:H	1:A:534:GLN:HB3	4	0.25
(1,421)	1:A:466:LEU:HB3	1:A:468:GLN:H	12	0.25
(1,397)	1:A:536:ARG:H	1:A:536:ARG:HD3	15	0.25
(1,2836)	1:A:541:ARG:HG3	1:A:541:ARG:HE	9	0.25
(1,2828)	1:A:537:LYS:HG3	1:A:538:ALA:H	12	0.25
(1,2821)	1:A:534:GLN:H	1:A:534:GLN:HG3	10	0.25
(1,2812)	1:A:531:HIS:HA	1:A:534:GLN:HG3	11	0.25
(1,2808)	1:A:529:LYS:HB3	1:A:531:HIS:HE1	1	0.25
(1,2800)	1:A:529:LYS:H	1:A:529:LYS:HD3	2	0.25
(1,2783)	1:A:523:LYS:HG3	1:A:523:LYS:HE3	17	0.25
(1,2756)	1:A:515:GLU:HA	1:A:515:GLU:HG3	6	0.25
(1,2732)	1:A:513:LEU:HB3	1:A:520:PHE:HD1	19	0.25
(1,2732)	1:A:513:LEU:HB3	1:A:520:PHE:HD2	19	0.25
(1,2721)	1:A:512:ARG:H	1:A:512:ARG:HG3	16	0.25
(1,2714)	1:A:511:VAL:HG11	1:A:513:LEU:HB3	14	0.25
(1,2714)	1:A:511:VAL:HG12	1:A:513:LEU:HB3	14	0.25
(1,2714)	1:A:511:VAL:HG13	1:A:513:LEU:HB3	14	0.25
(1,2714)	1:A:511:VAL:HG21	1:A:513:LEU:HB3	14	0.25
(1,2714)	1:A:511:VAL:HG22	1:A:513:LEU:HB3	14	0.25
(1,2714)	1:A:511:VAL:HG23	1:A:513:LEU:HB3	14	0.25
(1,27)	1:A:480:GLN:HG3	1:A:481:GLY:H	7	0.25
(1,2669)	1:A:495:SER:HB3	1:A:498:GLN:HB3	2	0.25
(1,2659)	1:A:494:SER:H	1:A:494:SER:HB3	15	0.25
(1,2656)	1:A:493:GLU:HA	1:A:493:GLU:HG3	6	0.25
(1,2655)	1:A:493:GLU:H	1:A:493:GLU:HG3	17	0.25
(1,2599)	1:A:488:PRO:HD3	1:A:510:LEU:HG	4	0.25
(1,2599)	1:A:488:PRO:HD3	1:A:510:LEU:HG	9	0.25
(1,2599)	1:A:488:PRO:HD3	1:A:510:LEU:HG	20	0.25
(1,2591)	1:A:487:ILE:HG21	1:A:513:LEU:HB3	15	0.25
(1,2591)	1:A:487:ILE:HG22	1:A:513:LEU:HB3	15	0.25
(1,2591)	1:A:487:ILE:HG23	1:A:513:LEU:HB3	15	0.25
(1,2559)	1:A:480:GLN:HB3	1:A:480:GLN:HE21	8	0.25
(1,2559)	1:A:480:GLN:HB3	1:A:480:GLN:HE22	8	0.25
(1,2536)	1:A:473:MET:HB3	1:A:474:MET:H	16	0.25
(1,2532)	1:A:472:ALA:HB1	1:A:475:SER:HB3	9	0.25
(1,2532)	1:A:472:ALA:HB2	1:A:475:SER:HB3	9	0.25
(1,2532)	1:A:472:ALA:HB3	1:A:475:SER:HB3	9	0.25

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2526)	1:A:471:GLN:HB3	1:A:471:GLN:HG3	3	0.25
(1,2502)	1:A:467:HIS:HA	1:A:470:ASN:HB3	14	0.25
(1,2502)	1:A:467:HIS:HA	1:A:470:ASN:HB3	20	0.25
(1,2417)	1:A:448:HIS:H	1:A:448:HIS:HB3	7	0.25
(1,2407)	1:A:446:ILE:H	1:A:446:ILE:HG13	5	0.25
(1,2389)	1:A:442:LEU:HD11	1:A:443:GLN:HG3	2	0.25
(1,2389)	1:A:442:LEU:HD12	1:A:443:GLN:HG3	2	0.25
(1,2389)	1:A:442:LEU:HD13	1:A:443:GLN:HG3	2	0.25
(1,2389)	1:A:442:LEU:HD21	1:A:443:GLN:HG3	2	0.25
(1,2389)	1:A:442:LEU:HD22	1:A:443:GLN:HG3	2	0.25
(1,2389)	1:A:442:LEU:HD23	1:A:443:GLN:HG3	2	0.25
(1,2387)	1:A:442:LEU:HB3	1:A:443:GLN:H	17	0.25
(1,2353)	1:A:431:PHE:HB3	1:A:433:VAL:H	2	0.25
(1,2350)	1:A:431:PHE:HA	1:A:432:GLN:HB3	11	0.25
(1,2344)	1:A:430:ASP:H	1:A:430:ASP:HB3	13	0.25
(1,2336)	1:A:423:ASP:HB3	1:A:424:GLY:H	4	0.25
(1,2336)	1:A:423:ASP:HB3	1:A:424:GLY:H	19	0.25
(1,2262)	1:A:415:LYS:HE3	1:A:520:PHE:HE1	8	0.25
(1,2262)	1:A:415:LYS:HE3	1:A:520:PHE:HE2	8	0.25
(1,2242)	1:A:411:ARG:HB3	1:A:412:VAL:H	1	0.25
(1,2242)	1:A:411:ARG:HB3	1:A:412:VAL:H	3	0.25
(1,2215)	1:A:406:GLU:HG3	1:A:409:ALA:H	16	0.25
(1,2202)	1:A:405:ASP:HB3	1:A:406:GLU:H	5	0.25
(1,2202)	1:A:405:ASP:HB3	1:A:406:GLU:H	18	0.25
(1,2161)	1:A:397:PHE:HB3	1:A:398:VAL:H	4	0.25
(1,2152)	1:A:395:TYR:HB3	1:A:397:PHE:HA	17	0.25
(1,2145)	1:A:393:LYS:HG3	1:A:393:LYS:HE3	6	0.25
(1,2143)	1:A:393:LYS:HB3	1:A:393:LYS:HD3	8	0.25
(1,2020)	1:A:504:ALA:HB1	1:A:505:SER:HB3	10	0.25
(1,2020)	1:A:504:ALA:HB2	1:A:505:SER:HB3	10	0.25
(1,2020)	1:A:504:ALA:HB3	1:A:505:SER:HB3	10	0.25
(1,1925)	1:A:427:PHE:HA	1:A:428:CYS:HB3	17	0.25
(1,1911)	1:A:389:SER:HA	1:A:389:SER:HB3	20	0.25
(1,1844)	1:A:479:ARG:HA	1:A:479:ARG:HG3	5	0.25
(1,1844)	1:A:479:ARG:HA	1:A:479:ARG:HG3	11	0.25
(1,1844)	1:A:479:ARG:HA	1:A:479:ARG:HG3	19	0.25
(1,1791)	1:A:538:ALA:HA	1:A:541:ARG:HB3	3	0.25
(1,1753)	1:A:512:ARG:H	1:A:512:ARG:HD3	5	0.25
(1,1740)	1:A:436:ARG:HA	1:A:436:ARG:HD3	9	0.25
(1,1723)	1:A:403:ARG:HD3	1:A:403:ARG:HH22	1	0.25
(1,1723)	1:A:403:ARG:HD3	1:A:403:ARG:HH22	8	0.25
(1,1706)	1:A:393:LYS:HE3	1:A:394:PHE:H	11	0.25

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1701)	1:A:393:LYS:HG3	1:A:393:LYS:HE3	8	0.25
(1,1656)	1:A:432:GLN:HG3	1:A:433:VAL:H	10	0.25
(1,164)	1:A:465:SER:H	1:A:466:LEU:HB3	16	0.25
(1,1607)	1:A:537:LYS:HA	1:A:537:LYS:HD3	10	0.25
(1,947)	1:A:462:CYS:H	1:A:462:CYS:HB3	12	0.24
(1,910)	1:A:417:GLU:HG3	1:A:418:ALA:H	13	0.24
(1,678)	1:A:436:ARG:H	1:A:438:GLU:HG3	13	0.24
(1,600)	1:A:403:ARG:HB3	1:A:403:ARG:HE	20	0.24
(1,54)	1:A:436:ARG:HD3	1:A:437:GLY:H	17	0.24
(1,536)	1:A:543:GLU:H	1:A:543:GLU:HB3	17	0.24
(1,484)	1:A:419:LEU:H	1:A:420:GLY:HA3	4	0.24
(1,484)	1:A:419:LEU:H	1:A:420:GLY:HA3	6	0.24
(1,484)	1:A:419:LEU:H	1:A:420:GLY:HA3	11	0.24
(1,431)	1:A:534:GLN:H	1:A:534:GLN:HB3	12	0.24
(1,358)	1:A:387:GLU:HG3	1:A:390:SER:H	16	0.24
(1,337)	1:A:501:SER:HB3	1:A:503:THR:H	19	0.24
(1,2840)	1:A:543:GLU:HA	1:A:543:GLU:HG3	6	0.24
(1,2838)	1:A:542:LYS:HG3	1:A:542:LYS:HE3	18	0.24
(1,2832)	1:A:541:ARG:H	1:A:541:ARG:HG3	4	0.24
(1,2827)	1:A:537:LYS:HG3	1:A:537:LYS:HE3	13	0.24
(1,2808)	1:A:529:LYS:HB3	1:A:531:HIS:HE1	4	0.24
(1,2803)	1:A:529:LYS:HA	1:A:529:LYS:HD3	9	0.24
(1,2757)	1:A:515:GLU:HG3	1:A:516:HIS:H	12	0.24
(1,2669)	1:A:495:SER:HB3	1:A:498:GLN:HB3	8	0.24
(1,2669)	1:A:495:SER:HB3	1:A:498:GLN:HB3	11	0.24
(1,2641)	1:A:492:LEU:HB3	1:A:493:GLU:H	5	0.24
(1,2575)	1:A:484:ASP:HB3	1:A:485:CYS:H	15	0.24
(1,2541)	1:A:475:SER:H	1:A:476:ASN:HB3	1	0.24
(1,2537)	1:A:473:MET:HG3	1:A:474:MET:H	11	0.24
(1,2532)	1:A:472:ALA:HB1	1:A:475:SER:HB3	15	0.24
(1,2532)	1:A:472:ALA:HB2	1:A:475:SER:HB3	15	0.24
(1,2532)	1:A:472:ALA:HB3	1:A:475:SER:HB3	15	0.24
(1,2526)	1:A:471:GLN:HB3	1:A:471:GLN:HG3	17	0.24
(1,2508)	1:A:468:GLN:HA	1:A:468:GLN:HG3	6	0.24
(1,2508)	1:A:468:GLN:HA	1:A:468:GLN:HG3	20	0.24
(1,2496)	1:A:466:LEU:HB3	1:A:469:VAL:HG11	2	0.24
(1,2496)	1:A:466:LEU:HB3	1:A:469:VAL:HG12	2	0.24
(1,2496)	1:A:466:LEU:HB3	1:A:469:VAL:HG13	2	0.24
(1,2496)	1:A:466:LEU:HB3	1:A:469:VAL:HG21	2	0.24
(1,2496)	1:A:466:LEU:HB3	1:A:469:VAL:HG22	2	0.24
(1,2496)	1:A:466:LEU:HB3	1:A:469:VAL:HG23	2	0.24
(1,249)	1:A:407:HIS:HB3	1:A:410:LEU:H	7	0.24

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2472)	1:A:458:SER:HB3	1:A:459:ASN:H	13	0.24
(1,2433)	1:A:453:ILE:HG13	1:A:487:ILE:HD11	8	0.24
(1,2433)	1:A:453:ILE:HG13	1:A:487:ILE:HD12	8	0.24
(1,2433)	1:A:453:ILE:HG13	1:A:487:ILE:HD13	8	0.24
(1,2389)	1:A:442:LEU:HD11	1:A:443:GLN:HG3	15	0.24
(1,2389)	1:A:442:LEU:HD12	1:A:443:GLN:HG3	15	0.24
(1,2389)	1:A:442:LEU:HD13	1:A:443:GLN:HG3	15	0.24
(1,2389)	1:A:442:LEU:HD21	1:A:443:GLN:HG3	15	0.24
(1,2389)	1:A:442:LEU:HD22	1:A:443:GLN:HG3	15	0.24
(1,2389)	1:A:442:LEU:HD23	1:A:443:GLN:HG3	15	0.24
(1,2369)	1:A:436:ARG:H	1:A:436:ARG:HB3	11	0.24
(1,2357)	1:A:432:GLN:HB3	1:A:433:VAL:H	2	0.24
(1,2350)	1:A:431:PHE:HA	1:A:432:GLN:HB3	6	0.24
(1,2336)	1:A:423:ASP:HB3	1:A:424:GLY:H	1	0.24
(1,2336)	1:A:423:ASP:HB3	1:A:424:GLY:H	2	0.24
(1,2255)	1:A:414:GLU:HB3	1:A:415:LYS:H	20	0.24
(1,2242)	1:A:411:ARG:HB3	1:A:412:VAL:H	20	0.24
(1,2202)	1:A:405:ASP:HB3	1:A:406:GLU:H	12	0.24
(1,2152)	1:A:395:TYR:HB3	1:A:397:PHE:HA	12	0.24
(1,2139)	1:A:392:GLN:HG3	1:A:393:LYS:H	15	0.24
(1,2126)	1:A:529:LYS:HE3	1:A:531:HIS:HE1	19	0.24
(1,2029)	1:A:389:SER:H	1:A:390:SER:HB3	10	0.24
(1,2027)	1:A:389:SER:HB3	1:A:390:SER:H	9	0.24
(1,2007)	1:A:462:CYS:HA	1:A:466:LEU:HB3	15	0.24
(1,1988)	1:A:403:ARG:HA	1:A:403:ARG:HD3	8	0.24
(1,1964)	1:A:540:TRP:HA	1:A:541:ARG:HB3	5	0.24
(1,1925)	1:A:427:PHE:HA	1:A:428:CYS:HB3	16	0.24
(1,1844)	1:A:479:ARG:HA	1:A:479:ARG:HG3	4	0.24
(1,1844)	1:A:479:ARG:HA	1:A:479:ARG:HG3	8	0.24
(1,1844)	1:A:479:ARG:HA	1:A:479:ARG:HG3	12	0.24
(1,1844)	1:A:479:ARG:HA	1:A:479:ARG:HG3	20	0.24
(1,1728)	1:A:532:ARG:HB3	1:A:532:ARG:HD3	9	0.24
(1,172)	1:A:403:ARG:HB3	1:A:405:ASP:H	12	0.24
(1,1704)	1:A:393:LYS:HA	1:A:393:LYS:HE3	20	0.24
(1,1608)	1:A:534:GLN:HA	1:A:537:LYS:HD3	7	0.24
(1,1574)	1:A:407:HIS:HB3	1:A:408:ILE:HG13	3	0.24
(1,1571)	1:A:479:ARG:H	1:A:479:ARG:HG3	5	0.24
(1,1571)	1:A:479:ARG:H	1:A:479:ARG:HG3	15	0.24
(1,1090)	1:A:518:GLN:HG3	1:A:519:ILE:HD11	14	0.24
(1,1090)	1:A:518:GLN:HG3	1:A:519:ILE:HD12	14	0.24
(1,1090)	1:A:518:GLN:HG3	1:A:519:ILE:HD13	14	0.24
(1,1040)	1:A:449:SER:HB3	1:A:452:ILE:HD11	14	0.24

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1040)	1:A:449:SER:HB3	1:A:452:ILE:HD12	14	0.24
(1,1040)	1:A:449:SER:HB3	1:A:452:ILE:HD13	14	0.24
(1,98)	1:A:417:GLU:HG3	1:A:423:ASP:H	6	0.23
(1,947)	1:A:462:CYS:H	1:A:462:CYS:HB3	1	0.23
(1,947)	1:A:462:CYS:H	1:A:462:CYS:HB3	4	0.23
(1,947)	1:A:462:CYS:H	1:A:462:CYS:HB3	5	0.23
(1,947)	1:A:462:CYS:H	1:A:462:CYS:HB3	7	0.23
(1,947)	1:A:462:CYS:H	1:A:462:CYS:HB3	10	0.23
(1,947)	1:A:462:CYS:H	1:A:462:CYS:HB3	14	0.23
(1,947)	1:A:462:CYS:H	1:A:462:CYS:HB3	19	0.23
(1,947)	1:A:462:CYS:H	1:A:462:CYS:HB3	20	0.23
(1,812)	1:A:390:SER:HB3	1:A:391:GLU:H	18	0.23
(1,791)	1:A:540:TRP:H	1:A:540:TRP:HD1	8	0.23
(1,791)	1:A:540:TRP:H	1:A:540:TRP:HD1	20	0.23
(1,678)	1:A:436:ARG:H	1:A:438:GLU:HG3	7	0.23
(1,636)	1:A:463:ARG:HB3	1:A:464:LEU:H	6	0.23
(1,552)	1:A:542:LYS:H	1:A:542:LYS:HD3	6	0.23
(1,536)	1:A:543:GLU:H	1:A:543:GLU:HB3	2	0.23
(1,536)	1:A:543:GLU:H	1:A:543:GLU:HB3	6	0.23
(1,536)	1:A:543:GLU:H	1:A:543:GLU:HB3	9	0.23
(1,523)	1:A:529:LYS:H	1:A:529:LYS:HE3	6	0.23
(1,484)	1:A:419:LEU:H	1:A:420:GLY:HA3	2	0.23
(1,484)	1:A:419:LEU:H	1:A:420:GLY:HA3	19	0.23
(1,431)	1:A:534:GLN:H	1:A:534:GLN:HB3	14	0.23
(1,421)	1:A:466:LEU:HB3	1:A:468:GLN:H	13	0.23
(1,338)	1:A:503:THR:H	1:A:505:SER:HB3	5	0.23
(1,2837)	1:A:542:LYS:HA	1:A:542:LYS:HG3	1	0.23
(1,2829)	1:A:538:ALA:HB1	1:A:539:MET:HG3	8	0.23
(1,2829)	1:A:538:ALA:HB2	1:A:539:MET:HG3	8	0.23
(1,2829)	1:A:538:ALA:HB3	1:A:539:MET:HG3	8	0.23
(1,2803)	1:A:529:LYS:HA	1:A:529:LYS:HD3	17	0.23
(1,2800)	1:A:529:LYS:H	1:A:529:LYS:HD3	6	0.23
(1,2783)	1:A:523:LYS:HG3	1:A:523:LYS:HE3	7	0.23
(1,2758)	1:A:515:GLU:HG3	1:A:520:PHE:HE1	17	0.23
(1,2758)	1:A:515:GLU:HG3	1:A:520:PHE:HE2	17	0.23
(1,2732)	1:A:513:LEU:HB3	1:A:520:PHE:HD1	2	0.23
(1,2732)	1:A:513:LEU:HB3	1:A:520:PHE:HD2	2	0.23
(1,2724)	1:A:512:ARG:HB3	1:A:512:ARG:HE	14	0.23
(1,2723)	1:A:512:ARG:HB3	1:A:512:ARG:HD3	14	0.23
(1,2710)	1:A:511:VAL:HA	1:A:512:ARG:HB3	5	0.23
(1,2702)	1:A:510:LEU:H	1:A:510:LEU:HB3	9	0.23
(1,2680)	1:A:499:LEU:HB3	1:A:500:SER:HB3	5	0.23

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2669)	1:A:495:SER:HB3	1:A:498:GLN:HB3	12	0.23
(1,2599)	1:A:488:PRO:HD3	1:A:510:LEU:HG	12	0.23
(1,2555)	1:A:479:ARG:HB3	1:A:479:ARG:HD3	2	0.23
(1,2555)	1:A:479:ARG:HB3	1:A:479:ARG:HD3	14	0.23
(1,2538)	1:A:473:MET:HE1	1:A:485:CYS:HB3	19	0.23
(1,2538)	1:A:473:MET:HE2	1:A:485:CYS:HB3	19	0.23
(1,2538)	1:A:473:MET:HE3	1:A:485:CYS:HB3	19	0.23
(1,2536)	1:A:473:MET:HB3	1:A:474:MET:H	15	0.23
(1,2529)	1:A:471:GLN:HG3	1:A:472:ALA:H	6	0.23
(1,2528)	1:A:471:GLN:HG3	1:A:471:GLN:HE21	5	0.23
(1,2528)	1:A:471:GLN:HG3	1:A:471:GLN:HE22	5	0.23
(1,2526)	1:A:471:GLN:HB3	1:A:471:GLN:HG3	1	0.23
(1,2526)	1:A:471:GLN:HB3	1:A:471:GLN:HG3	4	0.23
(1,2526)	1:A:471:GLN:HB3	1:A:471:GLN:HG3	13	0.23
(1,2505)	1:A:468:GLN:H	1:A:468:GLN:HB3	4	0.23
(1,2496)	1:A:466:LEU:HB3	1:A:469:VAL:HG11	4	0.23
(1,2496)	1:A:466:LEU:HB3	1:A:469:VAL:HG12	4	0.23
(1,2496)	1:A:466:LEU:HB3	1:A:469:VAL:HG13	4	0.23
(1,2496)	1:A:466:LEU:HB3	1:A:469:VAL:HG21	4	0.23
(1,2496)	1:A:466:LEU:HB3	1:A:469:VAL:HG22	4	0.23
(1,2496)	1:A:466:LEU:HB3	1:A:469:VAL:HG23	4	0.23
(1,2496)	1:A:466:LEU:HB3	1:A:469:VAL:HG11	9	0.23
(1,2496)	1:A:466:LEU:HB3	1:A:469:VAL:HG12	9	0.23
(1,2496)	1:A:466:LEU:HB3	1:A:469:VAL:HG13	9	0.23
(1,2496)	1:A:466:LEU:HB3	1:A:469:VAL:HG21	9	0.23
(1,2496)	1:A:466:LEU:HB3	1:A:469:VAL:HG22	9	0.23
(1,2496)	1:A:466:LEU:HB3	1:A:469:VAL:HG23	9	0.23
(1,2478)	1:A:463:ARG:H	1:A:463:ARG:HD3	5	0.23
(1,2472)	1:A:458:SER:HB3	1:A:459:ASN:H	19	0.23
(1,2407)	1:A:446:ILE:H	1:A:446:ILE:HG13	15	0.23
(1,2405)	1:A:444:ASP:H	1:A:444:ASP:HB3	8	0.23
(1,2387)	1:A:442:LEU:HB3	1:A:443:GLN:H	6	0.23
(1,2336)	1:A:423:ASP:HB3	1:A:424:GLY:H	6	0.23
(1,2336)	1:A:423:ASP:HB3	1:A:424:GLY:H	15	0.23
(1,2336)	1:A:423:ASP:HB3	1:A:424:GLY:H	17	0.23
(1,2336)	1:A:423:ASP:HB3	1:A:424:GLY:H	20	0.23
(1,2321)	1:A:421:VAL:HA	1:A:422:PRO:HG3	13	0.23
(1,2321)	1:A:421:VAL:HA	1:A:422:PRO:HG3	14	0.23
(1,2264)	1:A:415:LYS:HE3	1:A:521:ALA:HB1	6	0.23
(1,2264)	1:A:415:LYS:HE3	1:A:521:ALA:HB2	6	0.23
(1,2264)	1:A:415:LYS:HE3	1:A:521:ALA:HB3	6	0.23
(1,2254)	1:A:414:GLU:HB3	1:A:414:GLU:HG3	15	0.23

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2241)	1:A:411:ARG:HA	1:A:411:ARG:HD3	9	0.23
(1,2241)	1:A:411:ARG:HA	1:A:411:ARG:HD3	18	0.23
(1,2215)	1:A:406:GLU:HG3	1:A:409:ALA:H	14	0.23
(1,2214)	1:A:406:GLU:HG3	1:A:407:HIS:HA	4	0.23
(1,2202)	1:A:405:ASP:HB3	1:A:406:GLU:H	17	0.23
(1,2143)	1:A:393:LYS:HB3	1:A:393:LYS:HD3	4	0.23
(1,2143)	1:A:393:LYS:HB3	1:A:393:LYS:HD3	5	0.23
(1,2143)	1:A:393:LYS:HB3	1:A:393:LYS:HD3	7	0.23
(1,2137)	1:A:392:GLN:HA	1:A:393:LYS:HB3	10	0.23
(1,2133)	1:A:392:GLN:H	1:A:392:GLN:HB3	13	0.23
(1,2083)	1:A:540:TRP:HB3	1:A:540:TRP:HD1	5	0.23
(1,2083)	1:A:540:TRP:HB3	1:A:540:TRP:HD1	9	0.23
(1,2019)	1:A:505:SER:HB3	1:A:506:LEU:HD21	4	0.23
(1,2019)	1:A:505:SER:HB3	1:A:506:LEU:HD22	4	0.23
(1,2019)	1:A:505:SER:HB3	1:A:506:LEU:HD23	4	0.23
(1,1853)	1:A:436:ARG:HA	1:A:436:ARG:HG3	18	0.23
(1,1768)	1:A:461:ASP:HA	1:A:462:CYS:HB3	9	0.23
(1,1765)	1:A:402:ALA:HA	1:A:403:ARG:HB3	18	0.23
(1,1753)	1:A:512:ARG:H	1:A:512:ARG:HD3	17	0.23
(1,1728)	1:A:532:ARG:HB3	1:A:532:ARG:HD3	8	0.23
(1,1723)	1:A:403:ARG:HD3	1:A:403:ARG:HH22	5	0.23
(1,172)	1:A:403:ARG:HB3	1:A:405:ASP:H	2	0.23
(1,1706)	1:A:393:LYS:HE3	1:A:394:PHE:H	14	0.23
(1,1701)	1:A:393:LYS:HG3	1:A:393:LYS:HE3	9	0.23
(1,1660)	1:A:518:GLN:HA	1:A:518:GLN:HG3	15	0.23
(1,1636)	1:A:471:GLN:HA	1:A:474:MET:HB3	17	0.23
(1,1572)	1:A:479:ARG:HG3	1:A:480:GLN:H	17	0.23
(1,137)	1:A:522:ARG:HB3	1:A:526:ASN:H	5	0.23
(1,108)	1:A:526:ASN:HD21	1:A:529:LYS:HE3	15	0.23
(1,108)	1:A:526:ASN:HD22	1:A:529:LYS:HE3	15	0.23
(1,98)	1:A:417:GLU:HG3	1:A:423:ASP:H	2	0.22
(1,910)	1:A:417:GLU:HG3	1:A:418:ALA:H	12	0.22
(1,900)	1:A:449:SER:HB3	1:A:450:ALA:H	3	0.22
(1,891)	1:A:393:LYS:H	1:A:393:LYS:HE3	2	0.22
(1,858)	1:A:403:ARG:HG3	1:A:406:GLU:H	6	0.22
(1,858)	1:A:403:ARG:HG3	1:A:406:GLU:H	14	0.22
(1,806)	1:A:434:HIS:H	1:A:438:GLU:HG3	14	0.22
(1,699)	1:A:541:ARG:HB3	1:A:541:ARG:HE	15	0.22
(1,679)	1:A:436:ARG:H	1:A:436:ARG:HD3	1	0.22
(1,652)	1:A:480:GLN:H	1:A:480:GLN:HG3	10	0.22
(1,652)	1:A:480:GLN:H	1:A:480:GLN:HG3	17	0.22
(1,579)	1:A:532:ARG:HB3	1:A:533:LEU:H	9	0.22

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,552)	1:A:542:LYS:H	1:A:542:LYS:HD3	20	0.22
(1,511)	1:A:403:ARG:HD3	1:A:404:ALA:H	9	0.22
(1,484)	1:A:419:LEU:H	1:A:420:GLY:HA3	18	0.22
(1,431)	1:A:534:GLN:H	1:A:534:GLN:HB3	3	0.22
(1,431)	1:A:534:GLN:H	1:A:534:GLN:HB3	15	0.22
(1,39)	1:A:435:GLY:H	1:A:438:GLU:HG3	3	0.22
(1,345)	1:A:467:HIS:H	1:A:467:HIS:HB3	1	0.22
(1,337)	1:A:501:SER:HB3	1:A:503:THR:H	12	0.22
(1,2839)	1:A:542:LYS:HG3	1:A:543:GLU:H	1	0.22
(1,2821)	1:A:534:GLN:H	1:A:534:GLN:HG3	7	0.22
(1,2812)	1:A:531:HIS:HA	1:A:534:GLN:HG3	5	0.22
(1,2804)	1:A:529:LYS:HA	1:A:530:PRO:HG3	19	0.22
(1,2803)	1:A:529:LYS:HA	1:A:529:LYS:HD3	4	0.22
(1,2803)	1:A:529:LYS:HA	1:A:529:LYS:HD3	8	0.22
(1,2796)	1:A:527:THR:HA	1:A:529:LYS:HD3	5	0.22
(1,2757)	1:A:515:GLU:HG3	1:A:516:HIS:H	17	0.22
(1,2710)	1:A:511:VAL:HA	1:A:512:ARG:HB3	17	0.22
(1,27)	1:A:480:GLN:HG3	1:A:481:GLY:H	1	0.22
(1,2669)	1:A:495:SER:HB3	1:A:498:GLN:HB3	3	0.22
(1,2669)	1:A:495:SER:HB3	1:A:498:GLN:HB3	7	0.22
(1,2648)	1:A:492:LEU:HD11	1:A:515:GLU:HG3	12	0.22
(1,2648)	1:A:492:LEU:HD12	1:A:515:GLU:HG3	12	0.22
(1,2648)	1:A:492:LEU:HD13	1:A:515:GLU:HG3	12	0.22
(1,2648)	1:A:492:LEU:HD21	1:A:515:GLU:HG3	12	0.22
(1,2648)	1:A:492:LEU:HD22	1:A:515:GLU:HG3	12	0.22
(1,2648)	1:A:492:LEU:HD23	1:A:515:GLU:HG3	12	0.22
(1,2641)	1:A:492:LEU:HB3	1:A:493:GLU:H	2	0.22
(1,2641)	1:A:492:LEU:HB3	1:A:493:GLU:H	3	0.22
(1,264)	1:A:480:GLN:HG3	1:A:482:SER:H	20	0.22
(1,2609)	1:A:490:LEU:HB3	1:A:512:ARG:HD3	8	0.22
(1,2599)	1:A:488:PRO:HD3	1:A:510:LEU:HG	3	0.22
(1,2599)	1:A:488:PRO:HD3	1:A:510:LEU:HG	11	0.22
(1,2599)	1:A:488:PRO:HD3	1:A:510:LEU:HG	18	0.22
(1,2560)	1:A:480:GLN:HB3	1:A:481:GLY:H	5	0.22
(1,2559)	1:A:480:GLN:HB3	1:A:480:GLN:HE21	13	0.22
(1,2559)	1:A:480:GLN:HB3	1:A:480:GLN:HE22	13	0.22
(1,2538)	1:A:473:MET:HE1	1:A:485:CYS:HB3	3	0.22
(1,2538)	1:A:473:MET:HE2	1:A:485:CYS:HB3	3	0.22
(1,2538)	1:A:473:MET:HE3	1:A:485:CYS:HB3	3	0.22
(1,2537)	1:A:473:MET:HG3	1:A:474:MET:H	6	0.22
(1,2526)	1:A:471:GLN:HB3	1:A:471:GLN:HG3	2	0.22
(1,2526)	1:A:471:GLN:HB3	1:A:471:GLN:HG3	7	0.22

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2526)	1:A:471:GLN:HB3	1:A:471:GLN:HG3	18	0.22
(1,2508)	1:A:468:GLN:HA	1:A:468:GLN:HG3	4	0.22
(1,2508)	1:A:468:GLN:HA	1:A:468:GLN:HG3	7	0.22
(1,2505)	1:A:468:GLN:H	1:A:468:GLN:HB3	3	0.22
(1,2505)	1:A:468:GLN:H	1:A:468:GLN:HB3	5	0.22
(1,2505)	1:A:468:GLN:H	1:A:468:GLN:HB3	16	0.22
(1,249)	1:A:407:HIS:HB3	1:A:410:LEU:H	11	0.22
(1,2418)	1:A:448:HIS:HB3	1:A:449:SER:H	9	0.22
(1,2371)	1:A:436:ARG:HB3	1:A:436:ARG:HG3	4	0.22
(1,2371)	1:A:436:ARG:HB3	1:A:436:ARG:HG3	8	0.22
(1,2352)	1:A:431:PHE:HB3	1:A:432:GLN:H	16	0.22
(1,2348)	1:A:430:ASP:HB3	1:A:433:VAL:HG11	3	0.22
(1,2348)	1:A:430:ASP:HB3	1:A:433:VAL:HG12	3	0.22
(1,2348)	1:A:430:ASP:HB3	1:A:433:VAL:HG13	3	0.22
(1,2348)	1:A:430:ASP:HB3	1:A:433:VAL:HG21	3	0.22
(1,2348)	1:A:430:ASP:HB3	1:A:433:VAL:HG22	3	0.22
(1,2348)	1:A:430:ASP:HB3	1:A:433:VAL:HG23	3	0.22
(1,2346)	1:A:430:ASP:HB3	1:A:431:PHE:H	20	0.22
(1,2344)	1:A:430:ASP:H	1:A:430:ASP:HB3	4	0.22
(1,2343)	1:A:429:GLU:HG3	1:A:430:ASP:H	7	0.22
(1,2336)	1:A:423:ASP:HB3	1:A:424:GLY:H	10	0.22
(1,2321)	1:A:421:VAL:HA	1:A:422:PRO:HG3	7	0.22
(1,2321)	1:A:421:VAL:HA	1:A:422:PRO:HG3	8	0.22
(1,2321)	1:A:421:VAL:HA	1:A:422:PRO:HG3	9	0.22
(1,2316)	1:A:420:GLY:HA2	1:A:524:VAL:HG11	17	0.22
(1,2316)	1:A:420:GLY:HA2	1:A:524:VAL:HG12	17	0.22
(1,2316)	1:A:420:GLY:HA2	1:A:524:VAL:HG13	17	0.22
(1,2316)	1:A:420:GLY:HA2	1:A:524:VAL:HG21	17	0.22
(1,2316)	1:A:420:GLY:HA2	1:A:524:VAL:HG22	17	0.22
(1,2316)	1:A:420:GLY:HA2	1:A:524:VAL:HG23	17	0.22
(1,2264)	1:A:415:LYS:HE3	1:A:521:ALA:HB1	18	0.22
(1,2264)	1:A:415:LYS:HE3	1:A:521:ALA:HB2	18	0.22
(1,2264)	1:A:415:LYS:HE3	1:A:521:ALA:HB3	18	0.22
(1,2214)	1:A:406:GLU:HG3	1:A:407:HIS:HA	13	0.22
(1,2202)	1:A:405:ASP:HB3	1:A:406:GLU:H	3	0.22
(1,2184)	1:A:400:LEU:H	1:A:400:LEU:HB3	9	0.22
(1,2156)	1:A:396:ASN:HB3	1:A:397:PHE:HE1	14	0.22
(1,2156)	1:A:396:ASN:HB3	1:A:397:PHE:HE2	14	0.22
(1,2152)	1:A:395:TYR:HB3	1:A:397:PHE:HA	13	0.22
(1,2138)	1:A:392:GLN:HG3	1:A:392:GLN:HE21	1	0.22
(1,2138)	1:A:392:GLN:HG3	1:A:392:GLN:HE22	1	0.22
(1,2138)	1:A:392:GLN:HG3	1:A:392:GLN:HE21	20	0.22

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2138)	1:A:392:GLN:HG3	1:A:392:GLN:HE22	20	0.22
(1,2083)	1:A:540:TRP:HB3	1:A:540:TRP:HD1	12	0.22
(1,2007)	1:A:462:CYS:HA	1:A:466:LEU:HB3	19	0.22
(1,1988)	1:A:403:ARG:HA	1:A:403:ARG:HD3	13	0.22
(1,1765)	1:A:402:ALA:HA	1:A:403:ARG:HB3	11	0.22
(1,1728)	1:A:532:ARG:HB3	1:A:532:ARG:HD3	10	0.22
(1,1660)	1:A:518:GLN:HA	1:A:518:GLN:HG3	2	0.22
(1,1611)	1:A:537:LYS:HD3	1:A:538:ALA:H	9	0.22
(1,1605)	1:A:539:MET:HA	1:A:542:LYS:HD3	10	0.22
(1,1605)	1:A:539:MET:HA	1:A:542:LYS:HD3	19	0.22
(1,1599)	1:A:393:LYS:HD3	1:A:395:TYR:HD1	1	0.22
(1,1599)	1:A:393:LYS:HD3	1:A:395:TYR:HD2	1	0.22
(1,829)	1:A:534:GLN:HB3	1:A:535:ALA:H	3	0.21
(1,679)	1:A:436:ARG:H	1:A:436:ARG:HD3	18	0.21
(1,678)	1:A:436:ARG:H	1:A:438:GLU:HG3	3	0.21
(1,652)	1:A:480:GLN:H	1:A:480:GLN:HG3	11	0.21
(1,579)	1:A:532:ARG:HB3	1:A:533:LEU:H	4	0.21
(1,553)	1:A:541:ARG:HB3	1:A:542:LYS:H	4	0.21
(1,54)	1:A:436:ARG:HD3	1:A:437:GLY:H	5	0.21
(1,536)	1:A:543:GLU:H	1:A:543:GLU:HB3	1	0.21
(1,484)	1:A:419:LEU:H	1:A:420:GLY:HA3	9	0.21
(1,484)	1:A:419:LEU:H	1:A:420:GLY:HA3	20	0.21
(1,421)	1:A:466:LEU:HB3	1:A:468:GLN:H	2	0.21
(1,358)	1:A:387:GLU:HG3	1:A:390:SER:H	5	0.21
(1,34)	1:A:466:LEU:HB3	1:A:470:ASN:HD22	4	0.21
(1,34)	1:A:466:LEU:HB3	1:A:470:ASN:HD21	4	0.21
(1,2839)	1:A:542:LYS:HG3	1:A:543:GLU:H	7	0.21
(1,2830)	1:A:538:ALA:HB1	1:A:541:ARG:HD3	11	0.21
(1,2830)	1:A:538:ALA:HB2	1:A:541:ARG:HD3	11	0.21
(1,2830)	1:A:538:ALA:HB3	1:A:541:ARG:HD3	11	0.21
(1,2812)	1:A:531:HIS:HA	1:A:534:GLN:HG3	6	0.21
(1,2759)	1:A:516:HIS:HB3	1:A:517:SER:H	4	0.21
(1,2721)	1:A:512:ARG:H	1:A:512:ARG:HG3	10	0.21
(1,2702)	1:A:510:LEU:H	1:A:510:LEU:HB3	16	0.21
(1,2679)	1:A:498:GLN:HG3	1:A:499:LEU:H	5	0.21
(1,2679)	1:A:498:GLN:HG3	1:A:499:LEU:H	16	0.21
(1,2655)	1:A:493:GLU:H	1:A:493:GLU:HG3	7	0.21
(1,2655)	1:A:493:GLU:H	1:A:493:GLU:HG3	12	0.21
(1,264)	1:A:480:GLN:HG3	1:A:482:SER:H	19	0.21
(1,2604)	1:A:489:PHE:HE1	1:A:515:GLU:HG3	17	0.21
(1,2604)	1:A:489:PHE:HE2	1:A:515:GLU:HG3	17	0.21
(1,2575)	1:A:484:ASP:HB3	1:A:485:CYS:H	6	0.21

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2571)	1:A:484:ASP:H	1:A:484:ASP:HB3	14	0.21
(1,2560)	1:A:480:GLN:HB3	1:A:481:GLY:H	2	0.21
(1,2526)	1:A:471:GLN:HB3	1:A:471:GLN:HG3	16	0.21
(1,2512)	1:A:468:GLN:HG3	1:A:469:VAL:H	5	0.21
(1,2505)	1:A:468:GLN:H	1:A:468:GLN:HB3	6	0.21
(1,2505)	1:A:468:GLN:H	1:A:468:GLN:HB3	11	0.21
(1,2499)	1:A:466:LEU:HD11	1:A:467:HIS:HB3	9	0.21
(1,2499)	1:A:466:LEU:HD12	1:A:467:HIS:HB3	9	0.21
(1,2499)	1:A:466:LEU:HD13	1:A:467:HIS:HB3	9	0.21
(1,2499)	1:A:466:LEU:HD21	1:A:467:HIS:HB3	9	0.21
(1,2499)	1:A:466:LEU:HD22	1:A:467:HIS:HB3	9	0.21
(1,2499)	1:A:466:LEU:HD23	1:A:467:HIS:HB3	9	0.21
(1,2482)	1:A:464:LEU:HA	1:A:467:HIS:HB3	17	0.21
(1,2478)	1:A:463:ARG:H	1:A:463:ARG:HD3	1	0.21
(1,2478)	1:A:463:ARG:H	1:A:463:ARG:HD3	7	0.21
(1,2477)	1:A:463:ARG:H	1:A:463:ARG:HG3	6	0.21
(1,2417)	1:A:448:HIS:H	1:A:448:HIS:HB3	1	0.21
(1,2399)	1:A:443:GLN:HG3	1:A:443:GLN:HE21	2	0.21
(1,2399)	1:A:443:GLN:HG3	1:A:443:GLN:HE22	2	0.21
(1,2399)	1:A:443:GLN:HG3	1:A:443:GLN:HE21	8	0.21
(1,2399)	1:A:443:GLN:HG3	1:A:443:GLN:HE22	8	0.21
(1,2399)	1:A:443:GLN:HG3	1:A:443:GLN:HE21	12	0.21
(1,2399)	1:A:443:GLN:HG3	1:A:443:GLN:HE22	12	0.21
(1,2399)	1:A:443:GLN:HG3	1:A:443:GLN:HE21	16	0.21
(1,2399)	1:A:443:GLN:HG3	1:A:443:GLN:HE22	16	0.21
(1,2399)	1:A:443:GLN:HG3	1:A:443:GLN:HE21	17	0.21
(1,2399)	1:A:443:GLN:HG3	1:A:443:GLN:HE22	17	0.21
(1,2365)	1:A:434:HIS:H	1:A:434:HIS:HB3	7	0.21
(1,2357)	1:A:432:GLN:HB3	1:A:433:VAL:H	1	0.21
(1,2357)	1:A:432:GLN:HB3	1:A:433:VAL:H	11	0.21
(1,2350)	1:A:431:PHE:HA	1:A:432:GLN:HB3	3	0.21
(1,2321)	1:A:421:VAL:HA	1:A:422:PRO:HG3	1	0.21
(1,2321)	1:A:421:VAL:HA	1:A:422:PRO:HG3	2	0.21
(1,2321)	1:A:421:VAL:HA	1:A:422:PRO:HG3	3	0.21
(1,2321)	1:A:421:VAL:HA	1:A:422:PRO:HG3	4	0.21
(1,2321)	1:A:421:VAL:HA	1:A:422:PRO:HG3	5	0.21
(1,2321)	1:A:421:VAL:HA	1:A:422:PRO:HG3	6	0.21
(1,2321)	1:A:421:VAL:HA	1:A:422:PRO:HG3	10	0.21
(1,2321)	1:A:421:VAL:HA	1:A:422:PRO:HG3	11	0.21
(1,2321)	1:A:421:VAL:HA	1:A:422:PRO:HG3	12	0.21
(1,2321)	1:A:421:VAL:HA	1:A:422:PRO:HG3	15	0.21
(1,2321)	1:A:421:VAL:HA	1:A:422:PRO:HG3	16	0.21

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2321)	1:A:421:VAL:HA	1:A:422:PRO:HG3	17	0.21
(1,2321)	1:A:421:VAL:HA	1:A:422:PRO:HG3	18	0.21
(1,2321)	1:A:421:VAL:HA	1:A:422:PRO:HG3	19	0.21
(1,2321)	1:A:421:VAL:HA	1:A:422:PRO:HG3	20	0.21
(1,2318)	1:A:421:VAL:H	1:A:422:PRO:HD3	13	0.21
(1,2264)	1:A:415:LYS:HE3	1:A:521:ALA:HB1	4	0.21
(1,2264)	1:A:415:LYS:HE3	1:A:521:ALA:HB2	4	0.21
(1,2264)	1:A:415:LYS:HE3	1:A:521:ALA:HB3	4	0.21
(1,2263)	1:A:415:LYS:HE3	1:A:520:PHE:HZ	1	0.21
(1,2215)	1:A:406:GLU:HG3	1:A:409:ALA:H	9	0.21
(1,2214)	1:A:406:GLU:HG3	1:A:407:HIS:HA	10	0.21
(1,2202)	1:A:405:ASP:HB3	1:A:406:GLU:H	14	0.21
(1,2179)	1:A:398:VAL:HG11	1:A:449:SER:HB3	2	0.21
(1,2179)	1:A:398:VAL:HG12	1:A:449:SER:HB3	2	0.21
(1,2179)	1:A:398:VAL:HG13	1:A:449:SER:HB3	2	0.21
(1,2179)	1:A:398:VAL:HG21	1:A:449:SER:HB3	2	0.21
(1,2179)	1:A:398:VAL:HG22	1:A:449:SER:HB3	2	0.21
(1,2179)	1:A:398:VAL:HG23	1:A:449:SER:HB3	2	0.21
(1,2141)	1:A:393:LYS:H	1:A:393:LYS:HG3	19	0.21
(1,2138)	1:A:392:GLN:HG3	1:A:392:GLN:HE21	12	0.21
(1,2138)	1:A:392:GLN:HG3	1:A:392:GLN:HE22	12	0.21
(1,2130)	1:A:387:GLU:HB3	1:A:390:SER:HA	19	0.21
(1,2083)	1:A:540:TRP:HB3	1:A:540:TRP:HD1	19	0.21
(1,1850)	1:A:391:GLU:HA	1:A:391:GLU:HG3	12	0.21
(1,1850)	1:A:391:GLU:HA	1:A:391:GLU:HG3	13	0.21
(1,1728)	1:A:532:ARG:HB3	1:A:532:ARG:HD3	18	0.21
(1,1723)	1:A:403:ARG:HD3	1:A:403:ARG:HH22	12	0.21
(1,1610)	1:A:394:PHE:HE1	1:A:537:LYS:HD3	6	0.21
(1,1610)	1:A:394:PHE:HE2	1:A:537:LYS:HD3	6	0.21
(1,1609)	1:A:394:PHE:HD1	1:A:537:LYS:HD3	6	0.21
(1,1609)	1:A:394:PHE:HD2	1:A:537:LYS:HD3	6	0.21
(1,1600)	1:A:393:LYS:H	1:A:393:LYS:HD3	16	0.21
(1,1576)	1:A:462:CYS:HB3	1:A:506:LEU:HD11	10	0.21
(1,1576)	1:A:462:CYS:HB3	1:A:506:LEU:HD12	10	0.21
(1,1576)	1:A:462:CYS:HB3	1:A:506:LEU:HD13	10	0.21
(1,1262)	1:A:527:THR:HG21	1:A:529:LYS:HG3	11	0.21
(1,1262)	1:A:527:THR:HG22	1:A:529:LYS:HG3	11	0.21
(1,1262)	1:A:527:THR:HG23	1:A:529:LYS:HG3	11	0.21
(1,1121)	1:A:536:ARG:HD3	1:A:539:MET:HE1	17	0.21
(1,1121)	1:A:536:ARG:HD3	1:A:539:MET:HE2	17	0.21
(1,1121)	1:A:536:ARG:HD3	1:A:539:MET:HE3	17	0.21
(1,1000)	1:A:515:GLU:H	1:A:515:GLU:HB3	14	0.21

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,858)	1:A:403:ARG:HG3	1:A:406:GLU:H	10	0.2
(1,829)	1:A:534:GLN:HB3	1:A:535:ALA:H	15	0.2
(1,829)	1:A:534:GLN:HB3	1:A:535:ALA:H	16	0.2
(1,806)	1:A:434:HIS:H	1:A:438:GLU:HG3	5	0.2
(1,676)	1:A:436:ARG:H	1:A:436:ARG:HG3	11	0.2
(1,553)	1:A:541:ARG:HB3	1:A:542:LYS:H	13	0.2
(1,536)	1:A:543:GLU:H	1:A:543:GLU:HB3	7	0.2
(1,431)	1:A:534:GLN:H	1:A:534:GLN:HB3	2	0.2
(1,431)	1:A:534:GLN:H	1:A:534:GLN:HB3	5	0.2
(1,421)	1:A:466:LEU:HB3	1:A:468:GLN:H	5	0.2
(1,345)	1:A:467:HIS:H	1:A:467:HIS:HB3	17	0.2
(1,337)	1:A:501:SER:HB3	1:A:503:THR:H	9	0.2
(1,2837)	1:A:542:LYS:HA	1:A:542:LYS:HG3	13	0.2
(1,2834)	1:A:541:ARG:HA	1:A:541:ARG:HD3	1	0.2
(1,2812)	1:A:531:HIS:HA	1:A:534:GLN:HG3	3	0.2
(1,2808)	1:A:529:LYS:HB3	1:A:531:HIS:HE1	9	0.2
(1,2714)	1:A:511:VAL:HG11	1:A:513:LEU:HB3	4	0.2
(1,2714)	1:A:511:VAL:HG12	1:A:513:LEU:HB3	4	0.2
(1,2714)	1:A:511:VAL:HG13	1:A:513:LEU:HB3	4	0.2
(1,2714)	1:A:511:VAL:HG21	1:A:513:LEU:HB3	4	0.2
(1,2714)	1:A:511:VAL:HG22	1:A:513:LEU:HB3	4	0.2
(1,2714)	1:A:511:VAL:HG23	1:A:513:LEU:HB3	4	0.2
(1,2700)	1:A:509:GLY:H	1:A:510:LEU:HB3	4	0.2
(1,2699)	1:A:507:LEU:HD11	1:A:512:ARG:HD3	10	0.2
(1,2699)	1:A:507:LEU:HD12	1:A:512:ARG:HD3	10	0.2
(1,2699)	1:A:507:LEU:HD13	1:A:512:ARG:HD3	10	0.2
(1,2699)	1:A:507:LEU:HD21	1:A:512:ARG:HD3	10	0.2
(1,2699)	1:A:507:LEU:HD22	1:A:512:ARG:HD3	10	0.2
(1,2699)	1:A:507:LEU:HD23	1:A:512:ARG:HD3	10	0.2
(1,2699)	1:A:507:LEU:HD11	1:A:512:ARG:HD3	19	0.2
(1,2699)	1:A:507:LEU:HD12	1:A:512:ARG:HD3	19	0.2
(1,2699)	1:A:507:LEU:HD13	1:A:512:ARG:HD3	19	0.2
(1,2699)	1:A:507:LEU:HD21	1:A:512:ARG:HD3	19	0.2
(1,2699)	1:A:507:LEU:HD22	1:A:512:ARG:HD3	19	0.2
(1,2699)	1:A:507:LEU:HD23	1:A:512:ARG:HD3	19	0.2
(1,2669)	1:A:495:SER:HB3	1:A:498:GLN:HB3	1	0.2
(1,2606)	1:A:490:LEU:H	1:A:513:LEU:HB3	17	0.2
(1,2599)	1:A:488:PRO:HD3	1:A:510:LEU:HG	7	0.2
(1,2575)	1:A:484:ASP:HB3	1:A:485:CYS:H	9	0.2
(1,2542)	1:A:475:SER:HB3	1:A:476:ASN:H	3	0.2
(1,2537)	1:A:473:MET:HG3	1:A:474:MET:H	12	0.2
(1,2526)	1:A:471:GLN:HB3	1:A:471:GLN:HG3	5	0.2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2526)	1:A:471:GLN:HB3	1:A:471:GLN:HG3	10	0.2
(1,2526)	1:A:471:GLN:HB3	1:A:471:GLN:HG3	15	0.2
(1,2526)	1:A:471:GLN:HB3	1:A:471:GLN:HG3	20	0.2
(1,2508)	1:A:468:GLN:HA	1:A:468:GLN:HG3	5	0.2
(1,2505)	1:A:468:GLN:H	1:A:468:GLN:HB3	9	0.2
(1,2505)	1:A:468:GLN:H	1:A:468:GLN:HB3	12	0.2
(1,2505)	1:A:468:GLN:H	1:A:468:GLN:HB3	13	0.2
(1,2505)	1:A:468:GLN:H	1:A:468:GLN:HB3	18	0.2
(1,2505)	1:A:468:GLN:H	1:A:468:GLN:HB3	20	0.2
(1,2502)	1:A:467:HIS:HA	1:A:470:ASN:HB3	18	0.2
(1,2478)	1:A:463:ARG:H	1:A:463:ARG:HD3	16	0.2
(1,2472)	1:A:458:SER:HB3	1:A:459:ASN:H	3	0.2
(1,2471)	1:A:458:SER:H	1:A:458:SER:HB3	5	0.2
(1,2409)	1:A:446:ILE:HG21	1:A:473:MET:HG3	18	0.2
(1,2409)	1:A:446:ILE:HG22	1:A:473:MET:HG3	18	0.2
(1,2409)	1:A:446:ILE:HG23	1:A:473:MET:HG3	18	0.2
(1,2405)	1:A:444:ASP:H	1:A:444:ASP:HB3	6	0.2
(1,2399)	1:A:443:GLN:HG3	1:A:443:GLN:HE21	3	0.2
(1,2399)	1:A:443:GLN:HG3	1:A:443:GLN:HE22	3	0.2
(1,2399)	1:A:443:GLN:HG3	1:A:443:GLN:HE21	7	0.2
(1,2399)	1:A:443:GLN:HG3	1:A:443:GLN:HE22	7	0.2
(1,2399)	1:A:443:GLN:HG3	1:A:443:GLN:HE21	9	0.2
(1,2399)	1:A:443:GLN:HG3	1:A:443:GLN:HE22	9	0.2
(1,2372)	1:A:436:ARG:HB3	1:A:436:ARG:HD3	9	0.2
(1,2371)	1:A:436:ARG:HB3	1:A:436:ARG:HG3	1	0.2
(1,2371)	1:A:436:ARG:HB3	1:A:436:ARG:HG3	11	0.2
(1,2371)	1:A:436:ARG:HB3	1:A:436:ARG:HG3	18	0.2
(1,2365)	1:A:434:HIS:H	1:A:434:HIS:HB3	20	0.2
(1,2357)	1:A:432:GLN:HB3	1:A:433:VAL:H	17	0.2
(1,2357)	1:A:432:GLN:HB3	1:A:433:VAL:H	19	0.2
(1,2354)	1:A:432:GLN:H	1:A:432:GLN:HB3	8	0.2
(1,2350)	1:A:431:PHE:HA	1:A:432:GLN:HB3	7	0.2
(1,2349)	1:A:431:PHE:H	1:A:431:PHE:HB3	15	0.2
(1,2264)	1:A:415:LYS:HE3	1:A:521:ALA:HB1	3	0.2
(1,2264)	1:A:415:LYS:HE3	1:A:521:ALA:HB2	3	0.2
(1,2264)	1:A:415:LYS:HE3	1:A:521:ALA:HB3	3	0.2
(1,2264)	1:A:415:LYS:HE3	1:A:521:ALA:HB1	20	0.2
(1,2264)	1:A:415:LYS:HE3	1:A:521:ALA:HB2	20	0.2
(1,2264)	1:A:415:LYS:HE3	1:A:521:ALA:HB3	20	0.2
(1,2256)	1:A:414:GLU:HG3	1:A:415:LYS:H	17	0.2
(1,2240)	1:A:411:ARG:HA	1:A:411:ARG:HG3	19	0.2
(1,2225)	1:A:408:ILE:HG21	1:A:493:GLU:HB3	12	0.2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2225)	1:A:408:ILE:HG22	1:A:493:GLU:HB3	12	0.2
(1,2225)	1:A:408:ILE:HG23	1:A:493:GLU:HB3	12	0.2
(1,2202)	1:A:405:ASP:HB3	1:A:406:GLU:H	4	0.2
(1,2161)	1:A:397:PHE:HB3	1:A:398:VAL:H	1	0.2
(1,2152)	1:A:395:TYR:HB3	1:A:397:PHE:HA	15	0.2
(1,2143)	1:A:393:LYS:HB3	1:A:393:LYS:HD3	9	0.2
(1,2143)	1:A:393:LYS:HB3	1:A:393:LYS:HD3	16	0.2
(1,2083)	1:A:540:TRP:HB3	1:A:540:TRP:HD1	7	0.2
(1,2019)	1:A:505:SER:HB3	1:A:506:LEU:HD21	15	0.2
(1,2019)	1:A:505:SER:HB3	1:A:506:LEU:HD22	15	0.2
(1,2019)	1:A:505:SER:HB3	1:A:506:LEU:HD23	15	0.2
(1,1853)	1:A:436:ARG:HA	1:A:436:ARG:HG3	15	0.2
(1,1844)	1:A:479:ARG:HA	1:A:479:ARG:HG3	18	0.2
(1,1753)	1:A:512:ARG:H	1:A:512:ARG:HD3	9	0.2
(1,175)	1:A:474:MET:HB3	1:A:475:SER:H	16	0.2
(1,1740)	1:A:436:ARG:HA	1:A:436:ARG:HD3	1	0.2
(1,1731)	1:A:532:ARG:HD3	1:A:533:LEU:H	3	0.2
(1,1731)	1:A:532:ARG:HD3	1:A:533:LEU:H	7	0.2
(1,1730)	1:A:531:HIS:HD2	1:A:532:ARG:HD3	11	0.2
(1,1723)	1:A:403:ARG:HD3	1:A:403:ARG:HH22	16	0.2
(1,1706)	1:A:393:LYS:HE3	1:A:394:PHE:H	2	0.2
(1,1660)	1:A:518:GLN:HA	1:A:518:GLN:HG3	3	0.2
(1,1660)	1:A:518:GLN:HA	1:A:518:GLN:HG3	5	0.2
(1,164)	1:A:465:SER:H	1:A:466:LEU:HB3	12	0.2
(1,1607)	1:A:537:LYS:HA	1:A:537:LYS:HD3	4	0.2
(1,1607)	1:A:537:LYS:HA	1:A:537:LYS:HD3	16	0.2
(1,1598)	1:A:393:LYS:HA	1:A:393:LYS:HD3	6	0.2
(1,1572)	1:A:479:ARG:HG3	1:A:480:GLN:H	16	0.2
(1,1432)	1:A:462:CYS:HB3	1:A:506:LEU:HD21	19	0.2
(1,1432)	1:A:462:CYS:HB3	1:A:506:LEU:HD22	19	0.2
(1,1432)	1:A:462:CYS:HB3	1:A:506:LEU:HD23	19	0.2
(1,1262)	1:A:527:THR:HG21	1:A:529:LYS:HG3	5	0.2
(1,1262)	1:A:527:THR:HG22	1:A:529:LYS:HG3	5	0.2
(1,1262)	1:A:527:THR:HG23	1:A:529:LYS:HG3	5	0.2
(1,1000)	1:A:515:GLU:H	1:A:515:GLU:HB3	6	0.2
(1,829)	1:A:534:GLN:HB3	1:A:535:ALA:H	14	0.19
(1,80)	1:A:515:GLU:HB3	1:A:517:SER:H	6	0.19
(1,681)	1:A:479:ARG:HG3	1:A:479:ARG:HE	10	0.19
(1,679)	1:A:436:ARG:H	1:A:436:ARG:HD3	17	0.19
(1,678)	1:A:436:ARG:H	1:A:438:GLU:HG3	1	0.19
(1,653)	1:A:479:ARG:HD3	1:A:480:GLN:H	14	0.19
(1,606)	1:A:438:GLU:H	1:A:438:GLU:HG3	9	0.19

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,579)	1:A:532:ARG:HB3	1:A:533:LEU:H	8	0.19
(1,536)	1:A:543:GLU:H	1:A:543:GLU:HB3	12	0.19
(1,536)	1:A:543:GLU:H	1:A:543:GLU:HB3	13	0.19
(1,536)	1:A:543:GLU:H	1:A:543:GLU:HB3	16	0.19
(1,511)	1:A:403:ARG:HD3	1:A:404:ALA:H	16	0.19
(1,397)	1:A:536:ARG:H	1:A:536:ARG:HD3	5	0.19
(1,397)	1:A:536:ARG:H	1:A:536:ARG:HD3	19	0.19
(1,2848)	1:A:544:GLN:HG3	1:A:545:ASP:H	8	0.19
(1,2824)	1:A:534:GLN:HG3	1:A:535:ALA:HB1	3	0.19
(1,2824)	1:A:534:GLN:HG3	1:A:535:ALA:HB2	3	0.19
(1,2824)	1:A:534:GLN:HG3	1:A:535:ALA:HB3	3	0.19
(1,2812)	1:A:531:HIS:HA	1:A:534:GLN:HG3	2	0.19
(1,2808)	1:A:529:LYS:HB3	1:A:531:HIS:HE1	8	0.19
(1,2800)	1:A:529:LYS:H	1:A:529:LYS:HD3	13	0.19
(1,2721)	1:A:512:ARG:H	1:A:512:ARG:HG3	9	0.19
(1,2714)	1:A:511:VAL:HG11	1:A:513:LEU:HB3	8	0.19
(1,2714)	1:A:511:VAL:HG12	1:A:513:LEU:HB3	8	0.19
(1,2714)	1:A:511:VAL:HG13	1:A:513:LEU:HB3	8	0.19
(1,2714)	1:A:511:VAL:HG21	1:A:513:LEU:HB3	8	0.19
(1,2714)	1:A:511:VAL:HG22	1:A:513:LEU:HB3	8	0.19
(1,2714)	1:A:511:VAL:HG23	1:A:513:LEU:HB3	8	0.19
(1,2714)	1:A:511:VAL:HG11	1:A:513:LEU:HB3	12	0.19
(1,2714)	1:A:511:VAL:HG12	1:A:513:LEU:HB3	12	0.19
(1,2714)	1:A:511:VAL:HG13	1:A:513:LEU:HB3	12	0.19
(1,2714)	1:A:511:VAL:HG21	1:A:513:LEU:HB3	12	0.19
(1,2714)	1:A:511:VAL:HG22	1:A:513:LEU:HB3	12	0.19
(1,2714)	1:A:511:VAL:HG23	1:A:513:LEU:HB3	12	0.19
(1,2700)	1:A:509:GLY:H	1:A:510:LEU:HB3	19	0.19
(1,2679)	1:A:498:GLN:HG3	1:A:499:LEU:H	6	0.19
(1,2679)	1:A:498:GLN:HG3	1:A:499:LEU:H	13	0.19
(1,2655)	1:A:493:GLU:H	1:A:493:GLU:HG3	3	0.19
(1,2641)	1:A:492:LEU:HB3	1:A:493:GLU:H	19	0.19
(1,2576)	1:A:485:CYS:H	1:A:485:CYS:HB3	19	0.19
(1,2565)	1:A:482:SER:H	1:A:483:PRO:HD3	3	0.19
(1,2563)	1:A:480:GLN:HG3	1:A:480:GLN:HE21	1	0.19
(1,2563)	1:A:480:GLN:HG3	1:A:480:GLN:HE22	1	0.19
(1,2555)	1:A:479:ARG:HB3	1:A:479:ARG:HD3	17	0.19
(1,2508)	1:A:468:GLN:HA	1:A:468:GLN:HG3	13	0.19
(1,2505)	1:A:468:GLN:H	1:A:468:GLN:HB3	8	0.19
(1,2505)	1:A:468:GLN:H	1:A:468:GLN:HB3	17	0.19
(1,249)	1:A:407:HIS:HB3	1:A:410:LEU:H	8	0.19
(1,2478)	1:A:463:ARG:H	1:A:463:ARG:HD3	10	0.19

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2437)	1:A:454:LEU:H	1:A:489:PHE:HB3	3	0.19
(1,2407)	1:A:446:ILE:H	1:A:446:ILE:HG13	10	0.19
(1,2399)	1:A:443:GLN:HG3	1:A:443:GLN:HE21	14	0.19
(1,2399)	1:A:443:GLN:HG3	1:A:443:GLN:HE22	14	0.19
(1,2399)	1:A:443:GLN:HG3	1:A:443:GLN:HE21	19	0.19
(1,2399)	1:A:443:GLN:HG3	1:A:443:GLN:HE22	19	0.19
(1,2365)	1:A:434:HIS:H	1:A:434:HIS:HB3	8	0.19
(1,2344)	1:A:430:ASP:H	1:A:430:ASP:HB3	5	0.19
(1,2342)	1:A:429:GLU:H	1:A:429:GLU:HG3	9	0.19
(1,2341)	1:A:428:CYS:HA	1:A:429:GLU:HB3	20	0.19
(1,2336)	1:A:423:ASP:HB3	1:A:424:GLY:H	18	0.19
(1,2262)	1:A:415:LYS:HE3	1:A:520:PHE:HE1	9	0.19
(1,2262)	1:A:415:LYS:HE3	1:A:520:PHE:HE2	9	0.19
(1,2214)	1:A:406:GLU:HG3	1:A:407:HIS:HA	15	0.19
(1,2131)	1:A:388:SER:H	1:A:388:SER:HB3	20	0.19
(1,2074)	1:A:393:LYS:HD3	1:A:395:TYR:HE1	11	0.19
(1,2074)	1:A:393:LYS:HD3	1:A:395:TYR:HE2	11	0.19
(1,2008)	1:A:462:CYS:HA	1:A:465:SER:HB3	19	0.19
(1,1993)	1:A:501:SER:HA	1:A:501:SER:HB3	1	0.19
(1,1993)	1:A:501:SER:HA	1:A:501:SER:HB3	3	0.19
(1,1993)	1:A:501:SER:HA	1:A:501:SER:HB3	6	0.19
(1,1993)	1:A:501:SER:HA	1:A:501:SER:HB3	16	0.19
(1,1993)	1:A:501:SER:HA	1:A:501:SER:HB3	17	0.19
(1,1993)	1:A:501:SER:HA	1:A:501:SER:HB3	20	0.19
(1,1928)	1:A:415:LYS:HA	1:A:415:LYS:HD3	1	0.19
(1,1844)	1:A:479:ARG:HA	1:A:479:ARG:HG3	3	0.19
(1,1844)	1:A:479:ARG:HA	1:A:479:ARG:HG3	15	0.19
(1,1800)	1:A:529:LYS:HA	1:A:529:LYS:HG3	14	0.19
(1,1743)	1:A:479:ARG:HA	1:A:479:ARG:HD3	10	0.19
(1,1732)	1:A:541:ARG:HB3	1:A:541:ARG:HD3	20	0.19
(1,1728)	1:A:532:ARG:HB3	1:A:532:ARG:HD3	12	0.19
(1,1725)	1:A:463:ARG:HB3	1:A:463:ARG:HD3	6	0.19
(1,1707)	1:A:542:LYS:HG3	1:A:542:LYS:HE3	2	0.19
(1,1676)	1:A:416:LEU:HG	1:A:417:GLU:HG3	9	0.19
(1,1676)	1:A:416:LEU:HG	1:A:417:GLU:HG3	13	0.19
(1,1670)	1:A:438:GLU:HA	1:A:438:GLU:HG3	1	0.19
(1,1660)	1:A:518:GLN:HA	1:A:518:GLN:HG3	1	0.19
(1,1660)	1:A:518:GLN:HA	1:A:518:GLN:HG3	4	0.19
(1,1660)	1:A:518:GLN:HA	1:A:518:GLN:HG3	7	0.19
(1,1660)	1:A:518:GLN:HA	1:A:518:GLN:HG3	8	0.19
(1,1660)	1:A:518:GLN:HA	1:A:518:GLN:HG3	9	0.19
(1,1660)	1:A:518:GLN:HA	1:A:518:GLN:HG3	13	0.19

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1660)	1:A:518:GLN:HA	1:A:518:GLN:HG3	18	0.19
(1,1616)	1:A:415:LYS:HD3	1:A:520:PHE:HE1	7	0.19
(1,1616)	1:A:415:LYS:HD3	1:A:520:PHE:HE2	7	0.19
(1,1607)	1:A:537:LYS:HA	1:A:537:LYS:HD3	6	0.19
(1,1605)	1:A:539:MET:HA	1:A:542:LYS:HD3	17	0.19
(1,1600)	1:A:393:LYS:H	1:A:393:LYS:HD3	4	0.19
(1,1432)	1:A:462:CYS:HB3	1:A:506:LEU:HD21	13	0.19
(1,1432)	1:A:462:CYS:HB3	1:A:506:LEU:HD22	13	0.19
(1,1432)	1:A:462:CYS:HB3	1:A:506:LEU:HD23	13	0.19
(1,1188)	1:A:538:ALA:HB1	1:A:539:MET:HB3	11	0.19
(1,1188)	1:A:538:ALA:HB2	1:A:539:MET:HB3	11	0.19
(1,1188)	1:A:538:ALA:HB3	1:A:539:MET:HB3	11	0.19
(1,1090)	1:A:518:GLN:HG3	1:A:519:ILE:HD11	13	0.19
(1,1090)	1:A:518:GLN:HG3	1:A:519:ILE:HD12	13	0.19
(1,1090)	1:A:518:GLN:HG3	1:A:519:ILE:HD13	13	0.19
(1,1090)	1:A:518:GLN:HG3	1:A:519:ILE:HD11	16	0.19
(1,1090)	1:A:518:GLN:HG3	1:A:519:ILE:HD12	16	0.19
(1,1090)	1:A:518:GLN:HG3	1:A:519:ILE:HD13	16	0.19
(1,98)	1:A:417:GLU:HG3	1:A:423:ASP:H	20	0.18
(1,829)	1:A:534:GLN:HB3	1:A:535:ALA:H	4	0.18
(1,829)	1:A:534:GLN:HB3	1:A:535:ALA:H	7	0.18
(1,786)	1:A:471:GLN:HB3	1:A:472:ALA:H	19	0.18
(1,710)	1:A:466:LEU:HB3	1:A:469:VAL:H	10	0.18
(1,691)	1:A:432:GLN:H	1:A:432:GLN:HG3	19	0.18
(1,678)	1:A:436:ARG:H	1:A:438:GLU:HG3	20	0.18
(1,606)	1:A:438:GLU:H	1:A:438:GLU:HG3	2	0.18
(1,555)	1:A:542:LYS:H	1:A:542:LYS:HE3	17	0.18
(1,553)	1:A:541:ARG:HB3	1:A:542:LYS:H	3	0.18
(1,536)	1:A:543:GLU:H	1:A:543:GLU:HB3	5	0.18
(1,536)	1:A:543:GLU:H	1:A:543:GLU:HB3	15	0.18
(1,523)	1:A:529:LYS:H	1:A:529:LYS:HE3	16	0.18
(1,484)	1:A:419:LEU:H	1:A:420:GLY:HA3	5	0.18
(1,338)	1:A:503:THR:H	1:A:505:SER:HB3	6	0.18
(1,2848)	1:A:544:GLN:HG3	1:A:545:ASP:H	4	0.18
(1,2810)	1:A:530:PRO:HA	1:A:533:LEU:HB3	9	0.18
(1,2810)	1:A:530:PRO:HA	1:A:533:LEU:HB3	13	0.18
(1,2804)	1:A:529:LYS:HA	1:A:530:PRO:HG3	12	0.18
(1,2800)	1:A:529:LYS:H	1:A:529:LYS:HD3	3	0.18
(1,2757)	1:A:515:GLU:HG3	1:A:516:HIS:H	19	0.18
(1,2755)	1:A:515:GLU:H	1:A:515:GLU:HG3	16	0.18
(1,2732)	1:A:513:LEU:HB3	1:A:520:PHE:HD1	11	0.18
(1,2732)	1:A:513:LEU:HB3	1:A:520:PHE:HD2	11	0.18

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2714)	1:A:511:VAL:HG11	1:A:513:LEU:HB3	11	0.18
(1,2714)	1:A:511:VAL:HG12	1:A:513:LEU:HB3	11	0.18
(1,2714)	1:A:511:VAL:HG13	1:A:513:LEU:HB3	11	0.18
(1,2714)	1:A:511:VAL:HG21	1:A:513:LEU:HB3	11	0.18
(1,2714)	1:A:511:VAL:HG22	1:A:513:LEU:HB3	11	0.18
(1,2714)	1:A:511:VAL:HG23	1:A:513:LEU:HB3	11	0.18
(1,2699)	1:A:507:LEU:HD11	1:A:512:ARG:HD3	2	0.18
(1,2699)	1:A:507:LEU:HD12	1:A:512:ARG:HD3	2	0.18
(1,2699)	1:A:507:LEU:HD13	1:A:512:ARG:HD3	2	0.18
(1,2699)	1:A:507:LEU:HD21	1:A:512:ARG:HD3	2	0.18
(1,2699)	1:A:507:LEU:HD22	1:A:512:ARG:HD3	2	0.18
(1,2699)	1:A:507:LEU:HD23	1:A:512:ARG:HD3	2	0.18
(1,2688)	1:A:502:ASP:HB3	1:A:506:LEU:HD11	2	0.18
(1,2688)	1:A:502:ASP:HB3	1:A:506:LEU:HD12	2	0.18
(1,2688)	1:A:502:ASP:HB3	1:A:506:LEU:HD13	2	0.18
(1,2679)	1:A:498:GLN:HG3	1:A:499:LEU:H	12	0.18
(1,2679)	1:A:498:GLN:HG3	1:A:499:LEU:H	17	0.18
(1,2654)	1:A:493:GLU:H	1:A:493:GLU:HB3	4	0.18
(1,2654)	1:A:493:GLU:H	1:A:493:GLU:HB3	7	0.18
(1,2654)	1:A:493:GLU:H	1:A:493:GLU:HB3	17	0.18
(1,2638)	1:A:492:LEU:H	1:A:515:GLU:HG3	12	0.18
(1,2576)	1:A:485:CYS:H	1:A:485:CYS:HB3	7	0.18
(1,2558)	1:A:480:GLN:H	1:A:480:GLN:HB3	19	0.18
(1,2555)	1:A:479:ARG:HB3	1:A:479:ARG:HD3	5	0.18
(1,2555)	1:A:479:ARG:HB3	1:A:479:ARG:HD3	8	0.18
(1,2536)	1:A:473:MET:HB3	1:A:474:MET:H	1	0.18
(1,2524)	1:A:471:GLN:HA	1:A:471:GLN:HG3	12	0.18
(1,2505)	1:A:468:GLN:H	1:A:468:GLN:HB3	1	0.18
(1,2505)	1:A:468:GLN:H	1:A:468:GLN:HB3	7	0.18
(1,2505)	1:A:468:GLN:H	1:A:468:GLN:HB3	15	0.18
(1,2496)	1:A:466:LEU:HB3	1:A:469:VAL:HG11	16	0.18
(1,2496)	1:A:466:LEU:HB3	1:A:469:VAL:HG12	16	0.18
(1,2496)	1:A:466:LEU:HB3	1:A:469:VAL:HG13	16	0.18
(1,2496)	1:A:466:LEU:HB3	1:A:469:VAL:HG21	16	0.18
(1,2496)	1:A:466:LEU:HB3	1:A:469:VAL:HG22	16	0.18
(1,2496)	1:A:466:LEU:HB3	1:A:469:VAL:HG23	16	0.18
(1,2495)	1:A:466:LEU:HB3	1:A:467:HIS:HB3	6	0.18
(1,2491)	1:A:465:SER:HA	1:A:468:GLN:HB3	12	0.18
(1,2472)	1:A:458:SER:HB3	1:A:459:ASN:H	17	0.18
(1,2432)	1:A:453:ILE:HG13	1:A:454:LEU:H	12	0.18
(1,2432)	1:A:453:ILE:HG13	1:A:454:LEU:H	18	0.18
(1,2406)	1:A:444:ASP:HB3	1:A:445:ALA:H	6	0.18

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2405)	1:A:444:ASP:H	1:A:444:ASP:HB3	1	0.18
(1,2385)	1:A:439:LEU:HD11	1:A:444:ASP:HB3	6	0.18
(1,2385)	1:A:439:LEU:HD12	1:A:444:ASP:HB3	6	0.18
(1,2385)	1:A:439:LEU:HD13	1:A:444:ASP:HB3	6	0.18
(1,2385)	1:A:439:LEU:HD21	1:A:444:ASP:HB3	6	0.18
(1,2385)	1:A:439:LEU:HD22	1:A:444:ASP:HB3	6	0.18
(1,2385)	1:A:439:LEU:HD23	1:A:444:ASP:HB3	6	0.18
(1,2371)	1:A:436:ARG:HB3	1:A:436:ARG:HG3	2	0.18
(1,2365)	1:A:434:HIS:H	1:A:434:HIS:HB3	10	0.18
(1,2352)	1:A:431:PHE:HB3	1:A:432:GLN:H	3	0.18
(1,2336)	1:A:423:ASP:HB3	1:A:424:GLY:H	16	0.18
(1,2318)	1:A:421:VAL:H	1:A:422:PRO:HD3	7	0.18
(1,2318)	1:A:421:VAL:H	1:A:422:PRO:HD3	14	0.18
(1,2264)	1:A:415:LYS:HE3	1:A:521:ALA:HB1	11	0.18
(1,2264)	1:A:415:LYS:HE3	1:A:521:ALA:HB2	11	0.18
(1,2264)	1:A:415:LYS:HE3	1:A:521:ALA:HB3	11	0.18
(1,2263)	1:A:415:LYS:HE3	1:A:520:PHE:HZ	4	0.18
(1,2252)	1:A:414:GLU:H	1:A:423:ASP:HB3	17	0.18
(1,2214)	1:A:406:GLU:HG3	1:A:407:HIS:HA	6	0.18
(1,2203)	1:A:405:ASP:HB3	1:A:408:ILE:H	7	0.18
(1,2202)	1:A:405:ASP:HB3	1:A:406:GLU:H	7	0.18
(1,2202)	1:A:405:ASP:HB3	1:A:406:GLU:H	9	0.18
(1,2202)	1:A:405:ASP:HB3	1:A:406:GLU:H	10	0.18
(1,2202)	1:A:405:ASP:HB3	1:A:406:GLU:H	11	0.18
(1,2152)	1:A:395:TYR:HB3	1:A:397:PHE:HA	4	0.18
(1,2152)	1:A:395:TYR:HB3	1:A:397:PHE:HA	6	0.18
(1,2137)	1:A:392:GLN:HA	1:A:393:LYS:HB3	9	0.18
(1,2083)	1:A:540:TRP:HB3	1:A:540:TRP:HD1	2	0.18
(1,1993)	1:A:501:SER:HA	1:A:501:SER:HB3	10	0.18
(1,1853)	1:A:436:ARG:HA	1:A:436:ARG:HG3	10	0.18
(1,1850)	1:A:391:GLU:HA	1:A:391:GLU:HG3	20	0.18
(1,1723)	1:A:403:ARG:HD3	1:A:403:ARG:HH22	9	0.18
(1,172)	1:A:403:ARG:HB3	1:A:405:ASP:H	6	0.18
(1,1708)	1:A:542:LYS:HD3	1:A:542:LYS:HE3	4	0.18
(1,1706)	1:A:393:LYS:HE3	1:A:394:PHE:H	3	0.18
(1,1660)	1:A:518:GLN:HA	1:A:518:GLN:HG3	14	0.18
(1,165)	1:A:463:ARG:HB3	1:A:465:SER:H	4	0.18
(1,1618)	1:A:463:ARG:HB3	1:A:506:LEU:HD11	18	0.18
(1,1618)	1:A:463:ARG:HB3	1:A:506:LEU:HD12	18	0.18
(1,1618)	1:A:463:ARG:HB3	1:A:506:LEU:HD13	18	0.18
(1,1609)	1:A:394:PHE:HD1	1:A:537:LYS:HD3	19	0.18
(1,1609)	1:A:394:PHE:HD2	1:A:537:LYS:HD3	19	0.18

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1600)	1:A:393:LYS:H	1:A:393:LYS:HD3	7	0.18
(1,1591)	1:A:531:HIS:HA	1:A:534:GLN:HB3	11	0.18
(1,1572)	1:A:479:ARG:HG3	1:A:480:GLN:H	3	0.18
(1,1432)	1:A:462:CYS:HB3	1:A:506:LEU:HD21	3	0.18
(1,1432)	1:A:462:CYS:HB3	1:A:506:LEU:HD22	3	0.18
(1,1432)	1:A:462:CYS:HB3	1:A:506:LEU:HD23	3	0.18
(1,1432)	1:A:462:CYS:HB3	1:A:506:LEU:HD21	9	0.18
(1,1432)	1:A:462:CYS:HB3	1:A:506:LEU:HD22	9	0.18
(1,1432)	1:A:462:CYS:HB3	1:A:506:LEU:HD23	9	0.18
(1,1383)	1:A:462:CYS:HB3	1:A:503:THR:HG21	15	0.18
(1,1383)	1:A:462:CYS:HB3	1:A:503:THR:HG22	15	0.18
(1,1383)	1:A:462:CYS:HB3	1:A:503:THR:HG23	15	0.18
(1,999)	1:A:492:LEU:HG	1:A:515:GLU:H	16	0.17
(1,947)	1:A:462:CYS:H	1:A:462:CYS:HB3	6	0.17
(1,947)	1:A:462:CYS:H	1:A:462:CYS:HB3	16	0.17
(1,910)	1:A:417:GLU:HG3	1:A:418:ALA:H	3	0.17
(1,910)	1:A:417:GLU:HG3	1:A:418:ALA:H	18	0.17
(1,835)	1:A:415:LYS:H	1:A:415:LYS:HG3	10	0.17
(1,829)	1:A:534:GLN:HB3	1:A:535:ALA:H	20	0.17
(1,80)	1:A:515:GLU:HB3	1:A:517:SER:H	14	0.17
(1,699)	1:A:541:ARG:HB3	1:A:541:ARG:HE	7	0.17
(1,678)	1:A:436:ARG:H	1:A:438:GLU:HG3	6	0.17
(1,553)	1:A:541:ARG:HB3	1:A:542:LYS:H	7	0.17
(1,54)	1:A:436:ARG:HD3	1:A:437:GLY:H	18	0.17
(1,536)	1:A:543:GLU:H	1:A:543:GLU:HB3	11	0.17
(1,397)	1:A:536:ARG:H	1:A:536:ARG:HD3	2	0.17
(1,397)	1:A:536:ARG:H	1:A:536:ARG:HD3	20	0.17
(1,338)	1:A:503:THR:H	1:A:505:SER:HB3	16	0.17
(1,337)	1:A:501:SER:HB3	1:A:503:THR:H	14	0.17
(1,2832)	1:A:541:ARG:H	1:A:541:ARG:HG3	5	0.17
(1,2825)	1:A:537:LYS:H	1:A:537:LYS:HB3	12	0.17
(1,2804)	1:A:529:LYS:HA	1:A:530:PRO:HG3	1	0.17
(1,2804)	1:A:529:LYS:HA	1:A:530:PRO:HG3	3	0.17
(1,2804)	1:A:529:LYS:HA	1:A:530:PRO:HG3	5	0.17
(1,2804)	1:A:529:LYS:HA	1:A:530:PRO:HG3	10	0.17
(1,2804)	1:A:529:LYS:HA	1:A:530:PRO:HG3	16	0.17
(1,2804)	1:A:529:LYS:HA	1:A:530:PRO:HG3	18	0.17
(1,2800)	1:A:529:LYS:H	1:A:529:LYS:HD3	1	0.17
(1,2800)	1:A:529:LYS:H	1:A:529:LYS:HD3	9	0.17
(1,2800)	1:A:529:LYS:H	1:A:529:LYS:HD3	19	0.17
(1,2796)	1:A:527:THR:HA	1:A:529:LYS:HD3	7	0.17
(1,2714)	1:A:511:VAL:HG11	1:A:513:LEU:HB3	16	0.17

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2714)	1:A:511:VAL:HG12	1:A:513:LEU:HB3	16	0.17
(1,2714)	1:A:511:VAL:HG13	1:A:513:LEU:HB3	16	0.17
(1,2714)	1:A:511:VAL:HG21	1:A:513:LEU:HB3	16	0.17
(1,2714)	1:A:511:VAL:HG22	1:A:513:LEU:HB3	16	0.17
(1,2714)	1:A:511:VAL:HG23	1:A:513:LEU:HB3	16	0.17
(1,2679)	1:A:498:GLN:HG3	1:A:499:LEU:H	3	0.17
(1,2679)	1:A:498:GLN:HG3	1:A:499:LEU:H	8	0.17
(1,2669)	1:A:495:SER:HB3	1:A:498:GLN:HB3	5	0.17
(1,2669)	1:A:495:SER:HB3	1:A:498:GLN:HB3	10	0.17
(1,2655)	1:A:493:GLU:H	1:A:493:GLU:HG3	18	0.17
(1,2654)	1:A:493:GLU:H	1:A:493:GLU:HB3	19	0.17
(1,2643)	1:A:492:LEU:HG	1:A:515:GLU:HG3	1	0.17
(1,2641)	1:A:492:LEU:HB3	1:A:493:GLU:H	1	0.17
(1,2599)	1:A:488:PRO:HD3	1:A:510:LEU:HG	8	0.17
(1,2576)	1:A:485:CYS:H	1:A:485:CYS:HB3	18	0.17
(1,2565)	1:A:482:SER:H	1:A:483:PRO:HD3	9	0.17
(1,2563)	1:A:480:GLN:HG3	1:A:480:GLN:HE21	3	0.17
(1,2563)	1:A:480:GLN:HG3	1:A:480:GLN:HE22	3	0.17
(1,2563)	1:A:480:GLN:HG3	1:A:480:GLN:HE21	9	0.17
(1,2563)	1:A:480:GLN:HG3	1:A:480:GLN:HE22	9	0.17
(1,2558)	1:A:480:GLN:H	1:A:480:GLN:HB3	6	0.17
(1,2558)	1:A:480:GLN:H	1:A:480:GLN:HB3	20	0.17
(1,2555)	1:A:479:ARG:HB3	1:A:479:ARG:HD3	1	0.17
(1,2524)	1:A:471:GLN:HA	1:A:471:GLN:HG3	11	0.17
(1,2524)	1:A:471:GLN:HA	1:A:471:GLN:HG3	14	0.17
(1,2495)	1:A:466:LEU:HB3	1:A:467:HIS:HB3	4	0.17
(1,2433)	1:A:453:ILE:HG13	1:A:487:ILE:HD11	16	0.17
(1,2433)	1:A:453:ILE:HG13	1:A:487:ILE:HD12	16	0.17
(1,2433)	1:A:453:ILE:HG13	1:A:487:ILE:HD13	16	0.17
(1,2432)	1:A:453:ILE:HG13	1:A:454:LEU:H	20	0.17
(1,2431)	1:A:453:ILE:HG21	1:A:453:ILE:HG13	8	0.17
(1,2431)	1:A:453:ILE:HG22	1:A:453:ILE:HG13	8	0.17
(1,2431)	1:A:453:ILE:HG23	1:A:453:ILE:HG13	8	0.17
(1,2431)	1:A:453:ILE:HG21	1:A:453:ILE:HG13	14	0.17
(1,2431)	1:A:453:ILE:HG22	1:A:453:ILE:HG13	14	0.17
(1,2431)	1:A:453:ILE:HG23	1:A:453:ILE:HG13	14	0.17
(1,2431)	1:A:453:ILE:HG21	1:A:453:ILE:HG13	15	0.17
(1,2431)	1:A:453:ILE:HG22	1:A:453:ILE:HG13	15	0.17
(1,2431)	1:A:453:ILE:HG23	1:A:453:ILE:HG13	15	0.17
(1,2431)	1:A:453:ILE:HG21	1:A:453:ILE:HG13	19	0.17
(1,2431)	1:A:453:ILE:HG22	1:A:453:ILE:HG13	19	0.17
(1,2431)	1:A:453:ILE:HG23	1:A:453:ILE:HG13	19	0.17

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2371)	1:A:436:ARG:HB3	1:A:436:ARG:HG3	10	0.17
(1,2369)	1:A:436:ARG:H	1:A:436:ARG:HB3	13	0.17
(1,2357)	1:A:432:GLN:HB3	1:A:433:VAL:H	12	0.17
(1,2352)	1:A:431:PHE:HB3	1:A:432:GLN:H	1	0.17
(1,2347)	1:A:430:ASP:HB3	1:A:432:GLN:H	5	0.17
(1,2347)	1:A:430:ASP:HB3	1:A:432:GLN:H	8	0.17
(1,2336)	1:A:423:ASP:HB3	1:A:424:GLY:H	3	0.17
(1,2260)	1:A:415:LYS:HG3	1:A:415:LYS:HE3	9	0.17
(1,2256)	1:A:414:GLU:HG3	1:A:415:LYS:H	5	0.17
(1,2255)	1:A:414:GLU:HB3	1:A:415:LYS:H	19	0.17
(1,2254)	1:A:414:GLU:HB3	1:A:414:GLU:HG3	19	0.17
(1,2211)	1:A:406:GLU:HB3	1:A:409:ALA:HB1	2	0.17
(1,2211)	1:A:406:GLU:HB3	1:A:409:ALA:HB2	2	0.17
(1,2211)	1:A:406:GLU:HB3	1:A:409:ALA:HB3	2	0.17
(1,2202)	1:A:405:ASP:HB3	1:A:406:GLU:H	2	0.17
(1,2202)	1:A:405:ASP:HB3	1:A:406:GLU:H	16	0.17
(1,2202)	1:A:405:ASP:HB3	1:A:406:GLU:H	20	0.17
(1,2188)	1:A:400:LEU:HB3	1:A:401:HIS:H	19	0.17
(1,2179)	1:A:398:VAL:HG11	1:A:449:SER:HB3	18	0.17
(1,2179)	1:A:398:VAL:HG12	1:A:449:SER:HB3	18	0.17
(1,2179)	1:A:398:VAL:HG13	1:A:449:SER:HB3	18	0.17
(1,2179)	1:A:398:VAL:HG21	1:A:449:SER:HB3	18	0.17
(1,2179)	1:A:398:VAL:HG22	1:A:449:SER:HB3	18	0.17
(1,2179)	1:A:398:VAL:HG23	1:A:449:SER:HB3	18	0.17
(1,2163)	1:A:397:PHE:HB3	1:A:453:ILE:H	8	0.17
(1,2148)	1:A:395:TYR:HA	1:A:396:ASN:HB3	9	0.17
(1,2147)	1:A:394:PHE:H	1:A:394:PHE:HB3	10	0.17
(1,2146)	1:A:393:LYS:HG3	1:A:394:PHE:H	13	0.17
(1,2143)	1:A:393:LYS:HB3	1:A:393:LYS:HD3	18	0.17
(1,2138)	1:A:392:GLN:HG3	1:A:392:GLN:HE21	4	0.17
(1,2138)	1:A:392:GLN:HG3	1:A:392:GLN:HE22	4	0.17
(1,2134)	1:A:392:GLN:H	1:A:392:GLN:HG3	15	0.17
(1,2129)	1:A:387:GLU:HB3	1:A:390:SER:H	1	0.17
(1,2083)	1:A:540:TRP:HB3	1:A:540:TRP:HD1	16	0.17
(1,2012)	1:A:417:GLU:HG3	1:A:422:PRO:HA	11	0.17
(1,1993)	1:A:501:SER:HA	1:A:501:SER:HB3	2	0.17
(1,1993)	1:A:501:SER:HA	1:A:501:SER:HB3	4	0.17
(1,1993)	1:A:501:SER:HA	1:A:501:SER:HB3	5	0.17
(1,1993)	1:A:501:SER:HA	1:A:501:SER:HB3	18	0.17
(1,1925)	1:A:427:PHE:HA	1:A:428:CYS:HB3	3	0.17
(1,1853)	1:A:436:ARG:HA	1:A:436:ARG:HG3	5	0.17
(1,1853)	1:A:436:ARG:HA	1:A:436:ARG:HG3	7	0.17

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1850)	1:A:391:GLU:HA	1:A:391:GLU:HG3	9	0.17
(1,1850)	1:A:391:GLU:HA	1:A:391:GLU:HG3	14	0.17
(1,1742)	1:A:479:ARG:HG3	1:A:479:ARG:HD3	14	0.17
(1,1723)	1:A:403:ARG:HD3	1:A:403:ARG:HH22	4	0.17
(1,1723)	1:A:403:ARG:HD3	1:A:403:ARG:HH22	7	0.17
(1,1709)	1:A:542:LYS:HB3	1:A:542:LYS:HE3	14	0.17
(1,1708)	1:A:542:LYS:HD3	1:A:542:LYS:HE3	18	0.17
(1,1676)	1:A:416:LEU:HG	1:A:417:GLU:HG3	4	0.17
(1,1670)	1:A:438:GLU:HA	1:A:438:GLU:HG3	4	0.17
(1,1660)	1:A:518:GLN:HA	1:A:518:GLN:HG3	6	0.17
(1,1660)	1:A:518:GLN:HA	1:A:518:GLN:HG3	16	0.17
(1,1656)	1:A:432:GLN:HG3	1:A:433:VAL:H	2	0.17
(1,164)	1:A:465:SER:H	1:A:466:LEU:HB3	18	0.17
(1,164)	1:A:465:SER:H	1:A:466:LEU:HB3	20	0.17
(1,1638)	1:A:539:MET:HA	1:A:542:LYS:HB3	16	0.17
(1,1618)	1:A:463:ARG:HB3	1:A:506:LEU:HD11	3	0.17
(1,1618)	1:A:463:ARG:HB3	1:A:506:LEU:HD12	3	0.17
(1,1618)	1:A:463:ARG:HB3	1:A:506:LEU:HD13	3	0.17
(1,1616)	1:A:415:LYS:HD3	1:A:520:PHE:HE1	20	0.17
(1,1616)	1:A:415:LYS:HD3	1:A:520:PHE:HE2	20	0.17
(1,1607)	1:A:537:LYS:HA	1:A:537:LYS:HD3	17	0.17
(1,1603)	1:A:536:ARG:HB3	1:A:537:LYS:H	6	0.17
(1,1592)	1:A:466:LEU:HB3	1:A:467:HIS:HB3	18	0.17
(1,1591)	1:A:531:HIS:HA	1:A:534:GLN:HB3	16	0.17
(1,1576)	1:A:462:CYS:HB3	1:A:506:LEU:HD11	4	0.17
(1,1576)	1:A:462:CYS:HB3	1:A:506:LEU:HD12	4	0.17
(1,1576)	1:A:462:CYS:HB3	1:A:506:LEU:HD13	4	0.17
(1,1571)	1:A:479:ARG:H	1:A:479:ARG:HG3	8	0.17
(1,1198)	1:A:532:ARG:HB3	1:A:535:ALA:HB1	10	0.17
(1,1198)	1:A:532:ARG:HB3	1:A:535:ALA:HB2	10	0.17
(1,1198)	1:A:532:ARG:HB3	1:A:535:ALA:HB3	10	0.17
(1,1136)	1:A:473:MET:HE1	1:A:482:SER:HB3	16	0.17
(1,1136)	1:A:473:MET:HE2	1:A:482:SER:HB3	16	0.17
(1,1136)	1:A:473:MET:HE3	1:A:482:SER:HB3	16	0.17
(1,1090)	1:A:518:GLN:HG3	1:A:519:ILE:HD11	1	0.17
(1,1090)	1:A:518:GLN:HG3	1:A:519:ILE:HD12	1	0.17
(1,1090)	1:A:518:GLN:HG3	1:A:519:ILE:HD13	1	0.17
(1,829)	1:A:534:GLN:HB3	1:A:535:ALA:H	8	0.16
(1,829)	1:A:534:GLN:HB3	1:A:535:ALA:H	10	0.16
(1,789)	1:A:539:MET:HB3	1:A:540:TRP:H	11	0.16
(1,641)	1:A:501:SER:HB3	1:A:502:ASP:H	2	0.16
(1,338)	1:A:503:THR:H	1:A:505:SER:HB3	7	0.16

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,338)	1:A:503:THR:H	1:A:505:SER:HB3	14	0.16
(1,2840)	1:A:543:GLU:HA	1:A:543:GLU:HG3	16	0.16
(1,2839)	1:A:542:LYS:HG3	1:A:543:GLU:H	13	0.16
(1,2824)	1:A:534:GLN:HG3	1:A:535:ALA:HB1	8	0.16
(1,2824)	1:A:534:GLN:HG3	1:A:535:ALA:HB2	8	0.16
(1,2824)	1:A:534:GLN:HG3	1:A:535:ALA:HB3	8	0.16
(1,2824)	1:A:534:GLN:HG3	1:A:535:ALA:HB1	12	0.16
(1,2824)	1:A:534:GLN:HG3	1:A:535:ALA:HB2	12	0.16
(1,2824)	1:A:534:GLN:HG3	1:A:535:ALA:HB3	12	0.16
(1,2824)	1:A:534:GLN:HG3	1:A:535:ALA:HB1	15	0.16
(1,2824)	1:A:534:GLN:HG3	1:A:535:ALA:HB2	15	0.16
(1,2824)	1:A:534:GLN:HG3	1:A:535:ALA:HB3	15	0.16
(1,2821)	1:A:534:GLN:H	1:A:534:GLN:HG3	6	0.16
(1,2813)	1:A:532:ARG:HA	1:A:532:ARG:HG3	19	0.16
(1,2804)	1:A:529:LYS:HA	1:A:530:PRO:HG3	2	0.16
(1,2804)	1:A:529:LYS:HA	1:A:530:PRO:HG3	14	0.16
(1,2804)	1:A:529:LYS:HA	1:A:530:PRO:HG3	17	0.16
(1,2800)	1:A:529:LYS:H	1:A:529:LYS:HD3	18	0.16
(1,2760)	1:A:517:SER:HB3	1:A:518:GLN:H	9	0.16
(1,2731)	1:A:513:LEU:HB3	1:A:514:ASP:H	1	0.16
(1,2680)	1:A:499:LEU:HB3	1:A:500:SER:HB3	18	0.16
(1,2679)	1:A:498:GLN:HG3	1:A:499:LEU:H	14	0.16
(1,2654)	1:A:493:GLU:H	1:A:493:GLU:HB3	14	0.16
(1,2604)	1:A:489:PHE:HE1	1:A:515:GLU:HG3	9	0.16
(1,2604)	1:A:489:PHE:HE2	1:A:515:GLU:HG3	9	0.16
(1,2597)	1:A:488:PRO:HG3	1:A:507:LEU:HD11	16	0.16
(1,2597)	1:A:488:PRO:HG3	1:A:507:LEU:HD12	16	0.16
(1,2597)	1:A:488:PRO:HG3	1:A:507:LEU:HD13	16	0.16
(1,2597)	1:A:488:PRO:HG3	1:A:507:LEU:HD21	16	0.16
(1,2597)	1:A:488:PRO:HG3	1:A:507:LEU:HD22	16	0.16
(1,2597)	1:A:488:PRO:HG3	1:A:507:LEU:HD23	16	0.16
(1,2578)	1:A:485:CYS:HB3	1:A:486:VAL:H	2	0.16
(1,2576)	1:A:485:CYS:H	1:A:485:CYS:HB3	20	0.16
(1,2511)	1:A:468:GLN:HG3	1:A:468:GLN:HE21	7	0.16
(1,2511)	1:A:468:GLN:HG3	1:A:468:GLN:HE22	7	0.16
(1,2505)	1:A:468:GLN:H	1:A:468:GLN:HB3	19	0.16
(1,2496)	1:A:466:LEU:HB3	1:A:469:VAL:HG11	8	0.16
(1,2496)	1:A:466:LEU:HB3	1:A:469:VAL:HG12	8	0.16
(1,2496)	1:A:466:LEU:HB3	1:A:469:VAL:HG13	8	0.16
(1,2496)	1:A:466:LEU:HB3	1:A:469:VAL:HG21	8	0.16
(1,2496)	1:A:466:LEU:HB3	1:A:469:VAL:HG22	8	0.16
(1,2496)	1:A:466:LEU:HB3	1:A:469:VAL:HG23	8	0.16

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2496)	1:A:466:LEU:HB3	1:A:469:VAL:HG11	18	0.16
(1,2496)	1:A:466:LEU:HB3	1:A:469:VAL:HG12	18	0.16
(1,2496)	1:A:466:LEU:HB3	1:A:469:VAL:HG13	18	0.16
(1,2496)	1:A:466:LEU:HB3	1:A:469:VAL:HG21	18	0.16
(1,2496)	1:A:466:LEU:HB3	1:A:469:VAL:HG22	18	0.16
(1,2496)	1:A:466:LEU:HB3	1:A:469:VAL:HG23	18	0.16
(1,2477)	1:A:463:ARG:H	1:A:463:ARG:HG3	19	0.16
(1,2472)	1:A:458:SER:HB3	1:A:459:ASN:H	10	0.16
(1,2431)	1:A:453:ILE:HG21	1:A:453:ILE:HG13	16	0.16
(1,2431)	1:A:453:ILE:HG22	1:A:453:ILE:HG13	16	0.16
(1,2431)	1:A:453:ILE:HG23	1:A:453:ILE:HG13	16	0.16
(1,2431)	1:A:453:ILE:HG21	1:A:453:ILE:HG13	17	0.16
(1,2431)	1:A:453:ILE:HG22	1:A:453:ILE:HG13	17	0.16
(1,2431)	1:A:453:ILE:HG23	1:A:453:ILE:HG13	17	0.16
(1,2398)	1:A:443:GLN:HB3	1:A:446:ILE:HG21	8	0.16
(1,2398)	1:A:443:GLN:HB3	1:A:446:ILE:HG22	8	0.16
(1,2398)	1:A:443:GLN:HB3	1:A:446:ILE:HG23	8	0.16
(1,2353)	1:A:431:PHE:HB3	1:A:433:VAL:H	8	0.16
(1,2353)	1:A:431:PHE:HB3	1:A:433:VAL:H	20	0.16
(1,2342)	1:A:429:GLU:H	1:A:429:GLU:HG3	16	0.16
(1,2262)	1:A:415:LYS:HE3	1:A:520:PHE:HE1	16	0.16
(1,2262)	1:A:415:LYS:HE3	1:A:520:PHE:HE2	16	0.16
(1,2254)	1:A:414:GLU:HB3	1:A:414:GLU:HG3	5	0.16
(1,2214)	1:A:406:GLU:HG3	1:A:407:HIS:HA	1	0.16
(1,2188)	1:A:400:LEU:HB3	1:A:401:HIS:H	7	0.16
(1,2153)	1:A:395:TYR:HB3	1:A:424:GLY:HA2	12	0.16
(1,2153)	1:A:395:TYR:HB3	1:A:424:GLY:HA3	12	0.16
(1,2143)	1:A:393:LYS:HB3	1:A:393:LYS:HD3	1	0.16
(1,2141)	1:A:393:LYS:H	1:A:393:LYS:HG3	3	0.16
(1,2130)	1:A:387:GLU:HB3	1:A:390:SER:HA	3	0.16
(1,2127)	1:A:531:HIS:HE1	1:A:532:ARG:HD3	6	0.16
(1,2022)	1:A:505:SER:HA	1:A:505:SER:HB3	1	0.16
(1,2022)	1:A:505:SER:HA	1:A:505:SER:HB3	2	0.16
(1,2022)	1:A:505:SER:HA	1:A:505:SER:HB3	3	0.16
(1,2022)	1:A:505:SER:HA	1:A:505:SER:HB3	7	0.16
(1,2022)	1:A:505:SER:HA	1:A:505:SER:HB3	10	0.16
(1,2022)	1:A:505:SER:HA	1:A:505:SER:HB3	17	0.16
(1,2022)	1:A:505:SER:HA	1:A:505:SER:HB3	19	0.16
(1,2021)	1:A:505:SER:HB3	1:A:506:LEU:HG	13	0.16
(1,1964)	1:A:540:TRP:HA	1:A:541:ARG:HB3	18	0.16
(1,1927)	1:A:415:LYS:HA	1:A:415:LYS:HG3	2	0.16
(1,1927)	1:A:415:LYS:HA	1:A:415:LYS:HG3	4	0.16

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1927)	1:A:415:LYS:HA	1:A:415:LYS:HG3	11	0.16
(1,1927)	1:A:415:LYS:HA	1:A:415:LYS:HG3	13	0.16
(1,1927)	1:A:415:LYS:HA	1:A:415:LYS:HG3	18	0.16
(1,1888)	1:A:442:LEU:HA	1:A:442:LEU:HD21	6	0.16
(1,1888)	1:A:442:LEU:HA	1:A:442:LEU:HD22	6	0.16
(1,1888)	1:A:442:LEU:HA	1:A:442:LEU:HD23	6	0.16
(1,1853)	1:A:436:ARG:HA	1:A:436:ARG:HG3	19	0.16
(1,1850)	1:A:391:GLU:HA	1:A:391:GLU:HG3	18	0.16
(1,1850)	1:A:391:GLU:HA	1:A:391:GLU:HG3	19	0.16
(1,1765)	1:A:402:ALA:HA	1:A:403:ARG:HB3	9	0.16
(1,1730)	1:A:531:HIS:HD2	1:A:532:ARG:HD3	19	0.16
(1,1728)	1:A:532:ARG:HB3	1:A:532:ARG:HD3	17	0.16
(1,1723)	1:A:403:ARG:HD3	1:A:403:ARG:HH22	3	0.16
(1,1660)	1:A:518:GLN:HA	1:A:518:GLN:HG3	12	0.16
(1,164)	1:A:465:SER:H	1:A:466:LEU:HB3	9	0.16
(1,1636)	1:A:471:GLN:HA	1:A:474:MET:HB3	12	0.16
(1,1610)	1:A:394:PHE:HE1	1:A:537:LYS:HD3	7	0.16
(1,1610)	1:A:394:PHE:HE2	1:A:537:LYS:HD3	7	0.16
(1,1607)	1:A:537:LYS:HA	1:A:537:LYS:HD3	19	0.16
(1,1599)	1:A:393:LYS:HD3	1:A:395:TYR:HD1	6	0.16
(1,1599)	1:A:393:LYS:HD3	1:A:395:TYR:HD2	6	0.16
(1,1591)	1:A:531:HIS:HA	1:A:534:GLN:HB3	6	0.16
(1,1591)	1:A:531:HIS:HA	1:A:534:GLN:HB3	18	0.16
(1,1591)	1:A:531:HIS:HA	1:A:534:GLN:HB3	20	0.16
(1,1572)	1:A:479:ARG:HG3	1:A:480:GLN:H	15	0.16
(1,1571)	1:A:479:ARG:H	1:A:479:ARG:HG3	20	0.16
(1,1136)	1:A:473:MET:HE1	1:A:482:SER:HB3	2	0.16
(1,1136)	1:A:473:MET:HE2	1:A:482:SER:HB3	2	0.16
(1,1136)	1:A:473:MET:HE3	1:A:482:SER:HB3	2	0.16
(1,1136)	1:A:473:MET:HE1	1:A:482:SER:HB3	10	0.16
(1,1136)	1:A:473:MET:HE2	1:A:482:SER:HB3	10	0.16
(1,1136)	1:A:473:MET:HE3	1:A:482:SER:HB3	10	0.16
(1,1136)	1:A:473:MET:HE1	1:A:482:SER:HB3	13	0.16
(1,1136)	1:A:473:MET:HE2	1:A:482:SER:HB3	13	0.16
(1,1136)	1:A:473:MET:HE3	1:A:482:SER:HB3	13	0.16
(1,910)	1:A:417:GLU:HG3	1:A:418:ALA:H	9	0.15
(1,559)	1:A:463:ARG:HB3	1:A:463:ARG:HE	19	0.15
(1,555)	1:A:542:LYS:H	1:A:542:LYS:HE3	7	0.15
(1,553)	1:A:541:ARG:HB3	1:A:542:LYS:H	20	0.15
(1,543)	1:A:462:CYS:HB3	1:A:463:ARG:H	12	0.15
(1,535)	1:A:542:LYS:HB3	1:A:543:GLU:H	11	0.15
(1,511)	1:A:403:ARG:HD3	1:A:404:ALA:H	10	0.15

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,421)	1:A:466:LEU:HB3	1:A:468:GLN:H	10	0.15
(1,2837)	1:A:542:LYS:HA	1:A:542:LYS:HG3	6	0.15
(1,2822)	1:A:534:GLN:HG3	1:A:534:GLN:HE22	3	0.15
(1,2822)	1:A:534:GLN:HG3	1:A:534:GLN:HE22	12	0.15
(1,2808)	1:A:529:LYS:HB3	1:A:531:HIS:HE1	16	0.15
(1,2804)	1:A:529:LYS:HA	1:A:530:PRO:HG3	11	0.15
(1,2758)	1:A:515:GLU:HG3	1:A:520:PHE:HE1	4	0.15
(1,2758)	1:A:515:GLU:HG3	1:A:520:PHE:HE2	4	0.15
(1,2757)	1:A:515:GLU:HG3	1:A:516:HIS:H	11	0.15
(1,2714)	1:A:511:VAL:HG11	1:A:513:LEU:HB3	19	0.15
(1,2714)	1:A:511:VAL:HG12	1:A:513:LEU:HB3	19	0.15
(1,2714)	1:A:511:VAL:HG13	1:A:513:LEU:HB3	19	0.15
(1,2714)	1:A:511:VAL:HG21	1:A:513:LEU:HB3	19	0.15
(1,2714)	1:A:511:VAL:HG22	1:A:513:LEU:HB3	19	0.15
(1,2714)	1:A:511:VAL:HG23	1:A:513:LEU:HB3	19	0.15
(1,2710)	1:A:511:VAL:HA	1:A:512:ARG:HB3	18	0.15
(1,2700)	1:A:509:GLY:H	1:A:510:LEU:HB3	15	0.15
(1,2697)	1:A:507:LEU:HB3	1:A:508:SER:H	20	0.15
(1,2682)	1:A:500:SER:HB3	1:A:501:SER:H	5	0.15
(1,2682)	1:A:500:SER:HB3	1:A:501:SER:H	14	0.15
(1,2682)	1:A:500:SER:HB3	1:A:501:SER:H	15	0.15
(1,2680)	1:A:499:LEU:HB3	1:A:500:SER:HB3	7	0.15
(1,2679)	1:A:498:GLN:HG3	1:A:499:LEU:H	15	0.15
(1,2674)	1:A:496:PRO:HD3	1:A:516:HIS:HE1	13	0.15
(1,2655)	1:A:493:GLU:H	1:A:493:GLU:HG3	4	0.15
(1,2655)	1:A:493:GLU:H	1:A:493:GLU:HG3	16	0.15
(1,2654)	1:A:493:GLU:H	1:A:493:GLU:HB3	8	0.15
(1,2654)	1:A:493:GLU:H	1:A:493:GLU:HB3	10	0.15
(1,2654)	1:A:493:GLU:H	1:A:493:GLU:HB3	16	0.15
(1,265)	1:A:482:SER:H	1:A:482:SER:HB3	15	0.15
(1,2599)	1:A:488:PRO:HD3	1:A:510:LEU:HG	2	0.15
(1,2599)	1:A:488:PRO:HD3	1:A:510:LEU:HG	17	0.15
(1,2578)	1:A:485:CYS:HB3	1:A:486:VAL:H	3	0.15
(1,2578)	1:A:485:CYS:HB3	1:A:486:VAL:H	5	0.15
(1,2578)	1:A:485:CYS:HB3	1:A:486:VAL:H	9	0.15
(1,2561)	1:A:480:GLN:HB3	1:A:482:SER:H	20	0.15
(1,2558)	1:A:480:GLN:H	1:A:480:GLN:HB3	15	0.15
(1,2545)	1:A:476:ASN:HB3	1:A:476:ASN:HD21	9	0.15
(1,2545)	1:A:476:ASN:HB3	1:A:476:ASN:HD22	9	0.15
(1,2508)	1:A:468:GLN:HA	1:A:468:GLN:HG3	12	0.15
(1,2499)	1:A:466:LEU:HD11	1:A:467:HIS:HB3	2	0.15
(1,2499)	1:A:466:LEU:HD12	1:A:467:HIS:HB3	2	0.15

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2499)	1:A:466:LEU:HD13	1:A:467:HIS:HB3	2	0.15
(1,2499)	1:A:466:LEU:HD21	1:A:467:HIS:HB3	2	0.15
(1,2499)	1:A:466:LEU:HD22	1:A:467:HIS:HB3	2	0.15
(1,2499)	1:A:466:LEU:HD23	1:A:467:HIS:HB3	2	0.15
(1,249)	1:A:407:HIS:HB3	1:A:410:LEU:H	1	0.15
(1,249)	1:A:407:HIS:HB3	1:A:410:LEU:H	20	0.15
(1,2472)	1:A:458:SER:HB3	1:A:459:ASN:H	4	0.15
(1,2432)	1:A:453:ILE:HG13	1:A:454:LEU:H	3	0.15
(1,2431)	1:A:453:ILE:HG21	1:A:453:ILE:HG13	6	0.15
(1,2431)	1:A:453:ILE:HG22	1:A:453:ILE:HG13	6	0.15
(1,2431)	1:A:453:ILE:HG23	1:A:453:ILE:HG13	6	0.15
(1,2431)	1:A:453:ILE:HG21	1:A:453:ILE:HG13	12	0.15
(1,2431)	1:A:453:ILE:HG22	1:A:453:ILE:HG13	12	0.15
(1,2431)	1:A:453:ILE:HG23	1:A:453:ILE:HG13	12	0.15
(1,2431)	1:A:453:ILE:HG21	1:A:453:ILE:HG13	13	0.15
(1,2431)	1:A:453:ILE:HG22	1:A:453:ILE:HG13	13	0.15
(1,2431)	1:A:453:ILE:HG23	1:A:453:ILE:HG13	13	0.15
(1,2431)	1:A:453:ILE:HG21	1:A:453:ILE:HG13	18	0.15
(1,2431)	1:A:453:ILE:HG22	1:A:453:ILE:HG13	18	0.15
(1,2431)	1:A:453:ILE:HG23	1:A:453:ILE:HG13	18	0.15
(1,2417)	1:A:448:HIS:H	1:A:448:HIS:HB3	15	0.15
(1,2365)	1:A:434:HIS:H	1:A:434:HIS:HB3	12	0.15
(1,2350)	1:A:431:PHE:HA	1:A:432:GLN:HB3	17	0.15
(1,2252)	1:A:414:GLU:H	1:A:423:ASP:HB3	12	0.15
(1,2252)	1:A:414:GLU:H	1:A:423:ASP:HB3	14	0.15
(1,2211)	1:A:406:GLU:HB3	1:A:409:ALA:HB1	15	0.15
(1,2211)	1:A:406:GLU:HB3	1:A:409:ALA:HB2	15	0.15
(1,2211)	1:A:406:GLU:HB3	1:A:409:ALA:HB3	15	0.15
(1,2184)	1:A:400:LEU:H	1:A:400:LEU:HB3	1	0.15
(1,2179)	1:A:398:VAL:HG11	1:A:449:SER:HB3	4	0.15
(1,2179)	1:A:398:VAL:HG12	1:A:449:SER:HB3	4	0.15
(1,2179)	1:A:398:VAL:HG13	1:A:449:SER:HB3	4	0.15
(1,2179)	1:A:398:VAL:HG21	1:A:449:SER:HB3	4	0.15
(1,2179)	1:A:398:VAL:HG22	1:A:449:SER:HB3	4	0.15
(1,2179)	1:A:398:VAL:HG23	1:A:449:SER:HB3	4	0.15
(1,2175)	1:A:398:VAL:HG11	1:A:427:PHE:HB3	20	0.15
(1,2175)	1:A:398:VAL:HG12	1:A:427:PHE:HB3	20	0.15
(1,2175)	1:A:398:VAL:HG13	1:A:427:PHE:HB3	20	0.15
(1,2175)	1:A:398:VAL:HG21	1:A:427:PHE:HB3	20	0.15
(1,2175)	1:A:398:VAL:HG22	1:A:427:PHE:HB3	20	0.15
(1,2175)	1:A:398:VAL:HG23	1:A:427:PHE:HB3	20	0.15
(1,2164)	1:A:397:PHE:HB3	1:A:453:ILE:HG13	7	0.15

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2153)	1:A:395:TYR:HB3	1:A:424:GLY:HA2	16	0.15
(1,2153)	1:A:395:TYR:HB3	1:A:424:GLY:HA3	16	0.15
(1,2130)	1:A:387:GLU:HB3	1:A:390:SER:HA	12	0.15
(1,2118)	1:A:407:HIS:HB3	1:A:407:HIS:HE1	16	0.15
(1,2083)	1:A:540:TRP:HB3	1:A:540:TRP:HD1	6	0.15
(1,2022)	1:A:505:SER:HA	1:A:505:SER:HB3	6	0.15
(1,2022)	1:A:505:SER:HA	1:A:505:SER:HB3	8	0.15
(1,2019)	1:A:505:SER:HB3	1:A:506:LEU:HD21	14	0.15
(1,2019)	1:A:505:SER:HB3	1:A:506:LEU:HD22	14	0.15
(1,2019)	1:A:505:SER:HB3	1:A:506:LEU:HD23	14	0.15
(1,1927)	1:A:415:LYS:HA	1:A:415:LYS:HG3	3	0.15
(1,1927)	1:A:415:LYS:HA	1:A:415:LYS:HG3	5	0.15
(1,1927)	1:A:415:LYS:HA	1:A:415:LYS:HG3	6	0.15
(1,1927)	1:A:415:LYS:HA	1:A:415:LYS:HG3	9	0.15
(1,1927)	1:A:415:LYS:HA	1:A:415:LYS:HG3	20	0.15
(1,186)	1:A:507:LEU:H	1:A:508:SER:HB3	8	0.15
(1,186)	1:A:507:LEU:H	1:A:508:SER:HB3	14	0.15
(1,1853)	1:A:436:ARG:HA	1:A:436:ARG:HG3	16	0.15
(1,1850)	1:A:391:GLU:HA	1:A:391:GLU:HG3	1	0.15
(1,1850)	1:A:391:GLU:HA	1:A:391:GLU:HG3	3	0.15
(1,1768)	1:A:461:ASP:HA	1:A:462:CYS:HB3	15	0.15
(1,175)	1:A:474:MET:HB3	1:A:475:SER:H	7	0.15
(1,1729)	1:A:532:ARG:HA	1:A:532:ARG:HD3	12	0.15
(1,1728)	1:A:532:ARG:HB3	1:A:532:ARG:HD3	14	0.15
(1,1572)	1:A:479:ARG:HG3	1:A:480:GLN:H	18	0.15
(1,1540)	1:A:490:LEU:HD11	1:A:512:ARG:HD3	20	0.15
(1,1540)	1:A:490:LEU:HD12	1:A:512:ARG:HD3	20	0.15
(1,1540)	1:A:490:LEU:HD13	1:A:512:ARG:HD3	20	0.15
(1,137)	1:A:522:ARG:HB3	1:A:526:ASN:H	19	0.15
(1,98)	1:A:417:GLU:HG3	1:A:423:ASP:H	7	0.14
(1,947)	1:A:462:CYS:H	1:A:462:CYS:HB3	18	0.14
(1,910)	1:A:417:GLU:HG3	1:A:418:ALA:H	4	0.14
(1,829)	1:A:534:GLN:HB3	1:A:535:ALA:H	6	0.14
(1,756)	1:A:479:ARG:H	1:A:479:ARG:HD3	3	0.14
(1,691)	1:A:432:GLN:H	1:A:432:GLN:HG3	17	0.14
(1,676)	1:A:436:ARG:H	1:A:436:ARG:HG3	9	0.14
(1,561)	1:A:543:GLU:HB3	1:A:545:ASP:H	17	0.14
(1,555)	1:A:542:LYS:H	1:A:542:LYS:HE3	19	0.14
(1,553)	1:A:541:ARG:HB3	1:A:542:LYS:H	5	0.14
(1,523)	1:A:529:LYS:H	1:A:529:LYS:HE3	13	0.14
(1,34)	1:A:466:LEU:HB3	1:A:470:ASN:HD22	13	0.14
(1,34)	1:A:466:LEU:HB3	1:A:470:ASN:HD21	13	0.14

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,338)	1:A:503:THR:H	1:A:505:SER:HB3	12	0.14
(1,2831)	1:A:539:MET:HG3	1:A:540:TRP:H	1	0.14
(1,2822)	1:A:534:GLN:HG3	1:A:534:GLN:HE22	4	0.14
(1,2822)	1:A:534:GLN:HG3	1:A:534:GLN:HE22	8	0.14
(1,2822)	1:A:534:GLN:HG3	1:A:534:GLN:HE22	14	0.14
(1,2822)	1:A:534:GLN:HG3	1:A:534:GLN:HE22	15	0.14
(1,2812)	1:A:531:HIS:HA	1:A:534:GLN:HG3	18	0.14
(1,2810)	1:A:530:PRO:HA	1:A:533:LEU:HB3	2	0.14
(1,2804)	1:A:529:LYS:HA	1:A:530:PRO:HG3	9	0.14
(1,2804)	1:A:529:LYS:HA	1:A:530:PRO:HG3	13	0.14
(1,2783)	1:A:523:LYS:HG3	1:A:523:LYS:HE3	18	0.14
(1,2757)	1:A:515:GLU:HG3	1:A:516:HIS:H	1	0.14
(1,2732)	1:A:513:LEU:HB3	1:A:520:PHE:HD1	7	0.14
(1,2732)	1:A:513:LEU:HB3	1:A:520:PHE:HD2	7	0.14
(1,2723)	1:A:512:ARG:HB3	1:A:512:ARG:HD3	3	0.14
(1,2699)	1:A:507:LEU:HD11	1:A:512:ARG:HD3	7	0.14
(1,2699)	1:A:507:LEU:HD12	1:A:512:ARG:HD3	7	0.14
(1,2699)	1:A:507:LEU:HD13	1:A:512:ARG:HD3	7	0.14
(1,2699)	1:A:507:LEU:HD21	1:A:512:ARG:HD3	7	0.14
(1,2699)	1:A:507:LEU:HD22	1:A:512:ARG:HD3	7	0.14
(1,2699)	1:A:507:LEU:HD23	1:A:512:ARG:HD3	7	0.14
(1,2693)	1:A:507:LEU:H	1:A:507:LEU:HB3	4	0.14
(1,2682)	1:A:500:SER:HB3	1:A:501:SER:H	4	0.14
(1,2682)	1:A:500:SER:HB3	1:A:501:SER:H	11	0.14
(1,2680)	1:A:499:LEU:HB3	1:A:500:SER:HB3	11	0.14
(1,2679)	1:A:498:GLN:HG3	1:A:499:LEU:H	18	0.14
(1,2669)	1:A:495:SER:HB3	1:A:498:GLN:HB3	9	0.14
(1,2655)	1:A:493:GLU:H	1:A:493:GLU:HG3	5	0.14
(1,2654)	1:A:493:GLU:H	1:A:493:GLU:HB3	1	0.14
(1,2654)	1:A:493:GLU:H	1:A:493:GLU:HB3	12	0.14
(1,2654)	1:A:493:GLU:H	1:A:493:GLU:HB3	15	0.14
(1,2654)	1:A:493:GLU:H	1:A:493:GLU:HB3	20	0.14
(1,2648)	1:A:492:LEU:HD11	1:A:515:GLU:HG3	16	0.14
(1,2648)	1:A:492:LEU:HD12	1:A:515:GLU:HG3	16	0.14
(1,2648)	1:A:492:LEU:HD13	1:A:515:GLU:HG3	16	0.14
(1,2648)	1:A:492:LEU:HD21	1:A:515:GLU:HG3	16	0.14
(1,2648)	1:A:492:LEU:HD22	1:A:515:GLU:HG3	16	0.14
(1,2648)	1:A:492:LEU:HD23	1:A:515:GLU:HG3	16	0.14
(1,2641)	1:A:492:LEU:HB3	1:A:493:GLU:H	7	0.14
(1,2624)	1:A:490:LEU:HD11	1:A:514:ASP:HB3	5	0.14
(1,2624)	1:A:490:LEU:HD12	1:A:514:ASP:HB3	5	0.14
(1,2624)	1:A:490:LEU:HD13	1:A:514:ASP:HB3	5	0.14

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2624)	1:A:490:LEU:HD21	1:A:514:ASP:HB3	5	0.14
(1,2624)	1:A:490:LEU:HD22	1:A:514:ASP:HB3	5	0.14
(1,2624)	1:A:490:LEU:HD23	1:A:514:ASP:HB3	5	0.14
(1,2599)	1:A:488:PRO:HD3	1:A:510:LEU:HG	13	0.14
(1,2576)	1:A:485:CYS:H	1:A:485:CYS:HB3	12	0.14
(1,2569)	1:A:483:PRO:HB3	1:A:485:CYS:H	13	0.14
(1,2565)	1:A:482:SER:H	1:A:483:PRO:HD3	8	0.14
(1,2565)	1:A:482:SER:H	1:A:483:PRO:HD3	18	0.14
(1,2561)	1:A:480:GLN:HB3	1:A:482:SER:H	5	0.14
(1,2558)	1:A:480:GLN:H	1:A:480:GLN:HB3	8	0.14
(1,2555)	1:A:479:ARG:HB3	1:A:479:ARG:HD3	9	0.14
(1,2547)	1:A:476:ASN:HB3	1:A:480:GLN:H	8	0.14
(1,2546)	1:A:476:ASN:HB3	1:A:479:ARG:HG3	18	0.14
(1,2545)	1:A:476:ASN:HB3	1:A:476:ASN:HD21	3	0.14
(1,2545)	1:A:476:ASN:HB3	1:A:476:ASN:HD22	3	0.14
(1,2530)	1:A:472:ALA:HA	1:A:475:SER:HB3	10	0.14
(1,2529)	1:A:471:GLN:HG3	1:A:472:ALA:H	19	0.14
(1,2518)	1:A:469:VAL:HG11	1:A:473:MET:HG3	10	0.14
(1,2518)	1:A:469:VAL:HG12	1:A:473:MET:HG3	10	0.14
(1,2518)	1:A:469:VAL:HG13	1:A:473:MET:HG3	10	0.14
(1,2518)	1:A:469:VAL:HG21	1:A:473:MET:HG3	10	0.14
(1,2518)	1:A:469:VAL:HG22	1:A:473:MET:HG3	10	0.14
(1,2518)	1:A:469:VAL:HG23	1:A:473:MET:HG3	10	0.14
(1,2505)	1:A:468:GLN:H	1:A:468:GLN:HB3	2	0.14
(1,2505)	1:A:468:GLN:H	1:A:468:GLN:HB3	10	0.14
(1,2503)	1:A:467:HIS:HB3	1:A:467:HIS:HD2	1	0.14
(1,2495)	1:A:466:LEU:HB3	1:A:467:HIS:HB3	16	0.14
(1,2485)	1:A:464:LEU:HD11	1:A:467:HIS:HB3	3	0.14
(1,2485)	1:A:464:LEU:HD12	1:A:467:HIS:HB3	3	0.14
(1,2485)	1:A:464:LEU:HD13	1:A:467:HIS:HB3	3	0.14
(1,2485)	1:A:464:LEU:HD11	1:A:467:HIS:HB3	6	0.14
(1,2485)	1:A:464:LEU:HD12	1:A:467:HIS:HB3	6	0.14
(1,2485)	1:A:464:LEU:HD13	1:A:467:HIS:HB3	6	0.14
(1,2485)	1:A:464:LEU:HD11	1:A:467:HIS:HB3	16	0.14
(1,2485)	1:A:464:LEU:HD12	1:A:467:HIS:HB3	16	0.14
(1,2485)	1:A:464:LEU:HD13	1:A:467:HIS:HB3	16	0.14
(1,2485)	1:A:464:LEU:HD11	1:A:467:HIS:HB3	20	0.14
(1,2485)	1:A:464:LEU:HD12	1:A:467:HIS:HB3	20	0.14
(1,2485)	1:A:464:LEU:HD13	1:A:467:HIS:HB3	20	0.14
(1,2432)	1:A:453:ILE:HG13	1:A:454:LEU:H	5	0.14
(1,2432)	1:A:453:ILE:HG13	1:A:454:LEU:H	9	0.14
(1,2431)	1:A:453:ILE:HG21	1:A:453:ILE:HG13	1	0.14

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2431)	1:A:453:ILE:HG22	1:A:453:ILE:HG13	1	0.14
(1,2431)	1:A:453:ILE:HG23	1:A:453:ILE:HG13	1	0.14
(1,2431)	1:A:453:ILE:HG21	1:A:453:ILE:HG13	2	0.14
(1,2431)	1:A:453:ILE:HG22	1:A:453:ILE:HG13	2	0.14
(1,2431)	1:A:453:ILE:HG23	1:A:453:ILE:HG13	2	0.14
(1,2431)	1:A:453:ILE:HG21	1:A:453:ILE:HG13	3	0.14
(1,2431)	1:A:453:ILE:HG22	1:A:453:ILE:HG13	3	0.14
(1,2431)	1:A:453:ILE:HG23	1:A:453:ILE:HG13	3	0.14
(1,2431)	1:A:453:ILE:HG21	1:A:453:ILE:HG13	4	0.14
(1,2431)	1:A:453:ILE:HG22	1:A:453:ILE:HG13	4	0.14
(1,2431)	1:A:453:ILE:HG23	1:A:453:ILE:HG13	4	0.14
(1,2431)	1:A:453:ILE:HG21	1:A:453:ILE:HG13	5	0.14
(1,2431)	1:A:453:ILE:HG22	1:A:453:ILE:HG13	5	0.14
(1,2431)	1:A:453:ILE:HG23	1:A:453:ILE:HG13	5	0.14
(1,2431)	1:A:453:ILE:HG21	1:A:453:ILE:HG13	9	0.14
(1,2431)	1:A:453:ILE:HG22	1:A:453:ILE:HG13	9	0.14
(1,2431)	1:A:453:ILE:HG23	1:A:453:ILE:HG13	9	0.14
(1,2431)	1:A:453:ILE:HG21	1:A:453:ILE:HG13	10	0.14
(1,2431)	1:A:453:ILE:HG22	1:A:453:ILE:HG13	10	0.14
(1,2431)	1:A:453:ILE:HG23	1:A:453:ILE:HG13	10	0.14
(1,2431)	1:A:453:ILE:HG21	1:A:453:ILE:HG13	11	0.14
(1,2431)	1:A:453:ILE:HG22	1:A:453:ILE:HG13	11	0.14
(1,2431)	1:A:453:ILE:HG23	1:A:453:ILE:HG13	11	0.14
(1,2431)	1:A:453:ILE:HG21	1:A:453:ILE:HG13	20	0.14
(1,2431)	1:A:453:ILE:HG22	1:A:453:ILE:HG13	20	0.14
(1,2431)	1:A:453:ILE:HG23	1:A:453:ILE:HG13	20	0.14
(1,2418)	1:A:448:HIS:HB3	1:A:449:SER:H	8	0.14
(1,2410)	1:A:446:ILE:HG13	1:A:447:ASP:H	9	0.14
(1,238)	1:A:492:LEU:HG	1:A:493:GLU:H	18	0.14
(1,2357)	1:A:432:GLN:HB3	1:A:433:VAL:H	14	0.14
(1,2336)	1:A:423:ASP:HB3	1:A:424:GLY:H	12	0.14
(1,2318)	1:A:421:VAL:H	1:A:422:PRO:HD3	8	0.14
(1,2318)	1:A:421:VAL:H	1:A:422:PRO:HD3	10	0.14
(1,2211)	1:A:406:GLU:HB3	1:A:409:ALA:HB1	5	0.14
(1,2211)	1:A:406:GLU:HB3	1:A:409:ALA:HB2	5	0.14
(1,2211)	1:A:406:GLU:HB3	1:A:409:ALA:HB3	5	0.14
(1,2211)	1:A:406:GLU:HB3	1:A:409:ALA:HB1	19	0.14
(1,2211)	1:A:406:GLU:HB3	1:A:409:ALA:HB2	19	0.14
(1,2211)	1:A:406:GLU:HB3	1:A:409:ALA:HB3	19	0.14
(1,2184)	1:A:400:LEU:H	1:A:400:LEU:HB3	6	0.14
(1,2184)	1:A:400:LEU:H	1:A:400:LEU:HB3	16	0.14
(1,2148)	1:A:395:TYR:HA	1:A:396:ASN:HB3	10	0.14

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2141)	1:A:393:LYS:H	1:A:393:LYS:HG3	1	0.14
(1,2141)	1:A:393:LYS:H	1:A:393:LYS:HG3	12	0.14
(1,2083)	1:A:540:TRP:HB3	1:A:540:TRP:HD1	17	0.14
(1,2022)	1:A:505:SER:HA	1:A:505:SER:HB3	5	0.14
(1,2022)	1:A:505:SER:HA	1:A:505:SER:HB3	12	0.14
(1,2022)	1:A:505:SER:HA	1:A:505:SER:HB3	16	0.14
(1,1927)	1:A:415:LYS:HA	1:A:415:LYS:HG3	7	0.14
(1,1927)	1:A:415:LYS:HA	1:A:415:LYS:HG3	10	0.14
(1,1927)	1:A:415:LYS:HA	1:A:415:LYS:HG3	12	0.14
(1,1927)	1:A:415:LYS:HA	1:A:415:LYS:HG3	19	0.14
(1,1881)	1:A:536:ARG:HA	1:A:536:ARG:HD3	20	0.14
(1,186)	1:A:507:LEU:H	1:A:508:SER:HB3	11	0.14
(1,1850)	1:A:391:GLU:HA	1:A:391:GLU:HG3	15	0.14
(1,1740)	1:A:436:ARG:HA	1:A:436:ARG:HD3	2	0.14
(1,1728)	1:A:532:ARG:HB3	1:A:532:ARG:HD3	16	0.14
(1,1723)	1:A:403:ARG:HD3	1:A:403:ARG:HH22	20	0.14
(1,1708)	1:A:542:LYS:HD3	1:A:542:LYS:HE3	7	0.14
(1,1705)	1:A:393:LYS:HE3	1:A:395:TYR:HE1	15	0.14
(1,1705)	1:A:393:LYS:HE3	1:A:395:TYR:HE2	15	0.14
(1,1701)	1:A:393:LYS:HG3	1:A:393:LYS:HE3	3	0.14
(1,1669)	1:A:438:GLU:HB3	1:A:438:GLU:HG3	1	0.14
(1,166)	1:A:465:SER:H	1:A:465:SER:HB3	17	0.14
(1,1636)	1:A:471:GLN:HA	1:A:474:MET:HB3	13	0.14
(1,1603)	1:A:536:ARG:HB3	1:A:537:LYS:H	18	0.14
(1,1574)	1:A:407:HIS:HB3	1:A:408:ILE:HG13	10	0.14
(1,1572)	1:A:479:ARG:HG3	1:A:480:GLN:H	6	0.14
(1,1572)	1:A:479:ARG:HG3	1:A:480:GLN:H	8	0.14
(1,1473)	1:A:466:LEU:HB3	1:A:466:LEU:HD11	11	0.14
(1,1473)	1:A:466:LEU:HB3	1:A:466:LEU:HD12	11	0.14
(1,1473)	1:A:466:LEU:HB3	1:A:466:LEU:HD13	11	0.14
(1,137)	1:A:522:ARG:HB3	1:A:526:ASN:H	11	0.14
(1,1235)	1:A:450:ALA:HB1	1:A:536:ARG:HD3	4	0.14
(1,1235)	1:A:450:ALA:HB2	1:A:536:ARG:HD3	4	0.14
(1,1235)	1:A:450:ALA:HB3	1:A:536:ARG:HD3	4	0.14
(1,1136)	1:A:473:MET:HE1	1:A:482:SER:HB3	1	0.14
(1,1136)	1:A:473:MET:HE2	1:A:482:SER:HB3	1	0.14
(1,1136)	1:A:473:MET:HE3	1:A:482:SER:HB3	1	0.14
(1,910)	1:A:417:GLU:HG3	1:A:418:ALA:H	15	0.13
(1,900)	1:A:449:SER:HB3	1:A:450:ALA:H	12	0.13
(1,829)	1:A:534:GLN:HB3	1:A:535:ALA:H	13	0.13
(1,829)	1:A:534:GLN:HB3	1:A:535:ALA:H	17	0.13
(1,806)	1:A:434:HIS:H	1:A:438:GLU:HG3	10	0.13

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,80)	1:A:515:GLU:HB3	1:A:517:SER:H	17	0.13
(1,786)	1:A:471:GLN:HB3	1:A:472:ALA:H	6	0.13
(1,756)	1:A:479:ARG:H	1:A:479:ARG:HD3	7	0.13
(1,756)	1:A:479:ARG:H	1:A:479:ARG:HD3	20	0.13
(1,699)	1:A:541:ARG:HB3	1:A:541:ARG:HE	5	0.13
(1,653)	1:A:479:ARG:HD3	1:A:480:GLN:H	11	0.13
(1,653)	1:A:479:ARG:HD3	1:A:480:GLN:H	16	0.13
(1,555)	1:A:542:LYS:H	1:A:542:LYS:HE3	10	0.13
(1,553)	1:A:541:ARG:HB3	1:A:542:LYS:H	8	0.13
(1,543)	1:A:462:CYS:HB3	1:A:463:ARG:H	6	0.13
(1,2847)	1:A:544:GLN:HG3	1:A:544:GLN:HE21	14	0.13
(1,2847)	1:A:544:GLN:HG3	1:A:544:GLN:HE22	14	0.13
(1,2822)	1:A:534:GLN:HG3	1:A:534:GLN:HE22	1	0.13
(1,2804)	1:A:529:LYS:HA	1:A:530:PRO:HG3	4	0.13
(1,2804)	1:A:529:LYS:HA	1:A:530:PRO:HG3	6	0.13
(1,2804)	1:A:529:LYS:HA	1:A:530:PRO:HG3	8	0.13
(1,2804)	1:A:529:LYS:HA	1:A:530:PRO:HG3	15	0.13
(1,2758)	1:A:515:GLU:HG3	1:A:520:PHE:HE1	1	0.13
(1,2758)	1:A:515:GLU:HG3	1:A:520:PHE:HE2	1	0.13
(1,2758)	1:A:515:GLU:HG3	1:A:520:PHE:HE1	7	0.13
(1,2758)	1:A:515:GLU:HG3	1:A:520:PHE:HE2	7	0.13
(1,2725)	1:A:512:ARG:HB3	1:A:513:LEU:H	18	0.13
(1,2679)	1:A:498:GLN:HG3	1:A:499:LEU:H	9	0.13
(1,2679)	1:A:498:GLN:HG3	1:A:499:LEU:H	10	0.13
(1,2654)	1:A:493:GLU:H	1:A:493:GLU:HB3	2	0.13
(1,2654)	1:A:493:GLU:H	1:A:493:GLU:HB3	3	0.13
(1,2654)	1:A:493:GLU:H	1:A:493:GLU:HB3	9	0.13
(1,2576)	1:A:485:CYS:H	1:A:485:CYS:HB3	8	0.13
(1,2565)	1:A:482:SER:H	1:A:483:PRO:HD3	10	0.13
(1,2565)	1:A:482:SER:H	1:A:483:PRO:HD3	17	0.13
(1,2555)	1:A:479:ARG:HB3	1:A:479:ARG:HD3	18	0.13
(1,2537)	1:A:473:MET:HG3	1:A:474:MET:H	4	0.13
(1,2505)	1:A:468:GLN:H	1:A:468:GLN:HB3	14	0.13
(1,2496)	1:A:466:LEU:HB3	1:A:469:VAL:HG11	20	0.13
(1,2496)	1:A:466:LEU:HB3	1:A:469:VAL:HG12	20	0.13
(1,2496)	1:A:466:LEU:HB3	1:A:469:VAL:HG13	20	0.13
(1,2496)	1:A:466:LEU:HB3	1:A:469:VAL:HG21	20	0.13
(1,2496)	1:A:466:LEU:HB3	1:A:469:VAL:HG22	20	0.13
(1,2496)	1:A:466:LEU:HB3	1:A:469:VAL:HG23	20	0.13
(1,2493)	1:A:466:LEU:HA	1:A:466:LEU:HD11	10	0.13
(1,2493)	1:A:466:LEU:HA	1:A:466:LEU:HD12	10	0.13
(1,2493)	1:A:466:LEU:HA	1:A:466:LEU:HD13	10	0.13

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2493)	1:A:466:LEU:HA	1:A:466:LEU:HD21	10	0.13
(1,2493)	1:A:466:LEU:HA	1:A:466:LEU:HD22	10	0.13
(1,2493)	1:A:466:LEU:HA	1:A:466:LEU:HD23	10	0.13
(1,2485)	1:A:464:LEU:HD11	1:A:467:HIS:HB3	13	0.13
(1,2485)	1:A:464:LEU:HD12	1:A:467:HIS:HB3	13	0.13
(1,2485)	1:A:464:LEU:HD13	1:A:467:HIS:HB3	13	0.13
(1,2432)	1:A:453:ILE:HG13	1:A:454:LEU:H	1	0.13
(1,2408)	1:A:446:ILE:HG21	1:A:446:ILE:HG13	20	0.13
(1,2408)	1:A:446:ILE:HG22	1:A:446:ILE:HG13	20	0.13
(1,2408)	1:A:446:ILE:HG23	1:A:446:ILE:HG13	20	0.13
(1,2405)	1:A:444:ASP:H	1:A:444:ASP:HB3	13	0.13
(1,2399)	1:A:443:GLN:HG3	1:A:443:GLN:HE21	11	0.13
(1,2399)	1:A:443:GLN:HG3	1:A:443:GLN:HE22	11	0.13
(1,2398)	1:A:443:GLN:HB3	1:A:446:ILE:HG21	16	0.13
(1,2398)	1:A:443:GLN:HB3	1:A:446:ILE:HG22	16	0.13
(1,2398)	1:A:443:GLN:HB3	1:A:446:ILE:HG23	16	0.13
(1,2398)	1:A:443:GLN:HB3	1:A:446:ILE:HG21	18	0.13
(1,2398)	1:A:443:GLN:HB3	1:A:446:ILE:HG22	18	0.13
(1,2398)	1:A:443:GLN:HB3	1:A:446:ILE:HG23	18	0.13
(1,2371)	1:A:436:ARG:HB3	1:A:436:ARG:HG3	9	0.13
(1,2371)	1:A:436:ARG:HB3	1:A:436:ARG:HG3	19	0.13
(1,2343)	1:A:429:GLU:HG3	1:A:430:ASP:H	10	0.13
(1,2211)	1:A:406:GLU:HB3	1:A:409:ALA:HB1	3	0.13
(1,2211)	1:A:406:GLU:HB3	1:A:409:ALA:HB2	3	0.13
(1,2211)	1:A:406:GLU:HB3	1:A:409:ALA:HB3	3	0.13
(1,2200)	1:A:402:ALA:HB1	1:A:460:PHE:HB3	10	0.13
(1,2200)	1:A:402:ALA:HB2	1:A:460:PHE:HB3	10	0.13
(1,2200)	1:A:402:ALA:HB3	1:A:460:PHE:HB3	10	0.13
(1,2179)	1:A:398:VAL:HG11	1:A:449:SER:HB3	13	0.13
(1,2179)	1:A:398:VAL:HG12	1:A:449:SER:HB3	13	0.13
(1,2179)	1:A:398:VAL:HG13	1:A:449:SER:HB3	13	0.13
(1,2179)	1:A:398:VAL:HG21	1:A:449:SER:HB3	13	0.13
(1,2179)	1:A:398:VAL:HG22	1:A:449:SER:HB3	13	0.13
(1,2179)	1:A:398:VAL:HG23	1:A:449:SER:HB3	13	0.13
(1,2161)	1:A:397:PHE:HB3	1:A:398:VAL:H	13	0.13
(1,2147)	1:A:394:PHE:H	1:A:394:PHE:HB3	12	0.13
(1,2141)	1:A:393:LYS:H	1:A:393:LYS:HG3	9	0.13
(1,2139)	1:A:392:GLN:HG3	1:A:393:LYS:H	12	0.13
(1,2134)	1:A:392:GLN:H	1:A:392:GLN:HG3	20	0.13
(1,2127)	1:A:531:HIS:HE1	1:A:532:ARG:HD3	18	0.13
(1,2118)	1:A:407:HIS:HB3	1:A:407:HIS:HE1	8	0.13
(1,2076)	1:A:407:HIS:HB3	1:A:407:HIS:HD2	12	0.13

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2022)	1:A:505:SER:HA	1:A:505:SER:HB3	14	0.13
(1,2008)	1:A:462:CYS:HA	1:A:465:SER:HB3	20	0.13
(1,1927)	1:A:415:LYS:HA	1:A:415:LYS:HG3	17	0.13
(1,1850)	1:A:391:GLU:HA	1:A:391:GLU:HG3	4	0.13
(1,1850)	1:A:391:GLU:HA	1:A:391:GLU:HG3	5	0.13
(1,1765)	1:A:402:ALA:HA	1:A:403:ARG:HB3	16	0.13
(1,1753)	1:A:512:ARG:H	1:A:512:ARG:HD3	15	0.13
(1,1729)	1:A:532:ARG:HA	1:A:532:ARG:HD3	17	0.13
(1,1671)	1:A:438:GLU:HG3	1:A:439:LEU:H	17	0.13
(1,1670)	1:A:438:GLU:HA	1:A:438:GLU:HG3	3	0.13
(1,1669)	1:A:438:GLU:HB3	1:A:438:GLU:HG3	3	0.13
(1,1669)	1:A:438:GLU:HB3	1:A:438:GLU:HG3	6	0.13
(1,1669)	1:A:438:GLU:HB3	1:A:438:GLU:HG3	7	0.13
(1,1669)	1:A:438:GLU:HB3	1:A:438:GLU:HG3	8	0.13
(1,1669)	1:A:438:GLU:HB3	1:A:438:GLU:HG3	13	0.13
(1,1616)	1:A:415:LYS:HD3	1:A:520:PHE:HE1	19	0.13
(1,1616)	1:A:415:LYS:HD3	1:A:520:PHE:HE2	19	0.13
(1,1574)	1:A:407:HIS:HB3	1:A:408:ILE:HG13	4	0.13
(1,1572)	1:A:479:ARG:HG3	1:A:480:GLN:H	11	0.13
(1,137)	1:A:522:ARG:HB3	1:A:526:ASN:H	4	0.13
(1,1198)	1:A:532:ARG:HB3	1:A:535:ALA:HB1	9	0.13
(1,1198)	1:A:532:ARG:HB3	1:A:535:ALA:HB2	9	0.13
(1,1198)	1:A:532:ARG:HB3	1:A:535:ALA:HB3	9	0.13
(1,1168)	1:A:409:ALA:HB1	1:A:410:LEU:HG	13	0.13
(1,1168)	1:A:409:ALA:HB2	1:A:410:LEU:HG	13	0.13
(1,1168)	1:A:409:ALA:HB3	1:A:410:LEU:HG	13	0.13
(1,1136)	1:A:473:MET:HE1	1:A:482:SER:HB3	20	0.13
(1,1136)	1:A:473:MET:HE2	1:A:482:SER:HB3	20	0.13
(1,1136)	1:A:473:MET:HE3	1:A:482:SER:HB3	20	0.13
(1,1090)	1:A:518:GLN:HG3	1:A:519:ILE:HD11	7	0.13
(1,1090)	1:A:518:GLN:HG3	1:A:519:ILE:HD12	7	0.13
(1,1090)	1:A:518:GLN:HG3	1:A:519:ILE:HD13	7	0.13
(1,900)	1:A:449:SER:HB3	1:A:450:ALA:H	9	0.12
(1,829)	1:A:534:GLN:HB3	1:A:535:ALA:H	1	0.12
(1,829)	1:A:534:GLN:HB3	1:A:535:ALA:H	9	0.12
(1,829)	1:A:534:GLN:HB3	1:A:535:ALA:H	19	0.12
(1,786)	1:A:471:GLN:HB3	1:A:472:ALA:H	17	0.12
(1,636)	1:A:463:ARG:HB3	1:A:464:LEU:H	1	0.12
(1,561)	1:A:543:GLU:HB3	1:A:545:ASP:H	5	0.12
(1,523)	1:A:529:LYS:H	1:A:529:LYS:HE3	1	0.12
(1,511)	1:A:403:ARG:HD3	1:A:404:ALA:H	8	0.12
(1,511)	1:A:403:ARG:HD3	1:A:404:ALA:H	13	0.12

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,397)	1:A:536:ARG:H	1:A:536:ARG:HD3	4	0.12
(1,397)	1:A:536:ARG:H	1:A:536:ARG:HD3	14	0.12
(1,2839)	1:A:542:LYS:HG3	1:A:543:GLU:H	11	0.12
(1,2812)	1:A:531:HIS:HA	1:A:534:GLN:HG3	8	0.12
(1,2804)	1:A:529:LYS:HA	1:A:530:PRO:HG3	7	0.12
(1,2800)	1:A:529:LYS:H	1:A:529:LYS:HD3	14	0.12
(1,280)	1:A:527:THR:H	1:A:529:LYS:HG3	11	0.12
(1,280)	1:A:527:THR:H	1:A:529:LYS:HG3	15	0.12
(1,2753)	1:A:514:ASP:HB3	1:A:517:SER:H	14	0.12
(1,2731)	1:A:513:LEU:HB3	1:A:514:ASP:H	8	0.12
(1,2721)	1:A:512:ARG:H	1:A:512:ARG:HG3	15	0.12
(1,2679)	1:A:498:GLN:HG3	1:A:499:LEU:H	4	0.12
(1,2655)	1:A:493:GLU:H	1:A:493:GLU:HG3	19	0.12
(1,2654)	1:A:493:GLU:H	1:A:493:GLU:HB3	11	0.12
(1,2654)	1:A:493:GLU:H	1:A:493:GLU:HB3	18	0.12
(1,265)	1:A:482:SER:H	1:A:482:SER:HB3	2	0.12
(1,265)	1:A:482:SER:H	1:A:482:SER:HB3	5	0.12
(1,2615)	1:A:490:LEU:HD11	1:A:494:SER:HB3	5	0.12
(1,2615)	1:A:490:LEU:HD12	1:A:494:SER:HB3	5	0.12
(1,2615)	1:A:490:LEU:HD13	1:A:494:SER:HB3	5	0.12
(1,2615)	1:A:490:LEU:HD21	1:A:494:SER:HB3	5	0.12
(1,2615)	1:A:490:LEU:HD22	1:A:494:SER:HB3	5	0.12
(1,2615)	1:A:490:LEU:HD23	1:A:494:SER:HB3	5	0.12
(1,2615)	1:A:490:LEU:HD11	1:A:494:SER:HB3	14	0.12
(1,2615)	1:A:490:LEU:HD12	1:A:494:SER:HB3	14	0.12
(1,2615)	1:A:490:LEU:HD13	1:A:494:SER:HB3	14	0.12
(1,2615)	1:A:490:LEU:HD21	1:A:494:SER:HB3	14	0.12
(1,2615)	1:A:490:LEU:HD22	1:A:494:SER:HB3	14	0.12
(1,2615)	1:A:490:LEU:HD23	1:A:494:SER:HB3	14	0.12
(1,2578)	1:A:485:CYS:HB3	1:A:486:VAL:H	14	0.12
(1,2576)	1:A:485:CYS:H	1:A:485:CYS:HB3	11	0.12
(1,2565)	1:A:482:SER:H	1:A:483:PRO:HD3	7	0.12
(1,2561)	1:A:480:GLN:HB3	1:A:482:SER:H	19	0.12
(1,2558)	1:A:480:GLN:H	1:A:480:GLN:HB3	13	0.12
(1,2543)	1:A:476:ASN:H	1:A:476:ASN:HB3	6	0.12
(1,2538)	1:A:473:MET:HE1	1:A:485:CYS:HB3	9	0.12
(1,2538)	1:A:473:MET:HE2	1:A:485:CYS:HB3	9	0.12
(1,2538)	1:A:473:MET:HE3	1:A:485:CYS:HB3	9	0.12
(1,2537)	1:A:473:MET:HG3	1:A:474:MET:H	7	0.12
(1,2496)	1:A:466:LEU:HB3	1:A:469:VAL:HG11	6	0.12
(1,2496)	1:A:466:LEU:HB3	1:A:469:VAL:HG12	6	0.12
(1,2496)	1:A:466:LEU:HB3	1:A:469:VAL:HG13	6	0.12

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2496)	1:A:466:LEU:HB3	1:A:469:VAL:HG21	6	0.12
(1,2496)	1:A:466:LEU:HB3	1:A:469:VAL:HG22	6	0.12
(1,2496)	1:A:466:LEU:HB3	1:A:469:VAL:HG23	6	0.12
(1,2495)	1:A:466:LEU:HB3	1:A:467:HIS:HB3	5	0.12
(1,2495)	1:A:466:LEU:HB3	1:A:467:HIS:HB3	12	0.12
(1,249)	1:A:407:HIS:HB3	1:A:410:LEU:H	3	0.12
(1,2479)	1:A:463:ARG:HD3	1:A:464:LEU:H	2	0.12
(1,2473)	1:A:458:SER:HB3	1:A:459:ASN:HA	9	0.12
(1,2431)	1:A:453:ILE:HG21	1:A:453:ILE:HG13	7	0.12
(1,2431)	1:A:453:ILE:HG22	1:A:453:ILE:HG13	7	0.12
(1,2431)	1:A:453:ILE:HG23	1:A:453:ILE:HG13	7	0.12
(1,2417)	1:A:448:HIS:H	1:A:448:HIS:HB3	6	0.12
(1,2409)	1:A:446:ILE:HG21	1:A:473:MET:HG3	13	0.12
(1,2409)	1:A:446:ILE:HG22	1:A:473:MET:HG3	13	0.12
(1,2409)	1:A:446:ILE:HG23	1:A:473:MET:HG3	13	0.12
(1,2408)	1:A:446:ILE:HG21	1:A:446:ILE:HG13	1	0.12
(1,2408)	1:A:446:ILE:HG22	1:A:446:ILE:HG13	1	0.12
(1,2408)	1:A:446:ILE:HG23	1:A:446:ILE:HG13	1	0.12
(1,2408)	1:A:446:ILE:HG21	1:A:446:ILE:HG13	4	0.12
(1,2408)	1:A:446:ILE:HG22	1:A:446:ILE:HG13	4	0.12
(1,2408)	1:A:446:ILE:HG23	1:A:446:ILE:HG13	4	0.12
(1,2408)	1:A:446:ILE:HG21	1:A:446:ILE:HG13	8	0.12
(1,2408)	1:A:446:ILE:HG22	1:A:446:ILE:HG13	8	0.12
(1,2408)	1:A:446:ILE:HG23	1:A:446:ILE:HG13	8	0.12
(1,2408)	1:A:446:ILE:HG21	1:A:446:ILE:HG13	11	0.12
(1,2408)	1:A:446:ILE:HG22	1:A:446:ILE:HG13	11	0.12
(1,2408)	1:A:446:ILE:HG23	1:A:446:ILE:HG13	11	0.12
(1,2408)	1:A:446:ILE:HG21	1:A:446:ILE:HG13	12	0.12
(1,2408)	1:A:446:ILE:HG22	1:A:446:ILE:HG13	12	0.12
(1,2408)	1:A:446:ILE:HG23	1:A:446:ILE:HG13	12	0.12
(1,2408)	1:A:446:ILE:HG21	1:A:446:ILE:HG13	14	0.12
(1,2408)	1:A:446:ILE:HG22	1:A:446:ILE:HG13	14	0.12
(1,2408)	1:A:446:ILE:HG23	1:A:446:ILE:HG13	14	0.12
(1,2408)	1:A:446:ILE:HG21	1:A:446:ILE:HG13	16	0.12
(1,2408)	1:A:446:ILE:HG22	1:A:446:ILE:HG13	16	0.12
(1,2408)	1:A:446:ILE:HG23	1:A:446:ILE:HG13	16	0.12
(1,2408)	1:A:446:ILE:HG21	1:A:446:ILE:HG13	17	0.12
(1,2408)	1:A:446:ILE:HG22	1:A:446:ILE:HG13	17	0.12
(1,2408)	1:A:446:ILE:HG23	1:A:446:ILE:HG13	17	0.12
(1,2398)	1:A:443:GLN:HB3	1:A:446:ILE:HG21	12	0.12
(1,2398)	1:A:443:GLN:HB3	1:A:446:ILE:HG22	12	0.12
(1,2398)	1:A:443:GLN:HB3	1:A:446:ILE:HG23	12	0.12

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2387)	1:A:442:LEU:HB3	1:A:443:GLN:H	4	0.12
(1,2369)	1:A:436:ARG:H	1:A:436:ARG:HB3	17	0.12
(1,2318)	1:A:421:VAL:H	1:A:422:PRO:HD3	9	0.12
(1,2316)	1:A:420:GLY:HA2	1:A:524:VAL:HG11	3	0.12
(1,2316)	1:A:420:GLY:HA2	1:A:524:VAL:HG12	3	0.12
(1,2316)	1:A:420:GLY:HA2	1:A:524:VAL:HG13	3	0.12
(1,2316)	1:A:420:GLY:HA2	1:A:524:VAL:HG21	3	0.12
(1,2316)	1:A:420:GLY:HA2	1:A:524:VAL:HG22	3	0.12
(1,2316)	1:A:420:GLY:HA2	1:A:524:VAL:HG23	3	0.12
(1,2316)	1:A:420:GLY:HA2	1:A:524:VAL:HG11	7	0.12
(1,2316)	1:A:420:GLY:HA2	1:A:524:VAL:HG12	7	0.12
(1,2316)	1:A:420:GLY:HA2	1:A:524:VAL:HG13	7	0.12
(1,2316)	1:A:420:GLY:HA2	1:A:524:VAL:HG21	7	0.12
(1,2316)	1:A:420:GLY:HA2	1:A:524:VAL:HG22	7	0.12
(1,2316)	1:A:420:GLY:HA2	1:A:524:VAL:HG23	7	0.12
(1,2316)	1:A:420:GLY:HA2	1:A:524:VAL:HG11	8	0.12
(1,2316)	1:A:420:GLY:HA2	1:A:524:VAL:HG12	8	0.12
(1,2316)	1:A:420:GLY:HA2	1:A:524:VAL:HG13	8	0.12
(1,2316)	1:A:420:GLY:HA2	1:A:524:VAL:HG21	8	0.12
(1,2316)	1:A:420:GLY:HA2	1:A:524:VAL:HG22	8	0.12
(1,2316)	1:A:420:GLY:HA2	1:A:524:VAL:HG23	8	0.12
(1,2260)	1:A:415:LYS:HG3	1:A:415:LYS:HE3	20	0.12
(1,2253)	1:A:414:GLU:HA	1:A:414:GLU:HG3	18	0.12
(1,2252)	1:A:414:GLU:H	1:A:423:ASP:HB3	19	0.12
(1,2200)	1:A:402:ALA:HB1	1:A:460:PHE:HB3	12	0.12
(1,2200)	1:A:402:ALA:HB2	1:A:460:PHE:HB3	12	0.12
(1,2200)	1:A:402:ALA:HB3	1:A:460:PHE:HB3	12	0.12
(1,2179)	1:A:398:VAL:HG11	1:A:449:SER:HB3	16	0.12
(1,2179)	1:A:398:VAL:HG12	1:A:449:SER:HB3	16	0.12
(1,2179)	1:A:398:VAL:HG13	1:A:449:SER:HB3	16	0.12
(1,2179)	1:A:398:VAL:HG21	1:A:449:SER:HB3	16	0.12
(1,2179)	1:A:398:VAL:HG22	1:A:449:SER:HB3	16	0.12
(1,2179)	1:A:398:VAL:HG23	1:A:449:SER:HB3	16	0.12
(1,2175)	1:A:398:VAL:HG11	1:A:427:PHE:HB3	14	0.12
(1,2175)	1:A:398:VAL:HG12	1:A:427:PHE:HB3	14	0.12
(1,2175)	1:A:398:VAL:HG13	1:A:427:PHE:HB3	14	0.12
(1,2175)	1:A:398:VAL:HG21	1:A:427:PHE:HB3	14	0.12
(1,2175)	1:A:398:VAL:HG22	1:A:427:PHE:HB3	14	0.12
(1,2175)	1:A:398:VAL:HG23	1:A:427:PHE:HB3	14	0.12
(1,2152)	1:A:395:TYR:HB3	1:A:397:PHE:HA	7	0.12
(1,2141)	1:A:393:LYS:H	1:A:393:LYS:HG3	14	0.12
(1,2052)	1:A:462:CYS:HB3	1:A:503:THR:HA	4	0.12

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1890)	1:A:431:PHE:HA	1:A:432:GLN:HG3	13	0.12
(1,1869)	1:A:491:PRO:HA	1:A:515:GLU:HA	6	0.12
(1,1869)	1:A:491:PRO:HA	1:A:515:GLU:HA	16	0.12
(1,1850)	1:A:391:GLU:HA	1:A:391:GLU:HG3	6	0.12
(1,1850)	1:A:391:GLU:HA	1:A:391:GLU:HG3	8	0.12
(1,1850)	1:A:391:GLU:HA	1:A:391:GLU:HG3	16	0.12
(1,1791)	1:A:538:ALA:HA	1:A:541:ARG:HB3	12	0.12
(1,1768)	1:A:461:ASP:HA	1:A:462:CYS:HB3	3	0.12
(1,1732)	1:A:541:ARG:HB3	1:A:541:ARG:HD3	8	0.12
(1,1722)	1:A:403:ARG:HB3	1:A:403:ARG:HD3	10	0.12
(1,1708)	1:A:542:LYS:HD3	1:A:542:LYS:HE3	19	0.12
(1,1670)	1:A:438:GLU:HA	1:A:438:GLU:HG3	10	0.12
(1,1669)	1:A:438:GLU:HB3	1:A:438:GLU:HG3	14	0.12
(1,1637)	1:A:542:LYS:HB3	1:A:542:LYS:HD3	15	0.12
(1,1618)	1:A:463:ARG:HB3	1:A:506:LEU:HD11	2	0.12
(1,1618)	1:A:463:ARG:HB3	1:A:506:LEU:HD12	2	0.12
(1,1618)	1:A:463:ARG:HB3	1:A:506:LEU:HD13	2	0.12
(1,1609)	1:A:394:PHE:HD1	1:A:537:LYS:HD3	10	0.12
(1,1609)	1:A:394:PHE:HD2	1:A:537:LYS:HD3	10	0.12
(1,1598)	1:A:393:LYS:HA	1:A:393:LYS:HD3	13	0.12
(1,1598)	1:A:393:LYS:HA	1:A:393:LYS:HD3	14	0.12
(1,1572)	1:A:479:ARG:HG3	1:A:480:GLN:H	1	0.12
(1,1550)	1:A:522:ARG:HG3	1:A:523:LYS:H	9	0.12
(1,1550)	1:A:522:ARG:HG3	1:A:523:LYS:H	19	0.12
(1,1550)	1:A:522:ARG:HG3	1:A:523:LYS:H	20	0.12
(1,137)	1:A:522:ARG:HB3	1:A:526:ASN:H	9	0.12
(1,1266)	1:A:526:ASN:HB3	1:A:527:THR:HG21	5	0.12
(1,1266)	1:A:526:ASN:HB3	1:A:527:THR:HG22	5	0.12
(1,1266)	1:A:526:ASN:HB3	1:A:527:THR:HG23	5	0.12
(1,1136)	1:A:473:MET:HE1	1:A:482:SER:HB3	19	0.12
(1,1136)	1:A:473:MET:HE2	1:A:482:SER:HB3	19	0.12
(1,1136)	1:A:473:MET:HE3	1:A:482:SER:HB3	19	0.12
(1,829)	1:A:534:GLN:HB3	1:A:535:ALA:H	18	0.11
(1,786)	1:A:471:GLN:HB3	1:A:472:ALA:H	1	0.11
(1,786)	1:A:471:GLN:HB3	1:A:472:ALA:H	2	0.11
(1,786)	1:A:471:GLN:HB3	1:A:472:ALA:H	16	0.11
(1,679)	1:A:436:ARG:H	1:A:436:ARG:HD3	4	0.11
(1,641)	1:A:501:SER:HB3	1:A:502:ASP:H	20	0.11
(1,600)	1:A:403:ARG:HB3	1:A:403:ARG:HE	15	0.11
(1,555)	1:A:542:LYS:H	1:A:542:LYS:HE3	2	0.11
(1,535)	1:A:542:LYS:HB3	1:A:543:GLU:H	8	0.11
(1,421)	1:A:466:LEU:HB3	1:A:468:GLN:H	8	0.11

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,344)	1:A:466:LEU:HB3	1:A:467:HIS:H	10	0.11
(1,2824)	1:A:534:GLN:HG3	1:A:535:ALA:HB1	4	0.11
(1,2824)	1:A:534:GLN:HG3	1:A:535:ALA:HB2	4	0.11
(1,2824)	1:A:534:GLN:HG3	1:A:535:ALA:HB3	4	0.11
(1,2822)	1:A:534:GLN:HG3	1:A:534:GLN:HE22	5	0.11
(1,2808)	1:A:529:LYS:HB3	1:A:531:HIS:HE1	3	0.11
(1,2804)	1:A:529:LYS:HA	1:A:530:PRO:HG3	20	0.11
(1,2766)	1:A:518:GLN:HG3	1:A:518:GLN:HE21	15	0.11
(1,2766)	1:A:518:GLN:HG3	1:A:518:GLN:HE22	15	0.11
(1,2731)	1:A:513:LEU:HB3	1:A:514:ASP:H	11	0.11
(1,2679)	1:A:498:GLN:HG3	1:A:499:LEU:H	2	0.11
(1,2679)	1:A:498:GLN:HG3	1:A:499:LEU:H	11	0.11
(1,2669)	1:A:495:SER:HB3	1:A:498:GLN:HB3	20	0.11
(1,264)	1:A:480:GLN:HG3	1:A:482:SER:H	6	0.11
(1,2576)	1:A:485:CYS:H	1:A:485:CYS:HB3	10	0.11
(1,2569)	1:A:483:PRO:HB3	1:A:485:CYS:H	3	0.11
(1,2537)	1:A:473:MET:HG3	1:A:474:MET:H	17	0.11
(1,2537)	1:A:473:MET:HG3	1:A:474:MET:H	20	0.11
(1,2528)	1:A:471:GLN:HG3	1:A:471:GLN:HE21	8	0.11
(1,2528)	1:A:471:GLN:HG3	1:A:471:GLN:HE22	8	0.11
(1,2502)	1:A:467:HIS:HA	1:A:470:ASN:HB3	11	0.11
(1,2496)	1:A:466:LEU:HB3	1:A:469:VAL:HG11	1	0.11
(1,2496)	1:A:466:LEU:HB3	1:A:469:VAL:HG12	1	0.11
(1,2496)	1:A:466:LEU:HB3	1:A:469:VAL:HG13	1	0.11
(1,2496)	1:A:466:LEU:HB3	1:A:469:VAL:HG21	1	0.11
(1,2496)	1:A:466:LEU:HB3	1:A:469:VAL:HG22	1	0.11
(1,2496)	1:A:466:LEU:HB3	1:A:469:VAL:HG23	1	0.11
(1,2496)	1:A:466:LEU:HB3	1:A:469:VAL:HG11	15	0.11
(1,2496)	1:A:466:LEU:HB3	1:A:469:VAL:HG12	15	0.11
(1,2496)	1:A:466:LEU:HB3	1:A:469:VAL:HG13	15	0.11
(1,2496)	1:A:466:LEU:HB3	1:A:469:VAL:HG21	15	0.11
(1,2496)	1:A:466:LEU:HB3	1:A:469:VAL:HG22	15	0.11
(1,2496)	1:A:466:LEU:HB3	1:A:469:VAL:HG23	15	0.11
(1,2485)	1:A:464:LEU:HD11	1:A:467:HIS:HB3	15	0.11
(1,2485)	1:A:464:LEU:HD12	1:A:467:HIS:HB3	15	0.11
(1,2485)	1:A:464:LEU:HD13	1:A:467:HIS:HB3	15	0.11
(1,2479)	1:A:463:ARG:HD3	1:A:464:LEU:H	3	0.11
(1,2417)	1:A:448:HIS:H	1:A:448:HIS:HB3	2	0.11
(1,2417)	1:A:448:HIS:H	1:A:448:HIS:HB3	4	0.11
(1,2417)	1:A:448:HIS:H	1:A:448:HIS:HB3	14	0.11
(1,2410)	1:A:446:ILE:HG13	1:A:447:ASP:H	13	0.11
(1,2410)	1:A:446:ILE:HG13	1:A:447:ASP:H	15	0.11

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2408)	1:A:446:ILE:HG21	1:A:446:ILE:HG13	6	0.11
(1,2408)	1:A:446:ILE:HG22	1:A:446:ILE:HG13	6	0.11
(1,2408)	1:A:446:ILE:HG23	1:A:446:ILE:HG13	6	0.11
(1,2408)	1:A:446:ILE:HG21	1:A:446:ILE:HG13	9	0.11
(1,2408)	1:A:446:ILE:HG22	1:A:446:ILE:HG13	9	0.11
(1,2408)	1:A:446:ILE:HG23	1:A:446:ILE:HG13	9	0.11
(1,2401)	1:A:443:GLN:HG3	1:A:472:ALA:HB1	2	0.11
(1,2401)	1:A:443:GLN:HG3	1:A:472:ALA:HB2	2	0.11
(1,2401)	1:A:443:GLN:HG3	1:A:472:ALA:HB3	2	0.11
(1,238)	1:A:492:LEU:HG	1:A:493:GLU:H	4	0.11
(1,238)	1:A:492:LEU:HG	1:A:493:GLU:H	16	0.11
(1,2371)	1:A:436:ARG:HB3	1:A:436:ARG:HG3	15	0.11
(1,2369)	1:A:436:ARG:H	1:A:436:ARG:HB3	2	0.11
(1,2369)	1:A:436:ARG:H	1:A:436:ARG:HB3	20	0.11
(1,2318)	1:A:421:VAL:H	1:A:422:PRO:HD3	12	0.11
(1,2318)	1:A:421:VAL:H	1:A:422:PRO:HD3	16	0.11
(1,2264)	1:A:415:LYS:HE3	1:A:521:ALA:HB1	5	0.11
(1,2264)	1:A:415:LYS:HE3	1:A:521:ALA:HB2	5	0.11
(1,2264)	1:A:415:LYS:HE3	1:A:521:ALA:HB3	5	0.11
(1,2263)	1:A:415:LYS:HE3	1:A:520:PHE:HZ	3	0.11
(1,2260)	1:A:415:LYS:HG3	1:A:415:LYS:HE3	13	0.11
(1,2256)	1:A:414:GLU:HG3	1:A:415:LYS:H	19	0.11
(1,2211)	1:A:406:GLU:HB3	1:A:409:ALA:HB1	4	0.11
(1,2211)	1:A:406:GLU:HB3	1:A:409:ALA:HB2	4	0.11
(1,2211)	1:A:406:GLU:HB3	1:A:409:ALA:HB3	4	0.11
(1,2211)	1:A:406:GLU:HB3	1:A:409:ALA:HB1	6	0.11
(1,2211)	1:A:406:GLU:HB3	1:A:409:ALA:HB2	6	0.11
(1,2211)	1:A:406:GLU:HB3	1:A:409:ALA:HB3	6	0.11
(1,2211)	1:A:406:GLU:HB3	1:A:409:ALA:HB1	17	0.11
(1,2211)	1:A:406:GLU:HB3	1:A:409:ALA:HB2	17	0.11
(1,2211)	1:A:406:GLU:HB3	1:A:409:ALA:HB3	17	0.11
(1,2205)	1:A:405:ASP:HB3	1:A:408:ILE:HD11	11	0.11
(1,2205)	1:A:405:ASP:HB3	1:A:408:ILE:HD12	11	0.11
(1,2205)	1:A:405:ASP:HB3	1:A:408:ILE:HD13	11	0.11
(1,2203)	1:A:405:ASP:HB3	1:A:408:ILE:H	11	0.11
(1,2184)	1:A:400:LEU:H	1:A:400:LEU:HB3	3	0.11
(1,2184)	1:A:400:LEU:H	1:A:400:LEU:HB3	14	0.11
(1,2184)	1:A:400:LEU:H	1:A:400:LEU:HB3	15	0.11
(1,2153)	1:A:395:TYR:HB3	1:A:424:GLY:HA2	10	0.11
(1,2153)	1:A:395:TYR:HB3	1:A:424:GLY:HA3	10	0.11
(1,2152)	1:A:395:TYR:HB3	1:A:397:PHE:HA	2	0.11
(1,2152)	1:A:395:TYR:HB3	1:A:397:PHE:HA	14	0.11

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2141)	1:A:393:LYS:H	1:A:393:LYS:HG3	8	0.11
(1,2118)	1:A:407:HIS:HB3	1:A:407:HIS:HE1	7	0.11
(1,2118)	1:A:407:HIS:HB3	1:A:407:HIS:HE1	9	0.11
(1,2118)	1:A:407:HIS:HB3	1:A:407:HIS:HE1	10	0.11
(1,2076)	1:A:407:HIS:HB3	1:A:407:HIS:HD2	13	0.11
(1,2076)	1:A:407:HIS:HB3	1:A:407:HIS:HD2	17	0.11
(1,2021)	1:A:505:SER:HB3	1:A:506:LEU:HG	11	0.11
(1,2020)	1:A:504:ALA:HB1	1:A:505:SER:HB3	2	0.11
(1,2020)	1:A:504:ALA:HB2	1:A:505:SER:HB3	2	0.11
(1,2020)	1:A:504:ALA:HB3	1:A:505:SER:HB3	2	0.11
(1,1987)	1:A:401:HIS:HE2	1:A:403:ARG:HA	6	0.11
(1,1869)	1:A:491:PRO:HA	1:A:515:GLU:HA	14	0.11
(1,1729)	1:A:532:ARG:HA	1:A:532:ARG:HD3	3	0.11
(1,1669)	1:A:438:GLU:HB3	1:A:438:GLU:HG3	5	0.11
(1,1669)	1:A:438:GLU:HB3	1:A:438:GLU:HG3	20	0.11
(1,1657)	1:A:471:GLN:HB3	1:A:471:GLN:HG3	19	0.11
(1,1599)	1:A:393:LYS:HD3	1:A:395:TYR:HD1	2	0.11
(1,1599)	1:A:393:LYS:HD3	1:A:395:TYR:HD2	2	0.11
(1,1574)	1:A:407:HIS:HB3	1:A:408:ILE:HG13	5	0.11
(1,1550)	1:A:522:ARG:HG3	1:A:523:LYS:H	12	0.11
(1,1550)	1:A:522:ARG:HG3	1:A:523:LYS:H	15	0.11
(1,1500)	1:A:491:PRO:HA	1:A:492:LEU:HD21	18	0.11
(1,1500)	1:A:491:PRO:HA	1:A:492:LEU:HD22	18	0.11
(1,1500)	1:A:491:PRO:HA	1:A:492:LEU:HD23	18	0.11
(1,1499)	1:A:492:LEU:HD21	1:A:493:GLU:H	10	0.11
(1,1499)	1:A:492:LEU:HD22	1:A:493:GLU:H	10	0.11
(1,1499)	1:A:492:LEU:HD23	1:A:493:GLU:H	10	0.11
(1,1464)	1:A:524:VAL:HG11	1:A:528:PHE:HD1	5	0.11
(1,1464)	1:A:524:VAL:HG11	1:A:528:PHE:HD2	5	0.11
(1,1464)	1:A:524:VAL:HG12	1:A:528:PHE:HD1	5	0.11
(1,1464)	1:A:524:VAL:HG12	1:A:528:PHE:HD2	5	0.11
(1,1464)	1:A:524:VAL:HG13	1:A:528:PHE:HD1	5	0.11
(1,1464)	1:A:524:VAL:HG13	1:A:528:PHE:HD2	5	0.11
(1,1275)	1:A:398:VAL:HG21	1:A:449:SER:HB3	10	0.11
(1,1275)	1:A:398:VAL:HG22	1:A:449:SER:HB3	10	0.11
(1,1275)	1:A:398:VAL:HG23	1:A:449:SER:HB3	10	0.11
(1,1123)	1:A:536:ARG:HH11	1:A:539:MET:HE1	6	0.11
(1,1123)	1:A:536:ARG:HH11	1:A:539:MET:HE2	6	0.11
(1,1123)	1:A:536:ARG:HH11	1:A:539:MET:HE3	6	0.11
(1,1123)	1:A:536:ARG:HH12	1:A:539:MET:HE1	6	0.11
(1,1123)	1:A:536:ARG:HH12	1:A:539:MET:HE2	6	0.11
(1,1123)	1:A:536:ARG:HH12	1:A:539:MET:HE3	6	0.11

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1040)	1:A:449:SER:HB3	1:A:452:ILE:HD11	13	0.11
(1,1040)	1:A:449:SER:HB3	1:A:452:ILE:HD12	13	0.11
(1,1040)	1:A:449:SER:HB3	1:A:452:ILE:HD13	13	0.11
(1,100)	1:A:422:PRO:HD3	1:A:423:ASP:H	5	0.11

10 Dihedral-angle violation analysis [\(i\)](#)

Dihedral angle analysis failed due to data error in the dihedral angle restraints, possibly missing target value