



Full wwPDB NMR Structure Validation Report ⓘ

Jun 3, 2023 – 11:01 AM EDT

PDB ID : 6BYV
BMRB ID : 30388
Title : Solution NMR structure of cysteine-rich calcium bound domains of very low density lipoprotein receptor
Authors : Banerjee, K.; Gruschus, J.M.; Tjandra, N.; Yakovlev, S.; Medved, L.
Deposited on : 2017-12-21

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

MolProbity : 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

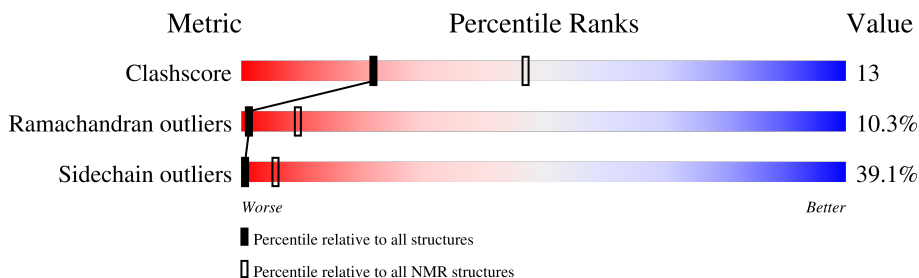
1 Overall quality at a glance

The following experimental techniques were used to determine the structure:

SOLUTION NMR

The overall completeness of chemical shifts assignment is 84%.

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 $\leq 5\%$

Mol	Chain	Length	Quality of chain
1	A	121	

2 Ensemble composition and analysis i

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

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

Well-defined (core) protein residues			
Well-defined core	Residue range (total)	Backbone RMSD (Å)	Medoid model
1	A:3-A:74 (72)	1.02	16
2	A:75-A:108 (34)	1.43	6

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 3 single-model clusters were found.

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

3 Entry composition [i](#)

There are 2 unique types of molecules in this entry. The entry contains 1659 atoms, of which 753 are hydrogens and 0 are deuteriums.

- Molecule 1 is a protein called Very low-density lipoprotein receptor.

Mol	Chain	Residues	Atoms						Trace
			Total	C	H	N	O	S	
1	A	121	1656	518	753	160	206	19	0

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

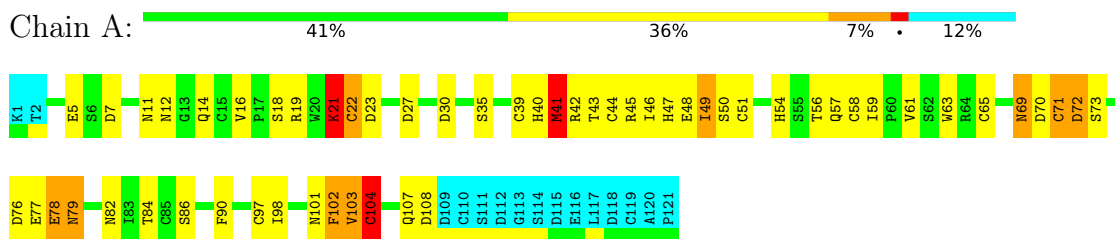
Mol	Chain	Residues	Atoms	
2	A	3	Total	Ca
			3	3

4 Residue-property plots

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: Very low-density lipoprotein receptor

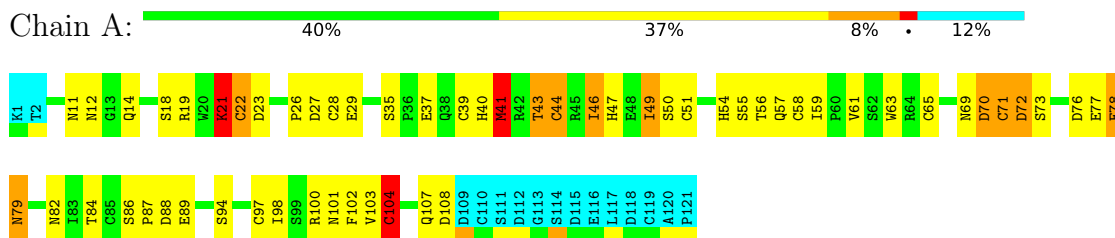


4.2 Scores per residue for each member of the ensemble

Colouring as in section 4.1 above.

4.2.1 Score per residue for model 1

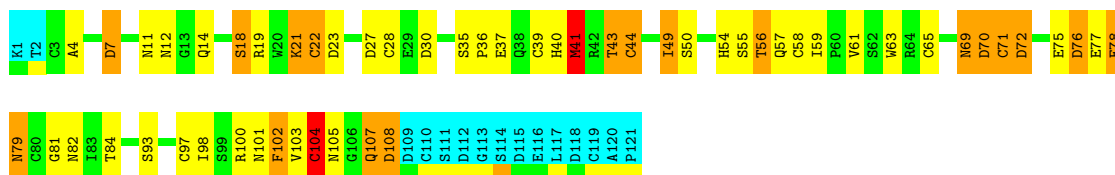
- Molecule 1: Very low-density lipoprotein receptor



4.2.2 Score per residue for model 2

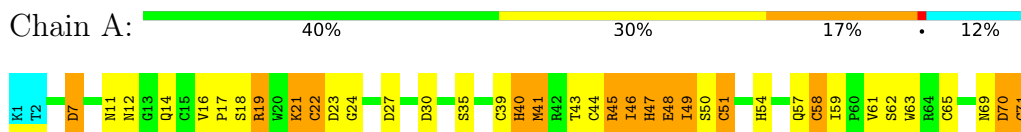
- Molecule 1: Very low-density lipoprotein receptor





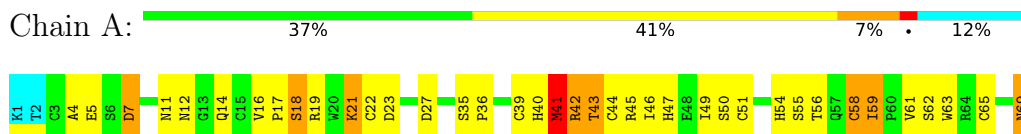
4.2.3 Score per residue for model 3

- Molecule 1: Very low-density lipoprotein receptor



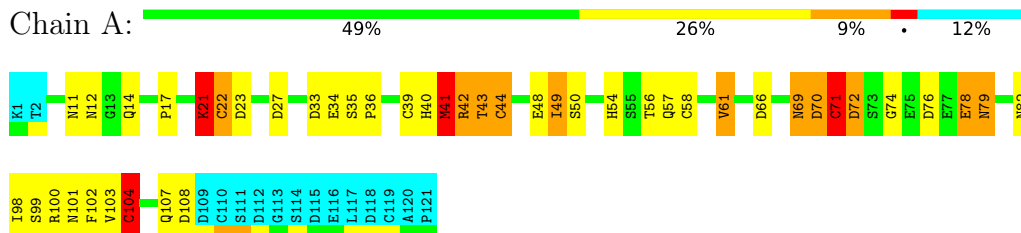
4.2.4 Score per residue for model 4

- Molecule 1: Very low-density lipoprotein receptor



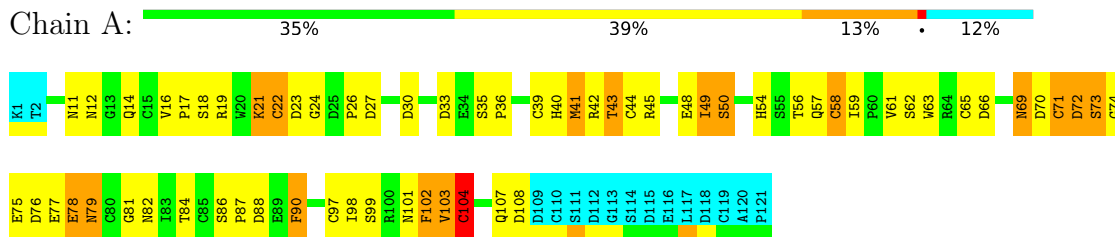
4.2.5 Score per residue for model 5

- Molecule 1: Very low-density lipoprotein receptor



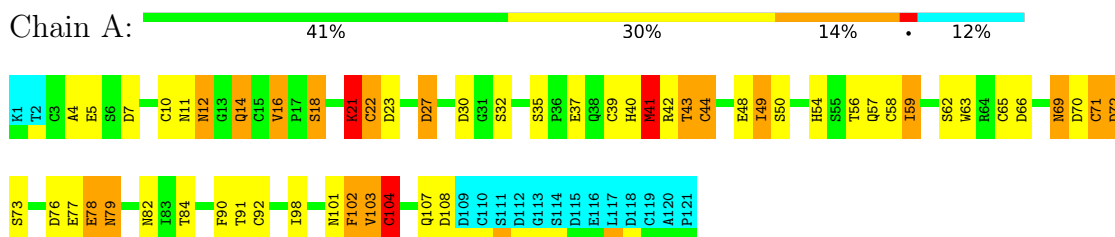
4.2.6 Score per residue for model 6

- Molecule 1: Very low-density lipoprotein receptor



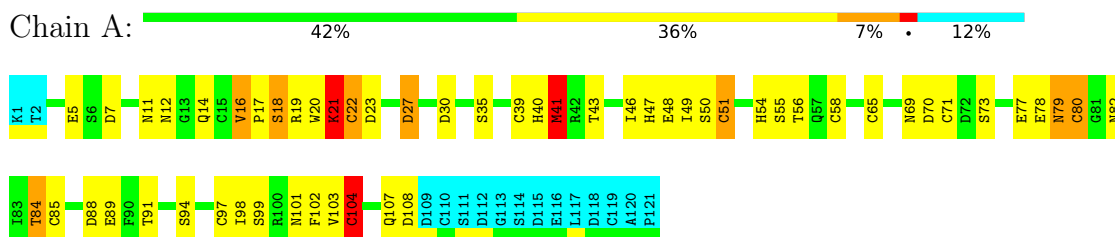
4.2.7 Score per residue for model 7

- Molecule 1: Very low-density lipoprotein receptor



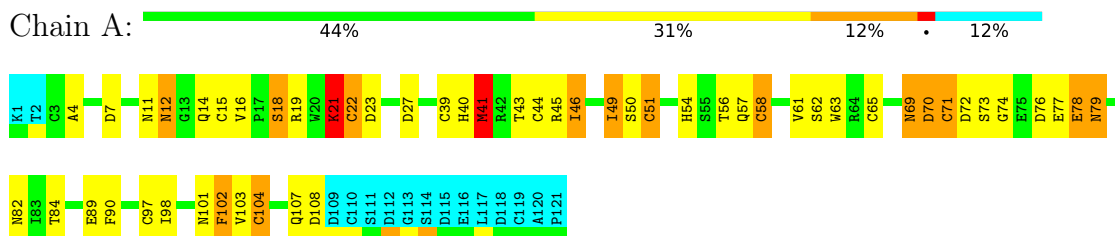
4.2.8 Score per residue for model 8

- Molecule 1: Very low-density lipoprotein receptor



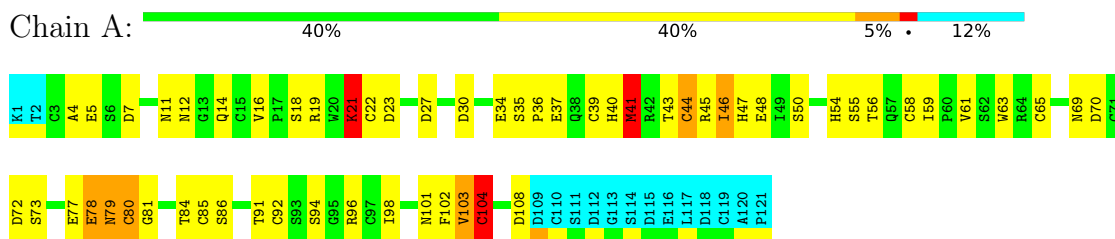
4.2.9 Score per residue for model 9

- Molecule 1: Very low-density lipoprotein receptor



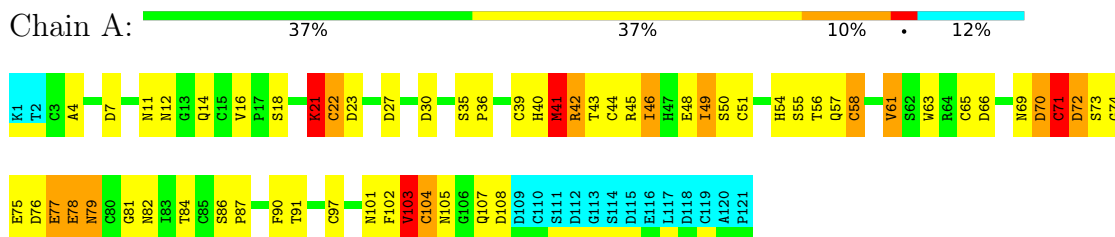
4.2.10 Score per residue for model 10

- Molecule 1: Very low-density lipoprotein receptor



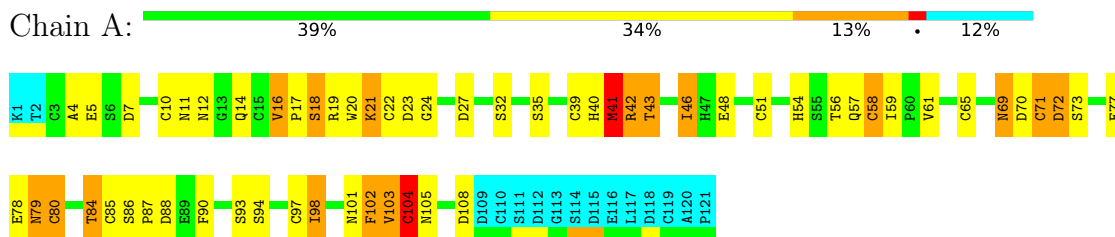
4.2.11 Score per residue for model 11

- Molecule 1: Very low-density lipoprotein receptor



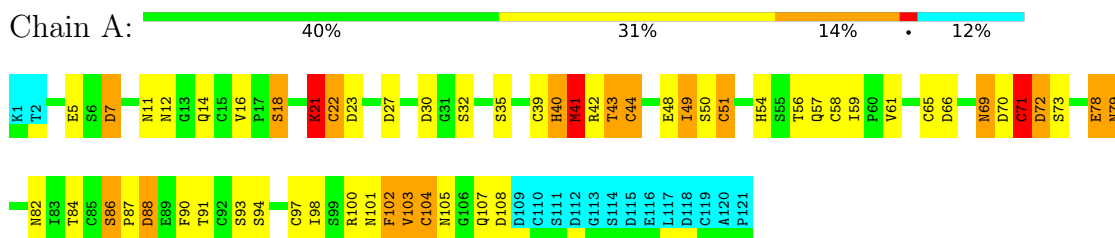
4.2.12 Score per residue for model 12

- Molecule 1: Very low-density lipoprotein receptor



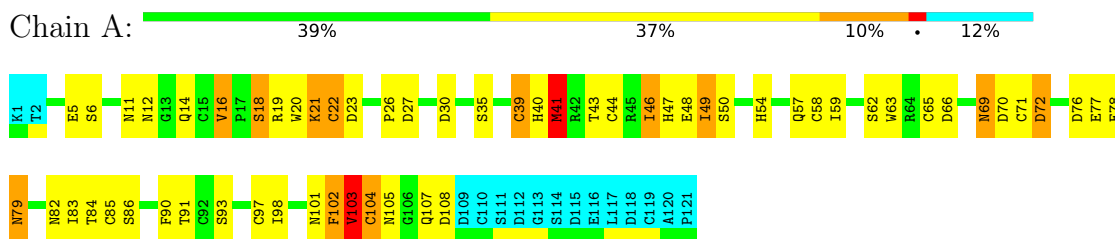
4.2.13 Score per residue for model 13

- Molecule 1: Very low-density lipoprotein receptor



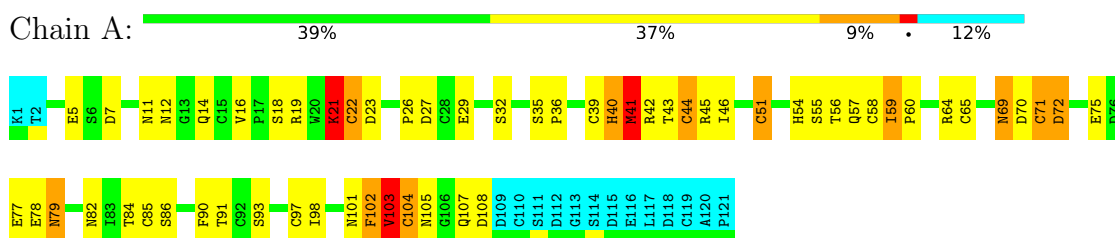
4.2.14 Score per residue for model 14

- Molecule 1: Very low-density lipoprotein receptor



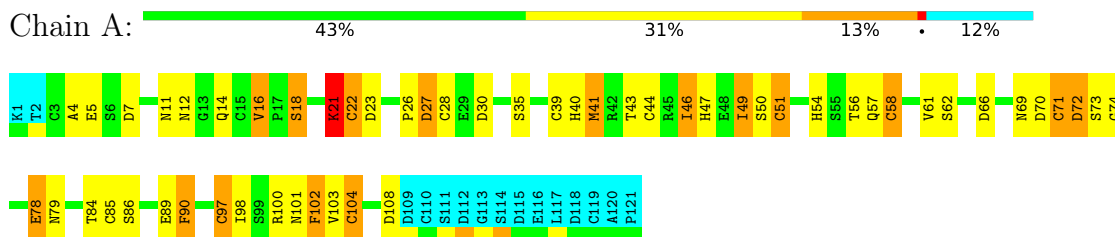
4.2.15 Score per residue for model 15

- Molecule 1: Very low-density lipoprotein receptor



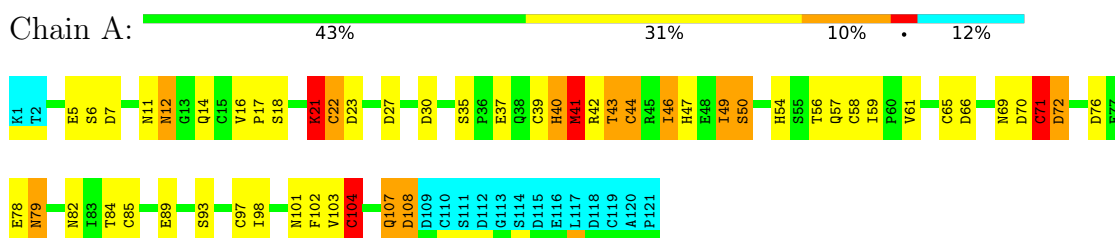
4.2.16 Score per residue for model 16 (medoid)

- Molecule 1: Very low-density lipoprotein receptor



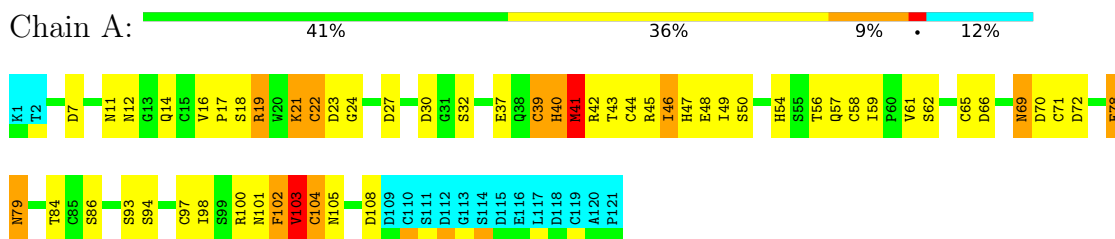
4.2.17 Score per residue for model 17

- Molecule 1: Very low-density lipoprotein receptor



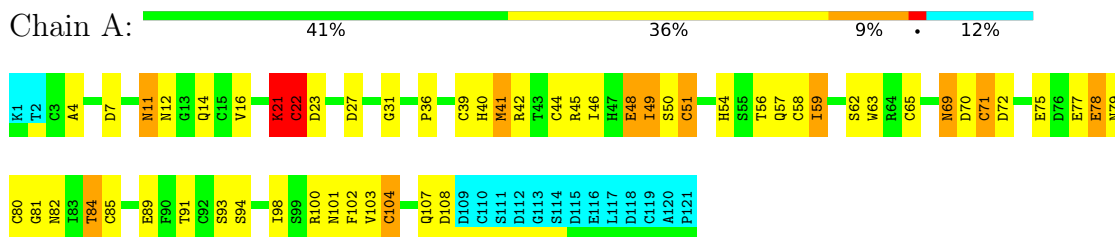
4.2.18 Score per residue for model 18

- Molecule 1: Very low-density lipoprotein receptor



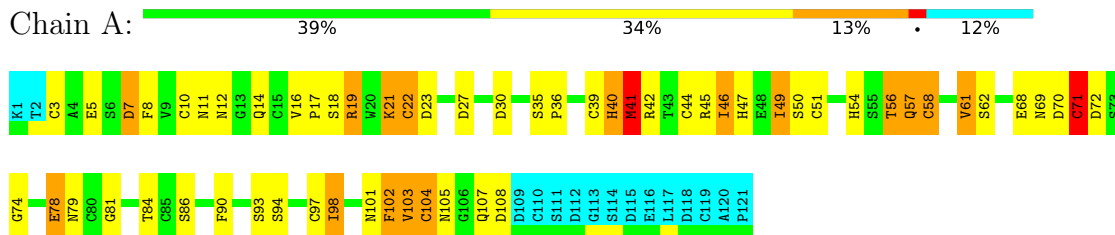
4.2.19 Score per residue for model 19

- Molecule 1: Very low-density lipoprotein receptor



4.2.20 Score per residue for model 20

- Molecule 1: Very low-density lipoprotein receptor



5 Refinement protocol and experimental data overview

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

Of the 500 calculated structures, 20 were deposited, based on the following criterion: *structures with the lowest energy*.

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

Software name	Classification	Version
X-PLOR NIH	refinement	
TALOS	geometry optimization	

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	1174
Number of shifts mapped to atoms	1174
Number of unparsed shifts	0
Number of shifts with mapping errors	0
Number of shifts with mapping warnings	0
Assignment completeness (well-defined parts)	84%

6 Model quality [i](#)

6.1 Standard geometry [i](#)

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

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

There are no bond-length outliers.

There are no bond-angle outliers.

There are no chirality outliers.

There are no planarity outliers.

6.2 Too-close contacts [i](#)

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

Mol	Chain	Non-H	H(model)	H(added)	Clashes
1	A	797	665	665	19±4
All	All	16000	13300	13300	379

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 13.

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

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:49:ILE:HD12	1:A:61:VAL:HG12	0.79	1.53	11	5
1:A:49:ILE:HD12	1:A:61:VAL:HG22	0.76	1.57	2	1
1:A:42:ARG:O	1:A:56:THR:HG23	0.76	1.81	5	7
1:A:57:GLN:NE2	1:A:71:CYS:O	0.73	2.22	13	17
1:A:71:CYS:SG	1:A:71:CYS:O	0.69	2.50	17	5
1:A:98:ILE:HD12	1:A:102:PHE:CB	0.67	2.20	6	15
1:A:69:ASN:ND2	1:A:71:CYS:SG	0.65	2.70	2	12
1:A:59:ILE:HD12	1:A:63:TRP:CE3	0.64	2.26	7	3
1:A:39:CYS:O	1:A:41:MET:N	0.64	2.30	20	20
1:A:4:ALA:HB3	1:A:7:ASP:OD1	0.64	1.92	19	9
1:A:71:CYS:O	1:A:71:CYS:SG	0.62	2.58	20	9
1:A:80:CYS:SG	1:A:84:THR:HG23	0.61	2.35	12	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:78:GLU:O	1:A:79:ASN:ND2	0.61	2.33	9	13
1:A:69:ASN:ND2	1:A:71:CYS:H	0.60	1.94	12	3
1:A:43:THR:HG23	1:A:44:CYS:O	0.59	1.97	13	6
1:A:59:ILE:HD13	1:A:71:CYS:SG	0.59	2.37	19	1
1:A:71:CYS:O	1:A:72:ASP:C	0.59	2.41	20	17
1:A:49:ILE:HD12	1:A:61:VAL:CG1	0.57	2.25	11	1
1:A:36:PRO:HA	1:A:56:THR:HG21	0.56	1.75	5	7
1:A:49:ILE:HB	1:A:61:VAL:HG22	0.55	1.77	4	1
1:A:59:ILE:HD12	1:A:63:TRP:HE3	0.54	1.62	7	1
1:A:74:GLY:O	1:A:76:ASP:N	0.54	2.41	6	1
1:A:98:ILE:HD13	1:A:102:PHE:HB3	0.54	1.79	2	1
1:A:71:CYS:HB2	1:A:74:GLY:HA2	0.53	1.80	11	6
1:A:21:LYS:O	1:A:23:ASP:N	0.53	2.42	5	20
1:A:78:GLU:O	1:A:80:CYS:N	0.52	2.42	8	2
1:A:49:ILE:HG23	1:A:50:SER:N	0.52	2.20	3	14
1:A:70:ASP:O	1:A:74:GLY:N	0.51	2.43	6	1
1:A:59:ILE:HD11	1:A:69:ASN:HD21	0.51	1.66	7	2
1:A:51:CYS:SG	1:A:71:CYS:C	0.50	2.90	12	9
1:A:63:TRP:O	1:A:77:GLU:HG3	0.49	2.07	1	3
1:A:103:VAL:O	1:A:104:CYS:C	0.49	2.49	6	11
1:A:74:GLY:C	1:A:76:ASP:H	0.49	2.11	6	1
1:A:77:GLU:N	1:A:77:GLU:CD	0.49	2.66	8	3
1:A:78:GLU:O	1:A:79:ASN:C	0.48	2.51	12	4
1:A:49:ILE:HB	1:A:61:VAL:HG12	0.48	1.83	18	1
1:A:59:ILE:HD13	1:A:77:GLU:HB3	0.48	1.83	6	1
1:A:80:CYS:HA	1:A:84:THR:HG23	0.48	1.85	19	1
1:A:63:TRP:O	1:A:77:GLU:HG2	0.47	2.09	7	5
1:A:16:VAL:HG12	1:A:20:TRP:CD1	0.47	2.44	14	3
1:A:76:ASP:CG	1:A:76:ASP:O	0.47	2.52	17	1
1:A:12:ASN:ND2	1:A:12:ASN:O	0.47	2.48	17	9
1:A:43:THR:HG21	1:A:50:SER:CB	0.47	2.39	8	1
1:A:98:ILE:HD12	1:A:102:PHE:CG	0.47	2.44	12	3
1:A:34:GLU:HB3	1:A:44:CYS:HA	0.47	1.84	5	1
1:A:39:CYS:O	1:A:39:CYS:SG	0.47	2.72	12	5
1:A:46:ILE:HG23	1:A:47:HIS:H	0.47	1.69	14	2
1:A:71:CYS:C	1:A:73:SER:H	0.47	2.13	6	1
1:A:12:ASN:O	1:A:12:ASN:ND2	0.47	2.47	7	11
1:A:70:ASP:OD1	1:A:76:ASP:CB	0.47	2.62	7	1
1:A:59:ILE:HD11	1:A:63:TRP:CG	0.46	2.45	10	1
1:A:11:ASN:ND2	1:A:31:GLY:O	0.46	2.47	19	1
1:A:49:ILE:HG22	1:A:50:SER:N	0.46	2.26	8	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:98:ILE:HD12	1:A:102:PHE:HB3	0.46	1.86	16	2
1:A:44:CYS:SG	1:A:48:GLU:CB	0.46	3.04	3	1
1:A:44:CYS:H	1:A:58:CYS:CB	0.45	2.25	9	4
1:A:59:ILE:HG21	1:A:71:CYS:SG	0.45	2.51	15	2
1:A:24:GLY:HA2	1:A:45:ARG:O	0.45	2.11	3	1
1:A:44:CYS:H	1:A:58:CYS:HB3	0.45	1.72	11	3
1:A:49:ILE:HG21	1:A:69:ASN:HB2	0.45	1.88	14	1
1:A:79:ASN:HB2	1:A:91:THR:HG23	0.45	1.88	8	1
1:A:34:GLU:HB2	1:A:44:CYS:SG	0.45	2.52	10	1
1:A:22:CYS:N	1:A:39:CYS:SG	0.44	2.90	14	1
1:A:44:CYS:SG	1:A:48:GLU:HB2	0.44	2.53	19	1
1:A:17:PRO:O	1:A:19:ARG:N	0.44	2.51	3	4
1:A:103:VAL:O	1:A:105:ASN:N	0.44	2.51	18	7
1:A:98:ILE:HD12	1:A:102:PHE:HB2	0.44	1.90	6	3
1:A:79:ASN:O	1:A:79:ASN:OD1	0.43	2.36	16	2
1:A:86:SER:O	1:A:88:ASP:N	0.43	2.51	1	4
1:A:43:THR:HG21	1:A:50:SER:HA	0.43	1.91	13	2
1:A:69:ASN:ND2	1:A:71:CYS:HB3	0.43	2.28	18	1
1:A:78:GLU:N	1:A:78:GLU:CD	0.43	2.72	19	2
1:A:16:VAL:HG11	1:A:27:ASP:CB	0.43	2.43	7	3
1:A:59:ILE:HD13	1:A:60:PRO:O	0.43	2.13	15	1
1:A:90:PHE:CE1	1:A:103:VAL:HG23	0.43	2.49	6	1
1:A:57:GLN:NE2	1:A:71:CYS:SG	0.43	2.92	19	2
1:A:107:GLN:HG3	1:A:108:ASP:N	0.42	2.29	2	2
1:A:70:ASP:O	1:A:72:ASP:N	0.42	2.52	6	1
1:A:70:ASP:HB2	1:A:74:GLY:O	0.42	2.14	6	1
1:A:18:SER:O	1:A:21:LYS:CD	0.42	2.67	9	3
1:A:69:ASN:ND2	1:A:69:ASN:C	0.42	2.72	6	1
1:A:70:ASP:HB2	1:A:76:ASP:OD1	0.42	2.13	2	1
1:A:78:GLU:O	1:A:78:GLU:OE1	0.42	2.38	3	1
1:A:105:ASN:OD1	1:A:105:ASN:N	0.42	2.53	3	2
1:A:78:GLU:O	1:A:78:GLU:OE2	0.42	2.38	19	1
1:A:43:THR:OG1	1:A:58:CYS:CB	0.42	2.68	4	3
1:A:77:GLU:O	1:A:78:GLU:C	0.42	2.56	12	1
1:A:49:ILE:HD12	1:A:61:VAL:HB	0.42	1.92	13	1
1:A:24:GLY:C	1:A:46:ILE:HD11	0.42	2.35	12	1
1:A:59:ILE:HD11	1:A:77:GLU:OE1	0.42	2.15	2	1
1:A:39:CYS:O	1:A:56:THR:HG23	0.41	2.14	2	1
1:A:24:GLY:CA	1:A:45:ARG:O	0.41	2.68	6	2
1:A:46:ILE:HG23	1:A:47:HIS:N	0.41	2.30	14	1
1:A:59:ILE:HD11	1:A:69:ASN:OD1	0.41	2.16	4	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:66:ASP:OD1	1:A:66:ASP:N	0.41	2.53	6	1
1:A:70:ASP:OD2	1:A:76:ASP:OD2	0.41	2.39	11	5
1:A:70:ASP:O	1:A:74:GLY:CA	0.41	2.69	6	1
1:A:45:ARG:O	1:A:46:ILE:CB	0.41	2.69	11	2
1:A:46:ILE:HG22	1:A:47:HIS:N	0.41	2.30	10	1
1:A:7:ASP:CG	1:A:8:PHE:N	0.41	2.73	20	1
1:A:77:GLU:CD	1:A:77:GLU:N	0.40	2.74	3	1
1:A:58:CYS:O	1:A:58:CYS:SG	0.40	2.78	12	2
1:A:63:TRP:O	1:A:77:GLU:CG	0.40	2.69	7	3
1:A:59:ILE:HD11	1:A:69:ASN:ND2	0.40	2.31	7	1
1:A:90:PHE:O	1:A:97:CYS:HB2	0.40	2.16	16	1
1:A:21:LYS:O	1:A:22:CYS:C	0.40	2.60	19	1
1:A:78:GLU:N	1:A:78:GLU:OE1	0.40	2.55	19	1
1:A:14:GLN:NE2	1:A:27:ASP:O	0.40	2.54	7	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	106/121 (88%)	79±2 (75±2%)	16±2 (15±2%)	11±2 (10±2%)	1 9
All	All	2120/2420 (88%)	1585 (75%)	316 (15%)	219 (10%)	1 9

All 24 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	21	LYS	20
1	A	40	HIS	20
1	A	41	MET	20
1	A	104	CYS	20
1	A	18	SER	18
1	A	22	CYS	16
1	A	46	ILE	15
1	A	71	CYS	15

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	82	ASN	13
1	A	5	GLU	8
1	A	61	VAL	7
1	A	81	GLY	7
1	A	103	VAL	7
1	A	44	CYS	6
1	A	26	PRO	5
1	A	87	PRO	5
1	A	17	PRO	5
1	A	7	ASP	4
1	A	36	PRO	2
1	A	79	ASN	2
1	A	72	ASP	1
1	A	73	SER	1
1	A	75	GLU	1
1	A	3	CYS	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	95/108 (88%)	58±4 (61±4%)	37±4 (39±4%)	0 5
All	All	1900/2160 (88%)	1158 (61%)	742 (39%)	0 5

All 80 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	11	ASN	20
1	A	14	GLN	20
1	A	22	CYS	20
1	A	27	ASP	20
1	A	54	HIS	20
1	A	84	THR	20
1	A	101	ASN	20
1	A	108	ASP	20
1	A	104	CYS	19

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	58	CYS	18
1	A	70	ASP	18
1	A	35	SER	17
1	A	43	THR	17
1	A	65	CYS	17
1	A	16	VAL	17
1	A	41	MET	16
1	A	79	ASN	16
1	A	69	ASN	16
1	A	78	GLU	15
1	A	107	GLN	15
1	A	49	ILE	14
1	A	97	CYS	14
1	A	72	ASP	13
1	A	30	ASP	13
1	A	102	PHE	13
1	A	19	ARG	12
1	A	21	LYS	12
1	A	48	GLU	12
1	A	90	PHE	12
1	A	56	THR	11
1	A	103	VAL	11
1	A	51	CYS	10
1	A	59	ILE	10
1	A	73	SER	10
1	A	62	SER	10
1	A	85	CYS	10
1	A	86	SER	10
1	A	93	SER	9
1	A	91	THR	9
1	A	42	ARG	9
1	A	47	HIS	8
1	A	94	SER	8
1	A	66	ASP	8
1	A	55	SER	7
1	A	89	GLU	7
1	A	100	ARG	7
1	A	7	ASP	7
1	A	37	GLU	6
1	A	46	ILE	6
1	A	18	SER	6
1	A	40	HIS	6

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	45	ARG	6
1	A	44	CYS	6
1	A	75	GLU	5
1	A	50	SER	5
1	A	71	CYS	5
1	A	32	SER	5
1	A	28	CYS	3
1	A	76	ASP	3
1	A	88	ASP	3
1	A	92	CYS	3
1	A	99	SER	3
1	A	10	CYS	3
1	A	12	ASN	3
1	A	5	GLU	3
1	A	80	CYS	3
1	A	29	GLU	2
1	A	77	GLU	2
1	A	96	ARG	2
1	A	33	ASP	2
1	A	61	VAL	2
1	A	98	ILE	2
1	A	6	SER	2
1	A	39	CYS	2
1	A	82	ASN	1
1	A	15	CYS	1
1	A	83	ILE	1
1	A	64	ARG	1
1	A	57	GLN	1
1	A	68	GLU	1

6.3.3 RNA [i](#)

There are no RNA molecules in this entry.

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

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

6.5 Carbohydrates [i](#)

There are no monosaccharides in this entry.

6.6 Ligand geometry [i](#)

Of 3 ligands modelled in this entry, 3 are monoatomic - leaving 0 for Mogul analysis.

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 84% for the well-defined parts and 84% for the entire structure.

7.1 Chemical shift list 1

File name: working_cs.cif

Chemical shift list name: *Final_CS_2*

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	1174
Number of shifts mapped to atoms	1174
Number of unparsed shifts	0
Number of shifts with mapping errors	0
Number of shifts with mapping warnings	0
Number of shift outliers (ShiftChecker)	1

7.1.2 Chemical shift referencing i

The following table shows the suggested chemical shift referencing corrections.

Nucleus	# values	Correction \pm precision, ppm	Suggested action
¹³ C _{α}	120	0.37 \pm 0.22	None needed (< 0.5 ppm)
¹³ C _{β}	109	0.45 \pm 0.19	None needed (< 0.5 ppm)
¹³ C'	103	0.34 \pm 0.12	None needed (< 0.5 ppm)
¹⁵ N	112	0.31 \pm 0.39	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 84%, i.e. 1032 atoms were assigned a chemical shift out of a possible 1232. 0 out of 4 assigned methyl groups (LEU and VAL) were assigned stereospecifically.

	Total	¹ H	¹³ C	¹⁵ N
Backbone	510/529 (96%)	213/216 (99%)	197/212 (93%)	100/101 (99%)
Sidechain	518/628 (82%)	351/394 (89%)	156/204 (76%)	11/30 (37%)

Continued on next page...

Continued from previous page...

	Total	¹H	¹³C	¹⁵N
Aromatic	4/75 (5%)	2/39 (5%)	0/31 (0%)	2/5 (40%)
Overall	1032/1232 (84%)	566/649 (87%)	353/447 (79%)	113/136 (83%)

The following table shows the completeness of the chemical shift assignments for the full structure. The overall completeness is 84%, i.e. 1163 atoms were assigned a chemical shift out of a possible 1386. 0 out of 5 assigned methyl groups (LEU and VAL) were assigned stereospecifically.

	Total	¹H	¹³C	¹⁵N
Backbone	575/603 (95%)	240/246 (98%)	223/242 (92%)	112/115 (97%)
Sidechain	584/708 (82%)	393/444 (89%)	180/233 (77%)	11/31 (35%)
Aromatic	4/75 (5%)	2/39 (5%)	0/31 (0%)	2/5 (40%)
Overall	1163/1386 (84%)	635/729 (87%)	403/506 (80%)	125/151 (83%)

7.1.4 Statistically unusual chemical shifts [i](#)

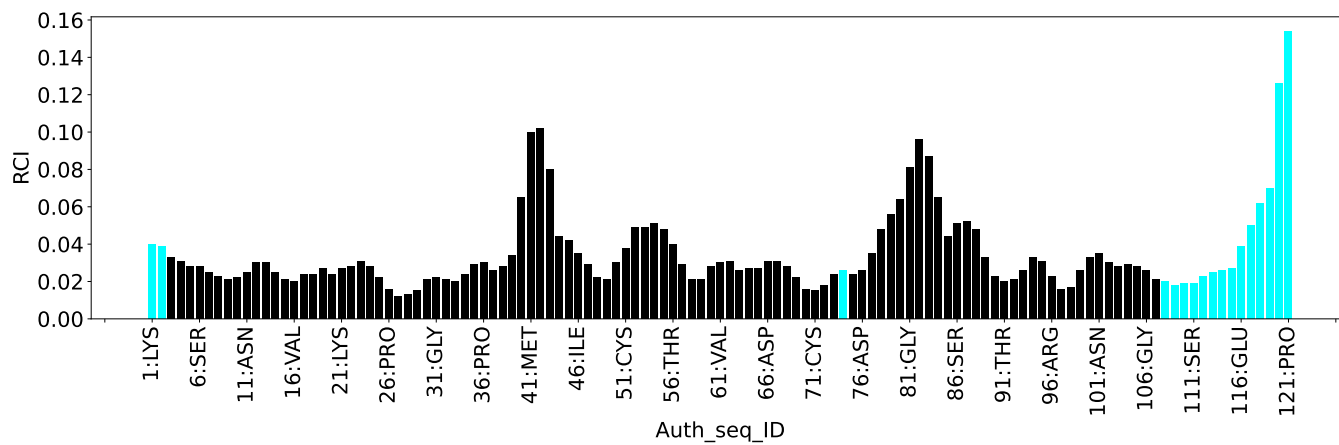
The following table lists the statistically unusual chemical shifts. These are statistical measures, and large deviations from the mean do not necessarily imply incorrect assignments. Molecules containing paramagnetic centres or hemes are expected to give rise to anomalous chemical shifts.

List Id	Chain	Res	Type	Atom	Shift, ppm	Expected range, ppm	Z-score
1	A	60	PRO	HD3	1.61	1.76 – 5.48	-5.4

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

8.1 Conformationally restricting restraints

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

Description	Value
Total distance restraints	1352
Intra-residue ($ i-j =0$)	322
Sequential ($ i-j =1$)	429
Medium range ($ i-j >1$ and $ i-j <5$)	316
Long range ($ i-j \geq 5$)	270
Inter-chain	0
Hydrogen bond restraints	15
Disulfide bond restraints	0
Total dihedral-angle restraints	182
Number of unmapped restraints	0
Number of restraints per residue	12.7
Number of long range restraints per residue ¹	2.3

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

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

8.2.1 Average number of distance violations per model

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

Bins (Å)	Average number of violations per model	Max (Å)
0.1-0.2 (Small)	114.8	0.2
0.2-0.5 (Medium)	174.2	0.5
>0.5 (Large)	67.6	1.95

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

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

Bins (°)	Average number of violations per model	Max (°)
1.0-10.0 (Small)	37.6	10.0
10.0-20.0 (Medium)	11.4	19.9
>20.0 (Large)	0.5	29.1

9 Distance violation analysis i

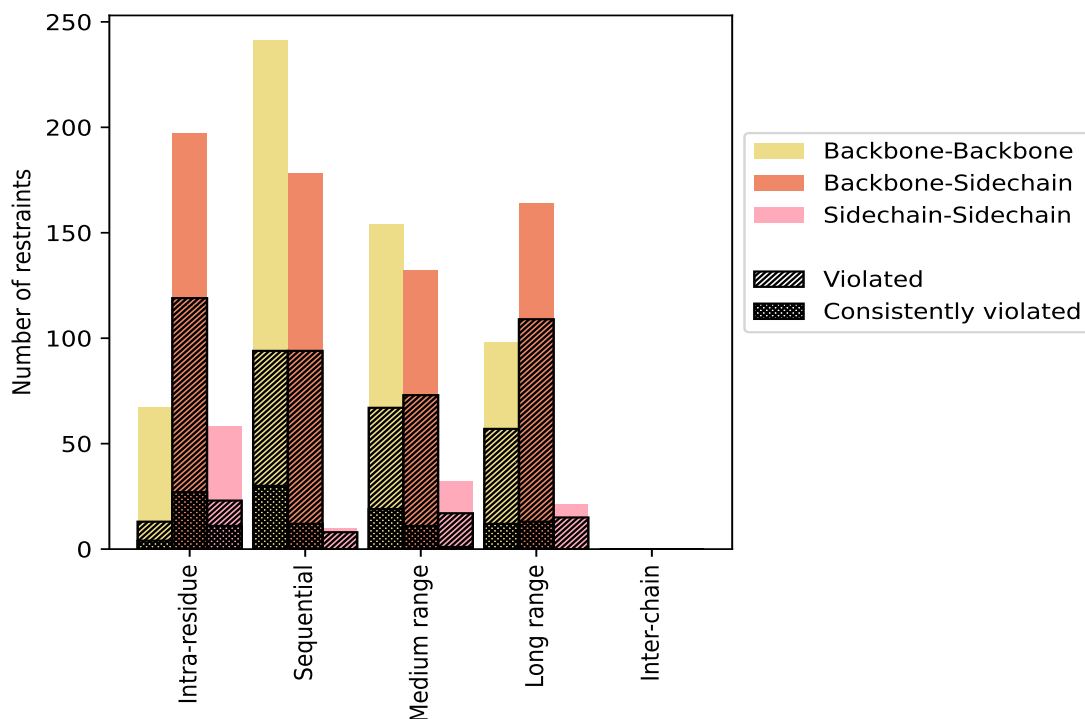
9.1 Summary of distance violations i

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.

Restrains type	Count	% ¹	Violated ³			Consistently Violated ⁴		
			Count	% ²	% ¹	Count	% ²	% ¹
Intra-residue ($i-j =0$)	322	23.8	155	48.1	11.5	42	13.0	3.1
Backbone-Backbone	67	5.0	13	19.4	1.0	4	6.0	0.3
Backbone-Sidechain	197	14.6	119	60.4	8.8	27	13.7	2.0
Sidechain-Sidechain	58	4.3	23	39.7	1.7	11	19.0	0.8
Sequential ($i-j =1$)	429	31.7	196	45.7	14.5	42	9.8	3.1
Backbone-Backbone	241	17.8	94	39.0	7.0	30	12.4	2.2
Backbone-Sidechain	178	13.2	94	52.8	7.0	12	6.7	0.9
Sidechain-Sidechain	10	0.7	8	80.0	0.6	0	0.0	0.0
Medium range ($i-j >1$ & $i-j <5$)	316	23.4	156	49.4	11.5	31	9.8	2.3
Backbone-Backbone	152	11.2	66	43.4	4.9	19	12.5	1.4
Backbone-Sidechain	132	9.8	73	55.3	5.4	11	8.3	0.8
Sidechain-Sidechain	32	2.4	17	53.1	1.3	1	3.1	0.1
Long range ($i-j \geq 5$)	270	20.0	174	64.4	12.9	24	8.9	1.8
Backbone-Backbone	85	6.3	50	58.8	3.7	11	12.9	0.8
Backbone-Sidechain	164	12.1	109	66.5	8.1	13	7.9	1.0
Sidechain-Sidechain	21	1.6	15	71.4	1.1	0	0.0	0.0
Inter-chain	0	0.0	0	0.0	0.0	0	0.0	0.0
Backbone-Backbone	0	0.0	0	0.0	0.0	0	0.0	0.0
Backbone-Sidechain	0	0.0	0	0.0	0.0	0	0.0	0.0
Sidechain-Sidechain	0	0.0	0	0.0	0.0	0	0.0	0.0
Hydrogen bond	15	1.1	8	53.3	0.6	1	6.7	0.1
Disulfide bond	0	0.0	0	0.0	0.0	0	0.0	0.0
Total	1352	100.0	689	51.0	51.0	140	10.4	10.4
Backbone-Backbone	560	41.4	231	41.2	17.1	65	11.6	4.8
Backbone-Sidechain	671	49.6	395	58.9	29.2	63	9.4	4.7
Sidechain-Sidechain	121	8.9	63	52.1	4.7	12	9.9	0.9

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 disulfid 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					Total	Mean (Å)	Max (Å)	SD ⁶ (Å)	Median (Å)
	IR ¹	SQ ²	MR ³	LR ⁴	IC ⁵					
1	91	99	81	87	0	358	0.34	1.94	0.23	0.28
2	86	97	80	87	0	350	0.34	1.94	0.23	0.28
3	95	92	89	78	0	354	0.34	1.94	0.23	0.27
4	86	99	90	93	0	368	0.34	1.94	0.22	0.28
5	87	98	80	80	0	345	0.35	1.94	0.23	0.29
6	92	97	77	98	0	364	0.34	1.94	0.22	0.26
7	83	102	82	81	0	348	0.35	1.94	0.23	0.28
8	97	105	84	83	0	369	0.35	1.94	0.24	0.28
9	81	102	85	86	0	354	0.35	1.94	0.23	0.28
10	88	91	83	83	0	345	0.36	1.94	0.24	0.29
11	86	109	79	86	0	360	0.34	1.94	0.23	0.28

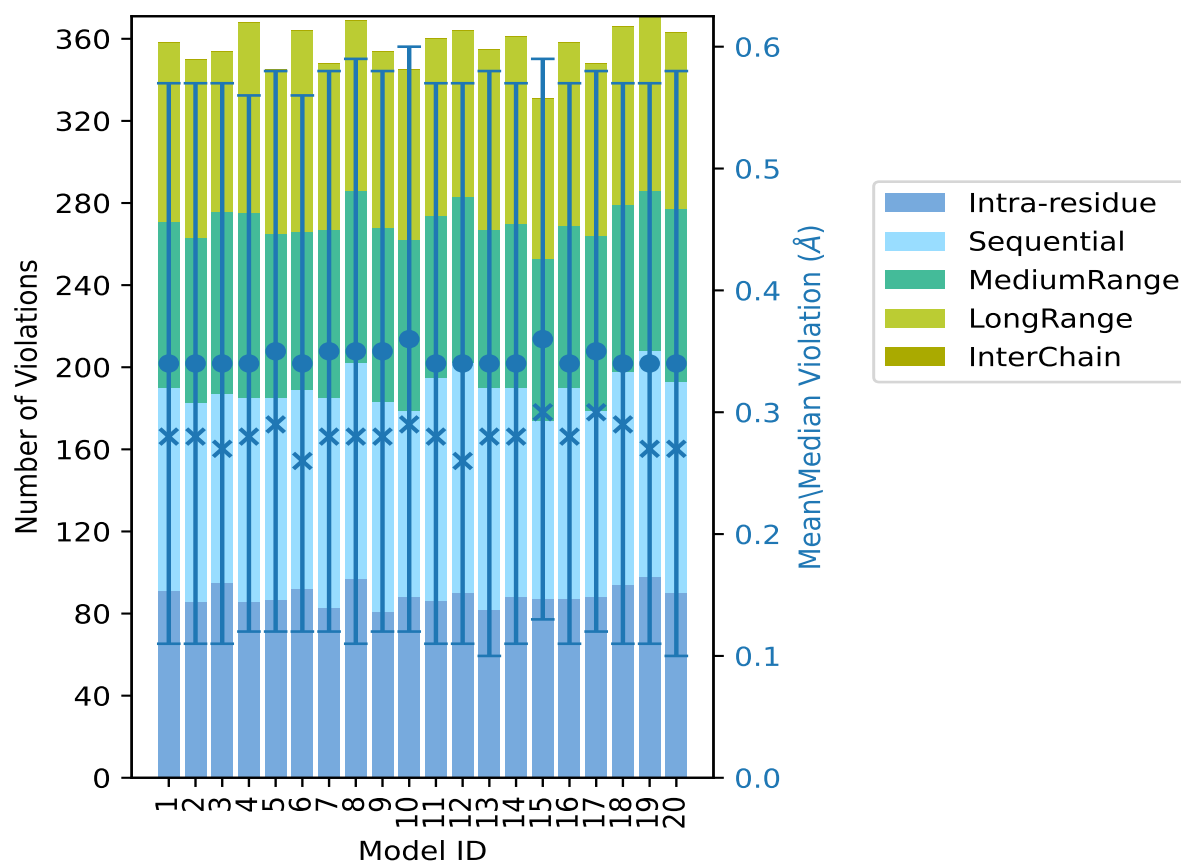
Continued on next page...

Continued from previous page...

Model ID	Number of violations					Total	Mean (Å)	Max (Å)	SD ⁶ (Å)	Median (Å)
	IR ¹	SQ ²	MR ³	LR ⁴	IC ⁵					
12	90	112	81	81	0	364	0.34	1.94	0.23	0.26
13	82	108	77	88	0	355	0.34	1.95	0.24	0.28
14	88	102	80	91	0	361	0.34	1.94	0.23	0.28
15	87	87	79	78	0	331	0.36	1.94	0.23	0.3
16	87	103	79	89	0	358	0.34	1.94	0.23	0.28
17	88	91	85	84	0	348	0.35	1.94	0.23	0.3
18	94	104	81	87	0	366	0.34	1.94	0.23	0.29
19	98	110	78	85	0	371	0.34	1.94	0.23	0.27
20	90	103	84	86	0	363	0.34	1.94	0.24	0.27

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

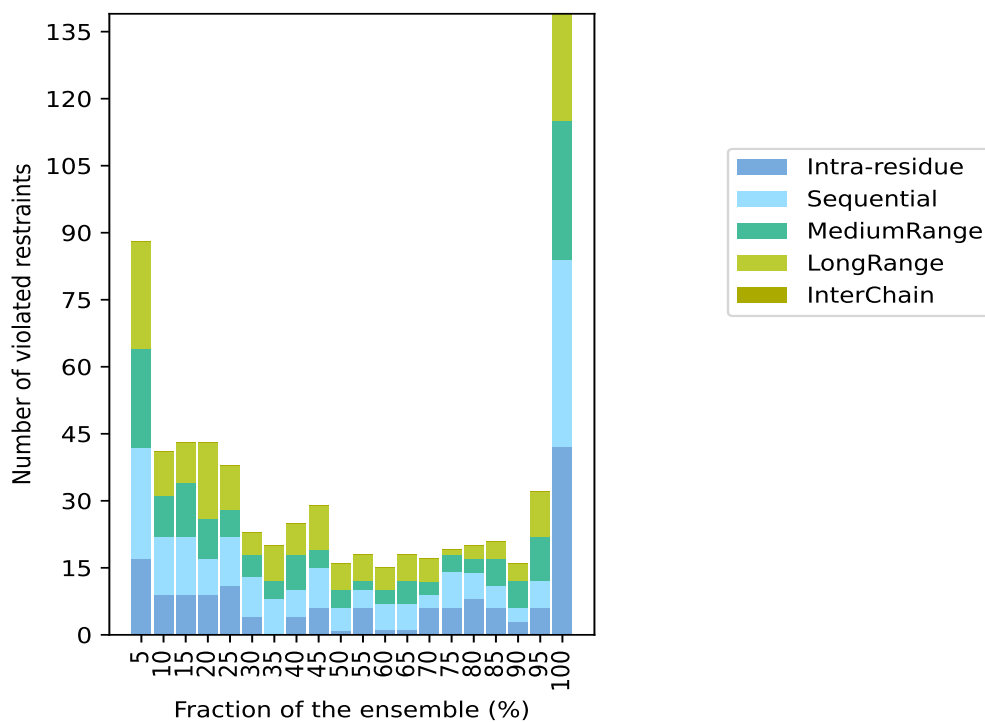
9.3 Distance violation statistics for the ensemble

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, 656(IR:167, SQ:233, MR:160, LR:96, IC:0) restraints are not violated in the ensemble.

Number of violated restraints						Fraction of the ensemble	
IR ¹	SQ ²	MR ³	LR ⁴	IC ⁵	Total	Count ⁶	%
17	25	22	24	0	88	1	5.0
9	13	9	10	0	41	2	10.0
9	13	12	9	0	43	3	15.0
9	8	9	17	0	43	4	20.0
11	11	6	10	0	38	5	25.0
4	9	5	5	0	23	6	30.0
0	8	4	8	0	20	7	35.0
4	6	8	7	0	25	8	40.0
6	9	4	10	0	29	9	45.0
1	5	4	6	0	16	10	50.0
6	4	2	6	0	18	11	55.0
1	6	3	5	0	15	12	60.0
1	6	5	6	0	18	13	65.0
6	3	3	5	0	17	14	70.0
6	8	4	1	0	19	15	75.0
8	6	3	3	0	20	16	80.0
6	5	6	4	0	21	17	85.0
3	3	6	4	0	16	18	90.0
6	6	10	10	0	32	19	95.0
42	42	31	24	0	139	20	100.0

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

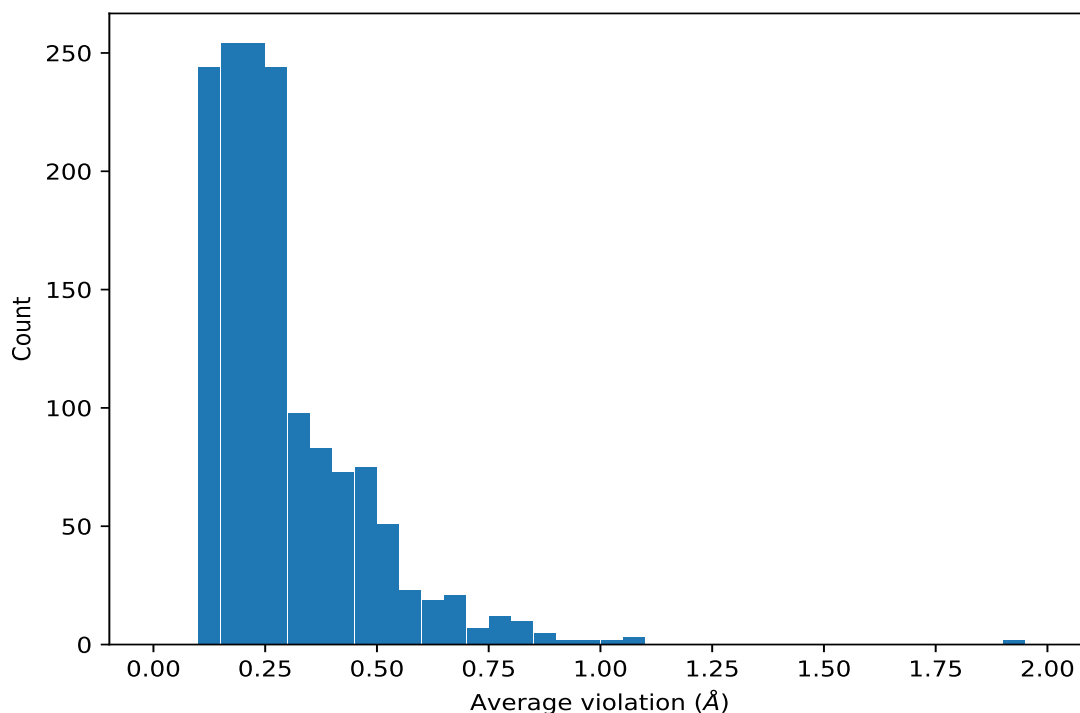
9.3.1 Bar graph : Distance violation statistics for the ensemble [i](#)



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)
(2,384)	1:A:5:GLU:HB2	1:A:5:GLU:HB3	20	1.94	0.0	1.94
(2,384)	1:A:5:GLU:HB3	1:A:5:GLU:HB2	20	1.94	0.0	1.94
(2,145)	1:A:43:THR:HA	1:A:58:CYS:H	20	1.05	0.07	1.05
(2,145)	1:A:56:THR:HB	1:A:58:CYS:H	20	1.05	0.07	1.05
(2,63)	1:A:80:CYS:HA	1:A:83:ILE:H	20	0.98	0.02	0.97
(2,63)	1:A:82:ASN:HA	1:A:83:ILE:H	20	0.98	0.02	0.97
(1,713)	1:A:14:GLN:HA	1:A:12:ASN:H	20	0.94	0.08	0.94
(1,4)	1:A:55:SER:H	1:A:54:HIS:H	20	0.93	0.05	0.93
(1,455)	1:A:76:ASP:HB2	1:A:76:ASP:H	20	0.89	0.07	0.9
(1,455)	1:A:76:ASP:HB2	1:A:76:ASP:H	20	0.89	0.07	0.9
(1,455)	1:A:76:ASP:HB3	1:A:76:ASP:H	20	0.89	0.07	0.9
(1,455)	1:A:76:ASP:HB3	1:A:76:ASP:H	20	0.89	0.07	0.9
(1,191)	1:A:100:ARG:HA	1:A:101:ASN:H	20	0.86	0.03	0.85
(2,215)	1:A:6:SER:H	1:A:5:GLU:H	20	0.83	0.05	0.84
(2,215)	1:A:7:ASP:H	1:A:5:GLU:H	20	0.83	0.05	0.84
(2,357)	1:A:69:ASN:HA	1:A:69:ASN:HD21	20	0.82	0.13	0.8

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)	Median (Å)
(2,357)	1:A:70:ASP:HA	1:A:69:ASN:HD21	20	0.82	0.13	0.8
(2,379)	1:A:12:ASN:HB2	1:A:12:ASN:HD21	20	0.8	0.0	0.8
(2,379)	1:A:12:ASN:HB3	1:A:12:ASN:HD21	20	0.8	0.0	0.8
(2,379)	1:A:13:GLY:HA2	1:A:12:ASN:HD21	20	0.8	0.0	0.8
(2,379)	1:A:13:GLY:HA3	1:A:12:ASN:HD21	20	0.8	0.0	0.8
(1,429)	1:A:69:ASN:HA	1:A:69:ASN:H	20	0.8	0.01	0.8
(2,354)	1:A:51:CYS:HA	1:A:69:ASN:H	20	0.79	0.03	0.8
(2,354)	1:A:68:GLU:HA	1:A:69:ASN:H	20	0.79	0.03	0.8
(1,584)	1:A:27:ASP:HB2	1:A:27:ASP:H	20	0.78	0.07	0.79
(1,584)	1:A:27:ASP:HB3	1:A:27:ASP:H	20	0.78	0.07	0.79
(2,45)	1:A:21:LYS:HB2	1:A:22:CYS:H	20	0.77	0.04	0.78
(2,45)	1:A:21:LYS:HB3	1:A:22:CYS:H	20	0.77	0.04	0.78
(2,45)	1:A:42:ARG:HB2	1:A:22:CYS:H	20	0.77	0.04	0.78
(2,45)	1:A:42:ARG:HB3	1:A:22:CYS:H	20	0.77	0.04	0.78
(1,688)	1:A:69:ASN:H	1:A:69:ASN:HD22	20	0.76	0.26	0.92
(1,150)	1:A:104:CYS:H	1:A:106:GLY:H	20	0.76	0.05	0.76
(1,459)	1:A:70:ASP:HA	1:A:76:ASP:H	20	0.75	0.25	0.84
(2,330)	1:A:92:CYS:HA	1:A:93:SER:H	20	0.72	0.14	0.72
(2,330)	1:A:111:SER:HG	1:A:93:SER:H	20	0.72	0.14	0.72
(2,330)	1:A:114:SER:HG	1:A:93:SER:H	20	0.72	0.14	0.72
(1,692)	1:A:8:PHE:HB2	1:A:8:PHE:H	20	0.71	0.04	0.71
(1,692)	1:A:8:PHE:HB3	1:A:8:PHE:H	20	0.71	0.04	0.71
(1,824)	1:A:118:ASP:H	1:A:116:GLU:H	20	0.7	0.1	0.73
(2,136)	1:A:12:ASN:HB2	1:A:14:GLN:H	20	0.69	0.02	0.7
(2,136)	1:A:12:ASN:HB3	1:A:14:GLN:H	20	0.69	0.02	0.7
(2,136)	1:A:13:GLY:HA2	1:A:14:GLN:H	20	0.69	0.02	0.7
(2,136)	1:A:13:GLY:HA3	1:A:14:GLN:H	20	0.69	0.02	0.7
(1,923)	1:A:8:PHE:HB2	1:A:16:VAL:HA	20	0.69	0.14	0.7
(1,700)	1:A:69:ASN:HB2	1:A:69:ASN:H	20	0.68	0.04	0.68
(1,700)	1:A:69:ASN:HB3	1:A:69:ASN:H	20	0.68	0.04	0.68
(2,75)	1:A:107:GLN:HA	1:A:108:ASP:H	20	0.67	0.06	0.69
(2,75)	1:A:108:ASP:HA	1:A:108:ASP:H	20	0.67	0.06	0.69
(2,75)	1:A:109:ASP:HA	1:A:108:ASP:H	20	0.67	0.06	0.69
(1,502)	1:A:34:GLU:HG2	1:A:34:GLU:H	20	0.66	0.06	0.66
(1,502)	1:A:34:GLU:HG3	1:A:34:GLU:H	20	0.66	0.06	0.66
(1,252)	1:A:82:ASN:HB2	1:A:83:ILE:H	20	0.66	0.09	0.68
(1,252)	1:A:82:ASN:HB2	1:A:83:ILE:H	20	0.66	0.09	0.68
(1,252)	1:A:82:ASN:HB3	1:A:83:ILE:H	20	0.66	0.09	0.68
(1,252)	1:A:82:ASN:HB3	1:A:83:ILE:H	20	0.66	0.09	0.68
(1,491)	1:A:22:CYS:H	1:A:24:GLY:H	20	0.65	0.04	0.65
(1,492)	1:A:22:CYS:H	1:A:24:GLY:H	20	0.65	0.04	0.65
(1,391)	1:A:54:HIS:HA	1:A:53:ALA:H	20	0.64	0.04	0.64

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)	Median (Å)
(2,152)	1:A:52:GLY:H	1:A:53:ALA:H	20	0.64	0.06	0.66
(2,152)	1:A:54:HIS:H	1:A:53:ALA:H	20	0.64	0.06	0.66
(2,264)	1:A:42:ARG:HB2	1:A:50:SER:H	20	0.64	0.19	0.57
(2,264)	1:A:42:ARG:HB3	1:A:50:SER:H	20	0.64	0.19	0.57
(2,264)	1:A:49:ILE:HB	1:A:50:SER:H	20	0.64	0.19	0.57
(2,222)	1:A:24:GLY:HA2	1:A:45:ARG:H	20	0.64	0.1	0.64
(2,222)	1:A:24:GLY:HA3	1:A:45:ARG:H	20	0.64	0.1	0.64
(2,222)	1:A:45:ARG:HA	1:A:45:ARG:H	20	0.64	0.1	0.64
(1,898)	1:A:57:GLN:HE22	1:A:71:CYS:H	20	0.62	0.23	0.68
(1,622)	1:A:12:ASN:HB2	1:A:12:ASN:HD21	20	0.62	0.0	0.62
(1,622)	1:A:12:ASN:HB3	1:A:12:ASN:HD21	20	0.62	0.0	0.62
(1,687)	1:A:69:ASN:HD21	1:A:74:GLY:H	20	0.62	0.16	0.6
(1,97)	1:A:98:ILE:HD11	1:A:99:SER:H	20	0.61	0.24	0.47
(1,97)	1:A:98:ILE:HD12	1:A:99:SER:H	20	0.61	0.24	0.47
(1,97)	1:A:98:ILE:HD13	1:A:99:SER:H	20	0.61	0.24	0.47
(2,186)	1:A:64:ARG:HD2	1:A:67:GLY:H	20	0.6	0.01	0.6
(2,186)	1:A:64:ARG:HD3	1:A:67:GLY:H	20	0.6	0.01	0.6
(2,186)	1:A:67:GLY:HA2	1:A:67:GLY:H	20	0.6	0.01	0.6
(2,186)	1:A:67:GLY:HA3	1:A:67:GLY:H	20	0.6	0.01	0.6
(2,131)	1:A:25:ASP:HB2	1:A:27:ASP:H	20	0.58	0.15	0.66
(2,131)	1:A:25:ASP:HB3	1:A:27:ASP:H	20	0.58	0.15	0.66
(2,131)	1:A:33:ASP:HB2	1:A:27:ASP:H	20	0.58	0.15	0.66
(2,131)	1:A:34:GLU:HB3	1:A:27:ASP:H	20	0.58	0.15	0.66
(2,144)	1:A:21:LYS:HB2	1:A:22:CYS:H	20	0.58	0.04	0.59
(2,144)	1:A:21:LYS:HB3	1:A:22:CYS:H	20	0.58	0.04	0.59
(2,144)	1:A:21:LYS:HD2	1:A:22:CYS:H	20	0.58	0.04	0.59
(2,144)	1:A:21:LYS:HD3	1:A:22:CYS:H	20	0.58	0.04	0.59
(2,144)	1:A:34:GLU:HB2	1:A:22:CYS:H	20	0.58	0.04	0.59
(1,430)	1:A:69:ASN:HB2	1:A:69:ASN:H	20	0.58	0.04	0.58
(1,430)	1:A:69:ASN:HB3	1:A:69:ASN:H	20	0.58	0.04	0.58
(1,723)	1:A:23:ASP:H	1:A:21:LYS:HA	20	0.58	0.04	0.57
(2,241)	1:A:12:ASN:HD22	1:A:12:ASN:HD21	20	0.56	0.0	0.56
(2,241)	1:A:14:GLN:HE21	1:A:12:ASN:HD21	20	0.56	0.0	0.56
(1,212)	1:A:96:ARG:H	1:A:92:CYS:HA	20	0.55	0.09	0.56
(1,721)	1:A:21:LYS:HG2	1:A:22:CYS:H	20	0.54	0.08	0.53
(1,721)	1:A:21:LYS:HG3	1:A:22:CYS:H	20	0.54	0.08	0.53
(2,321)	1:A:64:ARG:HB2	1:A:67:GLY:H	20	0.54	0.1	0.5
(2,321)	1:A:64:ARG:HB3	1:A:67:GLY:H	20	0.54	0.1	0.5
(2,321)	1:A:64:ARG:HG2	1:A:67:GLY:H	20	0.54	0.1	0.5
(2,321)	1:A:64:ARG:HG3	1:A:67:GLY:H	20	0.54	0.1	0.5
(2,321)	1:A:68:GLU:HB2	1:A:67:GLY:H	20	0.54	0.1	0.5
(2,321)	1:A:68:GLU:HB3	1:A:67:GLY:H	20	0.54	0.1	0.5

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)	Median (Å)
(1,27)	1:A:118:ASP:H	1:A:117:LEU:H	20	0.54	0.07	0.55
(1,634)	1:A:79:ASN:HD22	1:A:79:ASN:HA	20	0.53	0.07	0.53
(2,62)	1:A:56:THR:HG1	1:A:56:THR:H	20	0.53	0.08	0.52
(2,62)	1:A:56:THR:HG1	1:A:56:THR:H	20	0.53	0.08	0.52
(2,62)	1:A:56:THR:HG21	1:A:56:THR:H	20	0.53	0.08	0.52
(2,62)	1:A:56:THR:HG21	1:A:56:THR:H	20	0.53	0.08	0.52
(2,62)	1:A:56:THR:HG22	1:A:56:THR:H	20	0.53	0.08	0.52
(2,62)	1:A:56:THR:HG22	1:A:56:THR:H	20	0.53	0.08	0.52
(2,62)	1:A:56:THR:HG23	1:A:56:THR:H	20	0.53	0.08	0.52
(2,62)	1:A:56:THR:HG23	1:A:56:THR:H	20	0.53	0.08	0.52
(1,58)	1:A:66:ASP:H	1:A:65:CYS:H	20	0.53	0.04	0.55
(2,275)	1:A:43:THR:HG1	1:A:44:CYS:H	20	0.53	0.07	0.5
(2,275)	1:A:43:THR:HG1	1:A:44:CYS:H	20	0.53	0.07	0.5
(2,275)	1:A:43:THR:HG21	1:A:44:CYS:H	20	0.53	0.07	0.5
(2,275)	1:A:43:THR:HG21	1:A:44:CYS:H	20	0.53	0.07	0.5
(2,275)	1:A:43:THR:HG22	1:A:44:CYS:H	20	0.53	0.07	0.5
(2,275)	1:A:43:THR:HG22	1:A:44:CYS:H	20	0.53	0.07	0.5
(2,275)	1:A:43:THR:HG23	1:A:44:CYS:H	20	0.53	0.07	0.5
(2,275)	1:A:43:THR:HG23	1:A:44:CYS:H	20	0.53	0.07	0.5
(2,275)	1:A:56:THR:HG21	1:A:44:CYS:H	20	0.53	0.07	0.5
(2,275)	1:A:56:THR:HG22	1:A:44:CYS:H	20	0.53	0.07	0.5
(2,275)	1:A:56:THR:HG23	1:A:44:CYS:H	20	0.53	0.07	0.5
(2,207)	1:A:79:ASN:HB2	1:A:79:ASN:HD22	20	0.52	0.11	0.48
(2,207)	1:A:97:CYS:HB2	1:A:79:ASN:HD22	20	0.52	0.11	0.48
(1,583)	1:A:40:HIS:HA	1:A:38:GLN:H	20	0.51	0.07	0.51
(2,212)	1:A:88:ASP:H	1:A:86:SER:H	20	0.51	0.08	0.51
(2,239)	1:A:64:ARG:HB2	1:A:69:ASN:H	20	0.5	0.12	0.47
(2,239)	1:A:64:ARG:HB3	1:A:69:ASN:H	20	0.5	0.12	0.47
(2,239)	1:A:64:ARG:HG2	1:A:69:ASN:H	20	0.5	0.12	0.47
(2,239)	1:A:64:ARG:HG3	1:A:69:ASN:H	20	0.5	0.12	0.47
(2,239)	1:A:68:GLU:HB2	1:A:69:ASN:H	20	0.5	0.12	0.47
(2,239)	1:A:68:GLU:HB3	1:A:69:ASN:H	20	0.5	0.12	0.47
(2,390)	1:A:17:PRO:HB2	1:A:19:ARG:H	20	0.5	0.07	0.5
(2,390)	1:A:17:PRO:HB3	1:A:19:ARG:H	20	0.5	0.07	0.5
(2,390)	1:A:17:PRO:HG2	1:A:19:ARG:H	20	0.5	0.07	0.5
(2,390)	1:A:17:PRO:HG3	1:A:19:ARG:H	20	0.5	0.07	0.5
(1,587)	1:A:14:GLN:H	1:A:12:ASN:H	20	0.49	0.05	0.49
(2,184)	1:A:16:VAL:HG11	1:A:15:CYS:H	20	0.47	0.13	0.45
(2,184)	1:A:16:VAL:HG11	1:A:15:CYS:H	20	0.47	0.13	0.45
(2,184)	1:A:16:VAL:HG11	1:A:15:CYS:H	20	0.47	0.13	0.45
(2,184)	1:A:16:VAL:HG12	1:A:15:CYS:H	20	0.47	0.13	0.45
(2,184)	1:A:16:VAL:HG12	1:A:15:CYS:H	20	0.47	0.13	0.45

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)	Median (Å)
(2,184)	1:A:16:VAL:HG12	1:A:15:CYS:H	20	0.47	0.13	0.45
(2,184)	1:A:16:VAL:HG13	1:A:15:CYS:H	20	0.47	0.13	0.45
(2,184)	1:A:16:VAL:HG13	1:A:15:CYS:H	20	0.47	0.13	0.45
(2,184)	1:A:16:VAL:HG13	1:A:15:CYS:H	20	0.47	0.13	0.45
(2,184)	1:A:16:VAL:HG21	1:A:15:CYS:H	20	0.47	0.13	0.45
(2,184)	1:A:16:VAL:HG21	1:A:15:CYS:H	20	0.47	0.13	0.45
(2,184)	1:A:16:VAL:HG21	1:A:15:CYS:H	20	0.47	0.13	0.45
(2,184)	1:A:16:VAL:HG22	1:A:15:CYS:H	20	0.47	0.13	0.45
(2,184)	1:A:16:VAL:HG22	1:A:15:CYS:H	20	0.47	0.13	0.45
(2,184)	1:A:16:VAL:HG22	1:A:15:CYS:H	20	0.47	0.13	0.45
(2,184)	1:A:16:VAL:HG23	1:A:15:CYS:H	20	0.47	0.13	0.45
(2,184)	1:A:16:VAL:HG23	1:A:15:CYS:H	20	0.47	0.13	0.45
(2,184)	1:A:16:VAL:HG23	1:A:15:CYS:H	20	0.47	0.13	0.45
(1,289)	1:A:8:PHE:HA	1:A:8:PHE:H	20	0.47	0.06	0.48
(1,619)	1:A:12:ASN:HD21	1:A:12:ASN:HD22	20	0.46	0.0	0.46
(1,608)	1:A:14:GLN:HG2	1:A:14:GLN:HE21	20	0.46	0.05	0.46
(1,608)	1:A:14:GLN:HG3	1:A:14:GLN:HE21	20	0.46	0.05	0.46
(1,555)	1:A:103:VAL:HG11	1:A:104:CYS:H	20	0.45	0.11	0.42
(1,555)	1:A:103:VAL:HG12	1:A:104:CYS:H	20	0.45	0.11	0.42
(1,555)	1:A:103:VAL:HG13	1:A:104:CYS:H	20	0.45	0.11	0.42
(1,555)	1:A:103:VAL:HG21	1:A:104:CYS:H	20	0.45	0.11	0.42
(1,555)	1:A:103:VAL:HG22	1:A:104:CYS:H	20	0.45	0.11	0.42
(1,555)	1:A:103:VAL:HG23	1:A:104:CYS:H	20	0.45	0.11	0.42
(1,657)	1:A:105:ASN:HA	1:A:105:ASN:HD22	20	0.44	0.03	0.44
(1,480)	1:A:10:CYS:HB2	1:A:10:CYS:H	20	0.44	0.13	0.5
(1,480)	1:A:10:CYS:HB3	1:A:10:CYS:H	20	0.44	0.13	0.5
(1,140)	1:A:108:ASP:H	1:A:108:ASP:HB2	20	0.43	0.05	0.44
(1,140)	1:A:108:ASP:H	1:A:108:ASP:HB3	20	0.43	0.05	0.44
(4,8)	1:A:8:PHE:O	1:A:16:VAL:H	20	0.43	0.11	0.42
(1,73)	1:A:65:CYS:HB2	1:A:65:CYS:H	20	0.42	0.05	0.4
(1,73)	1:A:65:CYS:HB3	1:A:65:CYS:H	20	0.42	0.05	0.4
(1,436)	1:A:73:SER:H	1:A:72:ASP:H	20	0.42	0.12	0.4
(1,706)	1:A:45:ARG:HB2	1:A:45:ARG:H	20	0.41	0.06	0.4
(1,706)	1:A:45:ARG:HB3	1:A:45:ARG:H	20	0.41	0.06	0.4
(1,710)	1:A:8:PHE:H	1:A:21:LYS:HD2	20	0.41	0.11	0.4
(1,710)	1:A:8:PHE:H	1:A:21:LYS:HD3	20	0.41	0.11	0.4
(1,732)	1:A:31:GLY:HA2	1:A:32:SER:H	20	0.41	0.02	0.4
(1,732)	1:A:31:GLY:HA3	1:A:32:SER:H	20	0.41	0.02	0.4
(1,888)	1:A:49:ILE:HA	1:A:61:VAL:H	20	0.41	0.15	0.38
(1,740)	1:A:35:SER:H	1:A:56:THR:HG1	20	0.41	0.17	0.34
(1,740)	1:A:35:SER:H	1:A:56:THR:HG21	20	0.41	0.17	0.34
(1,740)	1:A:35:SER:H	1:A:56:THR:HG22	20	0.41	0.17	0.34

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)	Median (Å)
(1,740)	1:A:35:SER:H	1:A:56:THR:HG23	20	0.41	0.17	0.34
(1,772)	1:A:68:GLU:H	1:A:64:ARG:H	20	0.4	0.12	0.39
(1,642)	1:A:82:ASN:HA	1:A:82:ASN:HD22	20	0.4	0.08	0.38
(1,327)	1:A:22:CYS:HB2	1:A:22:CYS:H	20	0.4	0.06	0.42
(1,327)	1:A:22:CYS:HB3	1:A:22:CYS:H	20	0.4	0.06	0.42
(1,643)	1:A:82:ASN:HB2	1:A:82:ASN:HD21	20	0.39	0.03	0.4
(1,643)	1:A:82:ASN:HB2	1:A:82:ASN:HD21	20	0.39	0.03	0.4
(1,643)	1:A:82:ASN:HB3	1:A:82:ASN:HD21	20	0.39	0.03	0.4
(1,643)	1:A:82:ASN:HB3	1:A:82:ASN:HD21	20	0.39	0.03	0.4
(1,398)	1:A:54:HIS:HB2	1:A:54:HIS:H	20	0.38	0.01	0.39
(1,398)	1:A:54:HIS:HB3	1:A:54:HIS:H	20	0.38	0.01	0.39
(2,377)	1:A:33:ASP:HB2	1:A:33:ASP:H	20	0.38	0.12	0.35
(2,377)	1:A:33:ASP:HB3	1:A:33:ASP:H	20	0.38	0.12	0.35
(2,377)	1:A:34:GLU:HB2	1:A:33:ASP:H	20	0.38	0.12	0.35
(2,377)	1:A:34:GLU:HB3	1:A:33:ASP:H	20	0.38	0.12	0.35
(1,298)	1:A:14:GLN:H	1:A:11:ASN:H	20	0.38	0.1	0.38
(2,76)	1:A:28:CYS:HB2	1:A:32:SER:H	20	0.37	0.08	0.38
(2,76)	1:A:28:CYS:HB3	1:A:32:SER:H	20	0.37	0.08	0.38
(2,76)	1:A:29:GLU:HA	1:A:32:SER:H	20	0.37	0.08	0.38
(2,76)	1:A:32:SER:HA	1:A:32:SER:H	20	0.37	0.08	0.38
(2,76)	1:A:32:SER:HB2	1:A:32:SER:H	20	0.37	0.08	0.38
(2,76)	1:A:32:SER:HB3	1:A:32:SER:H	20	0.37	0.08	0.38
(2,76)	1:A:33:ASP:HA	1:A:32:SER:H	20	0.37	0.08	0.38
(2,76)	1:A:35:SER:HB2	1:A:32:SER:H	20	0.37	0.08	0.38
(2,76)	1:A:35:SER:HB3	1:A:32:SER:H	20	0.37	0.08	0.38
(1,376)	1:A:49:ILE:HA	1:A:49:ILE:H	20	0.37	0.02	0.37
(1,693)	1:A:21:LYS:HD2	1:A:21:LYS:H	20	0.37	0.11	0.34
(1,693)	1:A:21:LYS:HD3	1:A:21:LYS:H	20	0.37	0.11	0.34
(2,80)	1:A:41:MET:HA	1:A:56:THR:H	20	0.36	0.16	0.29
(2,80)	1:A:42:ARG:HA	1:A:56:THR:H	20	0.36	0.16	0.29
(2,80)	1:A:56:THR:HB	1:A:56:THR:H	20	0.36	0.16	0.29
(1,158)	1:A:104:CYS:HA	1:A:105:ASN:H	20	0.36	0.05	0.36
(2,114)	1:A:16:VAL:HG11	1:A:16:VAL:H	20	0.36	0.08	0.35
(2,114)	1:A:16:VAL:HG12	1:A:16:VAL:H	20	0.36	0.08	0.35
(2,114)	1:A:16:VAL:HG13	1:A:16:VAL:H	20	0.36	0.08	0.35
(2,114)	1:A:16:VAL:HG21	1:A:16:VAL:H	20	0.36	0.08	0.35
(2,114)	1:A:16:VAL:HG21	1:A:16:VAL:H	20	0.36	0.08	0.35
(2,114)	1:A:16:VAL:HG22	1:A:16:VAL:H	20	0.36	0.08	0.35
(2,114)	1:A:16:VAL:HG22	1:A:16:VAL:H	20	0.36	0.08	0.35
(2,114)	1:A:16:VAL:HG23	1:A:16:VAL:H	20	0.36	0.08	0.35
(2,114)	1:A:16:VAL:HG23	1:A:16:VAL:H	20	0.36	0.08	0.35
(1,93)	1:A:8:PHE:H	1:A:7:ASP:HA	20	0.36	0.07	0.37

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)	Median (Å)
(1,224)	1:A:92:CYS:HA	1:A:94:SER:H	20	0.36	0.05	0.36
(1,486)	1:A:7:ASP:HA	1:A:19:ARG:H	20	0.36	0.09	0.36
(1,735)	1:A:28:CYS:HB2	1:A:33:ASP:H	20	0.35	0.08	0.38
(1,735)	1:A:28:CYS:HB3	1:A:33:ASP:H	20	0.35	0.08	0.38
(2,54)	1:A:17:PRO:HB2	1:A:18:SER:H	20	0.35	0.08	0.36
(2,54)	1:A:17:PRO:HB3	1:A:18:SER:H	20	0.35	0.08	0.36
(2,54)	1:A:17:PRO:HG2	1:A:18:SER:H	20	0.35	0.08	0.36
(2,54)	1:A:17:PRO:HG3	1:A:18:SER:H	20	0.35	0.08	0.36
(1,803)	1:A:101:ASN:HD21	1:A:99:SER:H	20	0.35	0.16	0.3
(1,526)	1:A:64:ARG:H	1:A:67:GLY:H	20	0.35	0.07	0.34
(1,896)	1:A:64:ARG:H	1:A:66:ASP:H	20	0.35	0.08	0.32
(1,85)	1:A:21:LYS:HG2	1:A:22:CYS:H	20	0.34	0.08	0.33
(1,85)	1:A:21:LYS:HG3	1:A:22:CYS:H	20	0.34	0.08	0.33
(2,8)	1:A:24:GLY:HA2	1:A:46:ILE:H	20	0.32	0.1	0.36
(2,8)	1:A:24:GLY:HA3	1:A:46:ILE:H	20	0.32	0.1	0.36
(2,8)	1:A:45:ARG:HA	1:A:46:ILE:H	20	0.32	0.1	0.36
(1,66)	1:A:23:ASP:H	1:A:24:GLY:H	20	0.32	0.05	0.3
(2,177)	1:A:22:CYS:HB2	1:A:44:CYS:H	20	0.31	0.09	0.3
(2,177)	1:A:22:CYS:HB3	1:A:44:CYS:H	20	0.31	0.09	0.3
(2,177)	1:A:44:CYS:HB2	1:A:44:CYS:H	20	0.31	0.09	0.3
(2,177)	1:A:44:CYS:HB3	1:A:44:CYS:H	20	0.31	0.09	0.3
(1,789)	1:A:85:CYS:H	1:A:84:THR:HB	20	0.31	0.07	0.33
(1,365)	1:A:43:THR:HB	1:A:43:THR:H	20	0.31	0.06	0.31
(1,907)	1:A:39:CYS:H	1:A:41:MET:H	20	0.3	0.05	0.31
(1,745)	1:A:48:GLU:HB2	1:A:49:ILE:H	20	0.3	0.12	0.32
(1,745)	1:A:48:GLU:HB3	1:A:49:ILE:H	20	0.3	0.12	0.32
(2,227)	1:A:19:ARG:HG2	1:A:21:LYS:H	20	0.29	0.03	0.3
(2,227)	1:A:19:ARG:HG2	1:A:21:LYS:H	20	0.29	0.03	0.3
(2,227)	1:A:19:ARG:HG3	1:A:21:LYS:H	20	0.29	0.03	0.3
(2,227)	1:A:19:ARG:HG3	1:A:21:LYS:H	20	0.29	0.03	0.3
(2,227)	1:A:21:LYS:HB2	1:A:21:LYS:H	20	0.29	0.03	0.3
(2,227)	1:A:21:LYS:HB3	1:A:21:LYS:H	20	0.29	0.03	0.3
(2,227)	1:A:21:LYS:HD2	1:A:21:LYS:H	20	0.29	0.03	0.3
(2,227)	1:A:21:LYS:HD3	1:A:21:LYS:H	20	0.29	0.03	0.3
(1,320)	1:A:7:ASP:HA	1:A:18:SER:H	20	0.29	0.09	0.3
(2,162)	1:A:50:SER:HA	1:A:59:ILE:H	20	0.29	0.03	0.28
(2,162)	1:A:59:ILE:HA	1:A:59:ILE:H	20	0.29	0.03	0.28
(2,342)	1:A:17:PRO:HB2	1:A:20:TRP:HE1	20	0.29	0.1	0.29
(2,342)	1:A:17:PRO:HB3	1:A:20:TRP:HE1	20	0.29	0.1	0.29
(2,342)	1:A:19:ARG:HB2	1:A:20:TRP:HE1	20	0.29	0.1	0.29
(2,342)	1:A:19:ARG:HB3	1:A:20:TRP:HE1	20	0.29	0.1	0.29
(2,202)	1:A:22:CYS:HA	1:A:23:ASP:H	20	0.29	0.02	0.28

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)	Median (Å)
(2,202)	1:A:23:ASP:HA	1:A:23:ASP:H	20	0.29	0.02	0.28
(1,397)	1:A:54:HIS:H	1:A:54:HIS:HB2	20	0.28	0.01	0.29
(1,397)	1:A:54:HIS:H	1:A:54:HIS:HB3	20	0.28	0.01	0.29
(2,13)	1:A:110:CYS:HB2	1:A:113:GLY:H	20	0.28	0.1	0.31
(2,13)	1:A:110:CYS:HB3	1:A:113:GLY:H	20	0.28	0.1	0.31
(2,13)	1:A:111:SER:HB2	1:A:113:GLY:H	20	0.28	0.1	0.31
(2,13)	1:A:111:SER:HB3	1:A:113:GLY:H	20	0.28	0.1	0.31
(2,13)	1:A:113:GLY:HA2	1:A:113:GLY:H	20	0.28	0.1	0.31
(2,13)	1:A:113:GLY:HA3	1:A:113:GLY:H	20	0.28	0.1	0.31
(2,43)	1:A:10:CYS:HA	1:A:14:GLN:H	20	0.28	0.02	0.28
(2,43)	1:A:11:ASN:HA	1:A:14:GLN:H	20	0.28	0.02	0.28
(2,43)	1:A:13:GLY:HA2	1:A:14:GLN:H	20	0.28	0.02	0.28
(2,43)	1:A:13:GLY:HA3	1:A:14:GLN:H	20	0.28	0.02	0.28
(1,666)	1:A:105:ASN:HB2	1:A:105:ASN:HD21	20	0.28	0.01	0.28
(1,666)	1:A:105:ASN:HB3	1:A:105:ASN:HD21	20	0.28	0.01	0.28
(1,904)	1:A:105:ASN:HB2	1:A:105:ASN:HD21	20	0.28	0.01	0.28
(1,904)	1:A:105:ASN:HB3	1:A:105:ASN:HD21	20	0.28	0.01	0.28
(1,504)	1:A:39:CYS:HB2	1:A:39:CYS:H	20	0.27	0.08	0.24
(1,504)	1:A:39:CYS:HB3	1:A:39:CYS:H	20	0.27	0.08	0.24
(1,860)	1:A:16:VAL:HB	1:A:19:ARG:H	20	0.27	0.06	0.26
(1,23)	1:A:104:CYS:H	1:A:105:ASN:H	20	0.27	0.07	0.26
(1,24)	1:A:104:CYS:H	1:A:105:ASN:H	20	0.27	0.07	0.26
(2,262)	1:A:51:CYS:HB2	1:A:74:GLY:H	20	0.27	0.08	0.27
(2,262)	1:A:51:CYS:HB3	1:A:74:GLY:H	20	0.27	0.08	0.27
(2,262)	1:A:71:CYS:HB2	1:A:74:GLY:H	20	0.27	0.08	0.27
(2,262)	1:A:71:CYS:HB3	1:A:74:GLY:H	20	0.27	0.08	0.27
(1,499)	1:A:33:ASP:HB2	1:A:33:ASP:H	20	0.26	0.13	0.22
(1,499)	1:A:33:ASP:HB3	1:A:33:ASP:H	20	0.26	0.13	0.22
(1,768)	1:A:58:CYS:HA	1:A:59:ILE:H	20	0.26	0.04	0.26
(1,339)	1:A:25:ASP:H	1:A:20:TRP:HB2	20	0.26	0.07	0.25
(1,339)	1:A:25:ASP:H	1:A:20:TRP:HB3	20	0.26	0.07	0.25
(2,29)	1:A:28:CYS:HA	1:A:29:GLU:H	20	0.25	0.03	0.26
(2,29)	1:A:30:ASP:HA	1:A:29:GLU:H	20	0.25	0.03	0.26
(2,163)	1:A:71:CYS:HA	1:A:77:GLU:H	20	0.25	0.04	0.23
(2,163)	1:A:77:GLU:HA	1:A:77:GLU:H	20	0.25	0.04	0.23
(2,278)	1:A:41:MET:HA	1:A:42:ARG:H	20	0.25	0.02	0.25
(2,278)	1:A:42:ARG:HA	1:A:42:ARG:H	20	0.25	0.02	0.25
(2,278)	1:A:43:THR:HA	1:A:42:ARG:H	20	0.25	0.02	0.25
(2,278)	1:A:56:THR:HB	1:A:42:ARG:H	20	0.25	0.02	0.25
(1,569)	1:A:85:CYS:H	1:A:84:THR:H	20	0.25	0.05	0.24
(1,545)	1:A:103:VAL:HA	1:A:105:ASN:H	20	0.25	0.03	0.25
(1,28)	1:A:118:ASP:H	1:A:117:LEU:H	20	0.24	0.07	0.25

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)	Median (Å)
(2,375)	1:A:48:GLU:HB2	1:A:61:VAL:H	20	0.23	0.08	0.2
(2,375)	1:A:48:GLU:HB3	1:A:61:VAL:H	20	0.23	0.08	0.2
(2,375)	1:A:60:PRO:HD3	1:A:61:VAL:H	20	0.23	0.08	0.2
(1,744)	1:A:48:GLU:H	1:A:47:HIS:H	20	0.23	0.09	0.2
(2,164)	1:A:14:GLN:HB2	1:A:14:GLN:H	20	0.23	0.09	0.2
(2,164)	1:A:14:GLN:HB3	1:A:14:GLN:H	20	0.23	0.09	0.2
(1,349)	1:A:32:SER:H	1:A:33:ASP:H	20	0.23	0.07	0.22
(1,351)	1:A:32:SER:H	1:A:33:ASP:H	20	0.23	0.07	0.22
(1,283)	1:A:8:PHE:H	1:A:7:ASP:H	20	0.23	0.02	0.22
(2,188)	1:A:16:VAL:HG11	1:A:19:ARG:H	20	0.22	0.09	0.2
(2,188)	1:A:16:VAL:HG12	1:A:19:ARG:H	20	0.22	0.09	0.2
(2,188)	1:A:16:VAL:HG13	1:A:19:ARG:H	20	0.22	0.09	0.2
(2,188)	1:A:16:VAL:HG21	1:A:19:ARG:H	20	0.22	0.09	0.2
(2,188)	1:A:16:VAL:HG22	1:A:19:ARG:H	20	0.22	0.09	0.2
(2,188)	1:A:16:VAL:HG23	1:A:19:ARG:H	20	0.22	0.09	0.2
(2,292)	1:A:3:CYS:HB2	1:A:8:PHE:H	20	0.22	0.05	0.22
(2,292)	1:A:3:CYS:HB3	1:A:8:PHE:H	20	0.22	0.05	0.22
(2,292)	1:A:7:ASP:HB2	1:A:8:PHE:H	20	0.22	0.05	0.22
(2,292)	1:A:7:ASP:HB3	1:A:8:PHE:H	20	0.22	0.05	0.22
(2,292)	1:A:8:PHE:HB2	1:A:8:PHE:H	20	0.22	0.05	0.22
(2,292)	1:A:8:PHE:HB3	1:A:8:PHE:H	20	0.22	0.05	0.22
(2,351)	1:A:12:ASN:HB2	1:A:12:ASN:H	20	0.22	0.02	0.21
(2,351)	1:A:12:ASN:HB3	1:A:12:ASN:H	20	0.22	0.02	0.21
(2,351)	1:A:13:GLY:HA2	1:A:12:ASN:H	20	0.22	0.02	0.21
(2,351)	1:A:13:GLY:HA3	1:A:12:ASN:H	20	0.22	0.02	0.21
(1,6)	1:A:23:ASP:H	1:A:24:GLY:H	20	0.22	0.05	0.2
(1,415)	1:A:64:ARG:HA	1:A:65:CYS:H	20	0.19	0.03	0.2
(1,128)	1:A:114:SER:HA	1:A:114:SER:H	20	0.19	0.04	0.19
(1,664)	1:A:105:ASN:HB2	1:A:105:ASN:HD21	20	0.18	0.01	0.18
(1,664)	1:A:105:ASN:HB3	1:A:105:ASN:HD21	20	0.18	0.01	0.18
(1,290)	1:A:8:PHE:HA	1:A:9:VAL:H	20	0.17	0.03	0.17
(1,473)	1:A:85:CYS:H	1:A:86:SER:H	20	0.15	0.02	0.14
(1,877)	1:A:22:CYS:HA	1:A:44:CYS:H	19	0.78	0.13	0.79
(1,447)	1:A:71:CYS:HA	1:A:74:GLY:H	19	0.64	0.22	0.66
(2,363)	1:A:49:ILE:HB	1:A:49:ILE:H	19	0.61	0.16	0.67
(2,363)	1:A:59:ILE:HB	1:A:49:ILE:H	19	0.61	0.16	0.67
(1,686)	1:A:74:GLY:H	1:A:69:ASN:HD22	19	0.59	0.15	0.64
(2,208)	1:A:43:THR:HG1	1:A:52:GLY:H	19	0.47	0.07	0.46
(2,208)	1:A:43:THR:HG1	1:A:52:GLY:H	19	0.47	0.07	0.46
(2,208)	1:A:43:THR:HG21	1:A:52:GLY:H	19	0.47	0.07	0.46
(2,208)	1:A:43:THR:HG21	1:A:52:GLY:H	19	0.47	0.07	0.46
(2,208)	1:A:43:THR:HG22	1:A:52:GLY:H	19	0.47	0.07	0.46

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)	Median (Å)
(2,208)	1:A:43:THR:HG22	1:A:52:GLY:H	19	0.47	0.07	0.46
(2,208)	1:A:43:THR:HG23	1:A:52:GLY:H	19	0.47	0.07	0.46
(2,208)	1:A:43:THR:HG23	1:A:52:GLY:H	19	0.47	0.07	0.46
(2,208)	1:A:53:ALA:HB1	1:A:52:GLY:H	19	0.47	0.07	0.46
(2,208)	1:A:53:ALA:HB2	1:A:52:GLY:H	19	0.47	0.07	0.46
(2,208)	1:A:53:ALA:HB3	1:A:52:GLY:H	19	0.47	0.07	0.46
(2,208)	1:A:56:THR:HG21	1:A:52:GLY:H	19	0.47	0.07	0.46
(2,208)	1:A:56:THR:HG22	1:A:52:GLY:H	19	0.47	0.07	0.46
(2,208)	1:A:56:THR:HG23	1:A:52:GLY:H	19	0.47	0.07	0.46
(1,366)	1:A:42:ARG:HB2	1:A:43:THR:H	19	0.45	0.08	0.47
(1,366)	1:A:42:ARG:HB2	1:A:43:THR:H	19	0.45	0.08	0.47
(1,366)	1:A:42:ARG:HB3	1:A:43:THR:H	19	0.45	0.08	0.47
(1,366)	1:A:42:ARG:HB3	1:A:43:THR:H	19	0.45	0.08	0.47
(1,799)	1:A:85:CYS:HA	1:A:97:CYS:H	19	0.41	0.22	0.36
(1,81)	1:A:28:CYS:HA	1:A:33:ASP:H	19	0.4	0.05	0.4
(2,25)	1:A:79:ASN:HD22	1:A:80:CYS:HA	19	0.4	0.12	0.38
(2,25)	1:A:86:SER:HA	1:A:80:CYS:HA	19	0.4	0.12	0.38
(1,60)	1:A:56:THR:H	1:A:57:GLN:H	19	0.39	0.07	0.42
(2,285)	1:A:109:ASP:HB2	1:A:112:ASP:H	19	0.37	0.1	0.35
(2,285)	1:A:109:ASP:HB3	1:A:112:ASP:H	19	0.37	0.1	0.35
(2,285)	1:A:112:ASP:HB2	1:A:112:ASP:H	19	0.37	0.1	0.35
(2,285)	1:A:112:ASP:HB3	1:A:112:ASP:H	19	0.37	0.1	0.35
(2,190)	1:A:55:SER:HA	1:A:57:GLN:H	19	0.37	0.04	0.37
(2,190)	1:A:56:THR:HA	1:A:57:GLN:H	19	0.37	0.04	0.37
(1,856)	1:A:14:GLN:H	1:A:12:ASN:HD22	19	0.37	0.09	0.37
(1,681)	1:A:79:ASN:HD21	1:A:87:PRO:HD2	19	0.36	0.09	0.37
(1,681)	1:A:79:ASN:HD21	1:A:87:PRO:HD3	19	0.36	0.09	0.37
(1,323)	1:A:64:ARG:H	1:A:80:CYS:HB2	19	0.36	0.11	0.38
(1,323)	1:A:64:ARG:H	1:A:80:CYS:HB3	19	0.36	0.11	0.38
(2,341)	1:A:78:GLU:HG2	1:A:78:GLU:H	19	0.36	0.12	0.36
(2,341)	1:A:78:GLU:HG3	1:A:78:GLU:H	19	0.36	0.12	0.36
(2,341)	1:A:87:PRO:HB2	1:A:78:GLU:H	19	0.36	0.12	0.36
(2,341)	1:A:87:PRO:HB3	1:A:78:GLU:H	19	0.36	0.12	0.36
(1,831)	1:A:73:SER:H	1:A:75:GLU:H	19	0.35	0.08	0.35
(1,849)	1:A:33:ASP:H	1:A:11:ASN:H	19	0.35	0.14	0.29
(1,783)	1:A:71:CYS:HB2	1:A:74:GLY:H	19	0.34	0.08	0.35
(1,783)	1:A:71:CYS:HB3	1:A:74:GLY:H	19	0.34	0.08	0.35
(1,359)	1:A:40:HIS:H	1:A:40:HIS:HB2	19	0.32	0.18	0.45
(1,359)	1:A:40:HIS:H	1:A:40:HIS:HB3	19	0.32	0.18	0.45
(1,794)	1:A:82:ASN:HD22	1:A:94:SER:H	19	0.3	0.1	0.26
(2,160)	1:A:43:THR:HG1	1:A:43:THR:H	19	0.3	0.09	0.32
(2,160)	1:A:43:THR:HG1	1:A:43:THR:H	19	0.3	0.09	0.32

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)	Median (Å)
(2,160)	1:A:43:THR:HG21	1:A:43:THR:H	19	0.3	0.09	0.32
(2,160)	1:A:43:THR:HG21	1:A:43:THR:H	19	0.3	0.09	0.32
(2,160)	1:A:43:THR:HG22	1:A:43:THR:H	19	0.3	0.09	0.32
(2,160)	1:A:43:THR:HG22	1:A:43:THR:H	19	0.3	0.09	0.32
(2,160)	1:A:43:THR:HG23	1:A:43:THR:H	19	0.3	0.09	0.32
(2,160)	1:A:43:THR:HG23	1:A:43:THR:H	19	0.3	0.09	0.32
(2,160)	1:A:56:THR:HG1	1:A:43:THR:H	19	0.3	0.09	0.32
(2,160)	1:A:56:THR:HG21	1:A:43:THR:H	19	0.3	0.09	0.32
(2,160)	1:A:56:THR:HG22	1:A:43:THR:H	19	0.3	0.09	0.32
(2,160)	1:A:56:THR:HG23	1:A:43:THR:H	19	0.3	0.09	0.32
(1,801)	1:A:102:PHE:HB2	1:A:98:ILE:H	19	0.29	0.07	0.28
(1,801)	1:A:102:PHE:HB3	1:A:98:ILE:H	19	0.29	0.07	0.28
(1,375)	1:A:48:GLU:HA	1:A:49:ILE:H	19	0.29	0.07	0.28
(2,18)	1:A:111:SER:HA	1:A:113:GLY:H	19	0.28	0.12	0.3
(2,18)	1:A:113:GLY:HA2	1:A:113:GLY:H	19	0.28	0.12	0.3
(2,18)	1:A:113:GLY:HA3	1:A:113:GLY:H	19	0.28	0.12	0.3
(1,585)	1:A:28:CYS:H	1:A:27:ASP:H	19	0.25	0.08	0.24
(1,863)	1:A:17:PRO:HD2	1:A:20:TRP:HE1	19	0.25	0.06	0.25
(1,863)	1:A:17:PRO:HD3	1:A:20:TRP:HE1	19	0.25	0.06	0.25
(1,386)	1:A:51:CYS:HB2	1:A:51:CYS:H	19	0.25	0.06	0.26
(1,386)	1:A:51:CYS:HB3	1:A:51:CYS:H	19	0.25	0.06	0.26
(1,869)	1:A:14:GLN:HE22	1:A:28:CYS:H	19	0.21	0.08	0.21
(2,110)	1:A:17:PRO:HB2	1:A:19:ARG:H	19	0.17	0.03	0.17
(2,110)	1:A:17:PRO:HB3	1:A:19:ARG:H	19	0.17	0.03	0.17
(2,110)	1:A:19:ARG:HB2	1:A:19:ARG:H	19	0.17	0.03	0.17
(2,110)	1:A:19:ARG:HB3	1:A:19:ARG:H	19	0.17	0.03	0.17
(1,462)	1:A:79:ASN:H	1:A:78:GLU:H	19	0.15	0.03	0.14
(2,233)	1:A:14:GLN:HB2	1:A:14:GLN:HE22	19	0.12	0.01	0.12
(2,233)	1:A:14:GLN:HB3	1:A:14:GLN:HE22	19	0.12	0.01	0.12
(1,819)	1:A:112:ASP:HB2	1:A:115:ASP:H	18	1.02	0.5	1.01
(1,819)	1:A:112:ASP:HB3	1:A:115:ASP:H	18	1.02	0.5	1.01
(1,543)	1:A:112:ASP:HB2	1:A:114:SER:H	18	0.55	0.22	0.5
(1,543)	1:A:112:ASP:HB3	1:A:114:SER:H	18	0.55	0.22	0.5
(1,509)	1:A:46:ILE:HA	1:A:46:ILE:H	18	0.46	0.14	0.53
(2,281)	1:A:10:CYS:HA	1:A:11:ASN:HD22	18	0.43	0.17	0.42
(2,281)	1:A:11:ASN:HA	1:A:11:ASN:HD22	18	0.43	0.17	0.42
(2,72)	1:A:110:CYS:HB2	1:A:113:GLY:H	18	0.41	0.26	0.29
(2,72)	1:A:110:CYS:HB3	1:A:113:GLY:H	18	0.41	0.26	0.29
(2,72)	1:A:112:ASP:HB2	1:A:113:GLY:H	18	0.41	0.26	0.29
(2,72)	1:A:112:ASP:HB3	1:A:113:GLY:H	18	0.41	0.26	0.29
(1,859)	1:A:3:CYS:HB2	1:A:18:SER:H	18	0.34	0.1	0.36
(1,859)	1:A:3:CYS:HB3	1:A:18:SER:H	18	0.34	0.1	0.36

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)	Median (Å)
(1,596)	1:A:74:GLY:HA2	1:A:69:ASN:HD21	18	0.31	0.12	0.33
(1,596)	1:A:74:GLY:HA3	1:A:69:ASN:HD21	18	0.31	0.12	0.33
(2,124)	1:A:43:THR:HG1	1:A:57:GLN:H	18	0.3	0.11	0.27
(2,124)	1:A:43:THR:HG1	1:A:57:GLN:H	18	0.3	0.11	0.27
(2,124)	1:A:43:THR:HG21	1:A:57:GLN:H	18	0.3	0.11	0.27
(2,124)	1:A:43:THR:HG21	1:A:57:GLN:H	18	0.3	0.11	0.27
(2,124)	1:A:43:THR:HG22	1:A:57:GLN:H	18	0.3	0.11	0.27
(2,124)	1:A:43:THR:HG22	1:A:57:GLN:H	18	0.3	0.11	0.27
(2,124)	1:A:43:THR:HG23	1:A:57:GLN:H	18	0.3	0.11	0.27
(2,124)	1:A:43:THR:HG23	1:A:57:GLN:H	18	0.3	0.11	0.27
(2,124)	1:A:56:THR:HG1	1:A:57:GLN:H	18	0.3	0.11	0.27
(2,124)	1:A:56:THR:HG21	1:A:57:GLN:H	18	0.3	0.11	0.27
(2,124)	1:A:56:THR:HG21	1:A:57:GLN:H	18	0.3	0.11	0.27
(2,124)	1:A:56:THR:HG22	1:A:57:GLN:H	18	0.3	0.11	0.27
(2,124)	1:A:56:THR:HG22	1:A:57:GLN:H	18	0.3	0.11	0.27
(2,124)	1:A:56:THR:HG23	1:A:57:GLN:H	18	0.3	0.11	0.27
(2,124)	1:A:56:THR:HG23	1:A:57:GLN:H	18	0.3	0.11	0.27
(1,454)	1:A:78:GLU:HG2	1:A:76:ASP:H	18	0.28	0.13	0.26
(1,454)	1:A:78:GLU:HG3	1:A:76:ASP:H	18	0.28	0.13	0.26
(1,891)	1:A:64:ARG:H	1:A:80:CYS:HB2	18	0.27	0.09	0.29
(1,891)	1:A:64:ARG:H	1:A:80:CYS:HB3	18	0.27	0.09	0.29
(1,205)	1:A:98:ILE:HG12	1:A:98:ILE:H	18	0.27	0.05	0.26
(1,205)	1:A:98:ILE:HG13	1:A:98:ILE:H	18	0.27	0.05	0.26
(1,483)	1:A:10:CYS:HB2	1:A:14:GLN:H	18	0.25	0.08	0.25
(1,483)	1:A:10:CYS:HB3	1:A:14:GLN:H	18	0.25	0.08	0.25
(1,698)	1:A:64:ARG:H	1:A:64:ARG:HG2	18	0.22	0.1	0.21
(1,698)	1:A:64:ARG:H	1:A:64:ARG:HG3	18	0.22	0.1	0.21
(1,418)	1:A:64:ARG:HA	1:A:66:ASP:H	18	0.2	0.05	0.22
(2,365)	1:A:69:ASN:HA	1:A:70:ASP:H	18	0.15	0.04	0.15
(2,365)	1:A:70:ASP:HA	1:A:70:ASP:H	18	0.15	0.04	0.15
(1,383)	1:A:51:CYS:H	1:A:50:SER:HA	18	0.14	0.04	0.12
(1,820)	1:A:110:CYS:H	1:A:115:ASP:H	17	1.09	0.79	1.73
(1,746)	1:A:50:SER:H	1:A:49:ILE:HG12	17	0.74	0.16	0.79
(1,746)	1:A:50:SER:H	1:A:49:ILE:HG13	17	0.74	0.16	0.79
(1,756)	1:A:57:GLN:HB2	1:A:57:GLN:HE21	17	0.48	0.15	0.46
(1,756)	1:A:57:GLN:HB2	1:A:57:GLN:HE21	17	0.48	0.15	0.46
(1,756)	1:A:57:GLN:HB3	1:A:57:GLN:HE21	17	0.48	0.15	0.46
(1,756)	1:A:57:GLN:HB3	1:A:57:GLN:HE21	17	0.48	0.15	0.46
(1,766)	1:A:48:GLU:HB2	1:A:58:CYS:H	17	0.34	0.16	0.36
(1,766)	1:A:48:GLU:HB3	1:A:58:CYS:H	17	0.34	0.16	0.36
(2,306)	1:A:71:CYS:HB2	1:A:77:GLU:H	17	0.32	0.1	0.3
(2,306)	1:A:71:CYS:HB3	1:A:77:GLU:H	17	0.32	0.1	0.3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)	Median (Å)
(2,306)	1:A:80:CYS:HB2	1:A:77:GLU:H	17	0.32	0.1	0.3
(2,306)	1:A:80:CYS:HB3	1:A:77:GLU:H	17	0.32	0.1	0.3
(1,466)	1:A:80:CYS:HA	1:A:79:ASN:H	17	0.31	0.13	0.31
(1,109)	1:A:119:CYS:H	1:A:117:LEU:HG	17	0.29	0.09	0.25
(1,399)	1:A:54:HIS:H	1:A:53:ALA:HB1	17	0.28	0.11	0.29
(1,399)	1:A:54:HIS:H	1:A:53:ALA:HB2	17	0.28	0.11	0.29
(1,399)	1:A:54:HIS:H	1:A:53:ALA:HB3	17	0.28	0.11	0.29
(1,17)	1:A:81:GLY:H	1:A:80:CYS:H	17	0.26	0.06	0.27
(2,323)	1:A:64:ARG:HG2	1:A:68:GLU:H	17	0.26	0.09	0.28
(2,323)	1:A:64:ARG:HG3	1:A:68:GLU:H	17	0.26	0.09	0.28
(2,323)	1:A:68:GLU:HG3	1:A:68:GLU:H	17	0.26	0.09	0.28
(1,791)	1:A:85:CYS:HB2	1:A:89:GLU:H	17	0.26	0.08	0.24
(1,791)	1:A:85:CYS:HB3	1:A:89:GLU:H	17	0.26	0.08	0.24
(2,97)	1:A:20:TRP:HB2	1:A:20:TRP:H	17	0.24	0.05	0.26
(2,97)	1:A:20:TRP:HB3	1:A:20:TRP:H	17	0.24	0.05	0.26
(2,97)	1:A:21:LYS:HA	1:A:20:TRP:H	17	0.24	0.05	0.26
(2,66)	1:A:4:ALA:H	1:A:7:ASP:H	17	0.23	0.07	0.25
(2,66)	1:A:5:GLU:H	1:A:7:ASP:H	17	0.23	0.07	0.25
(1,886)	1:A:51:CYS:H	1:A:58:CYS:H	17	0.22	0.04	0.23
(1,312)	1:A:14:GLN:HG2	1:A:14:GLN:H	17	0.21	0.05	0.21
(1,312)	1:A:14:GLN:HG3	1:A:14:GLN:H	17	0.21	0.05	0.21
(1,443)	1:A:73:SER:H	1:A:71:CYS:HB2	17	0.21	0.06	0.21
(1,443)	1:A:73:SER:H	1:A:71:CYS:HB3	17	0.21	0.06	0.21
(1,842)	1:A:80:CYS:HA	1:A:84:THR:H	17	0.2	0.05	0.21
(2,345)	1:A:84:THR:HG1	1:A:85:CYS:H	17	0.2	0.07	0.19
(2,345)	1:A:84:THR:HG21	1:A:85:CYS:H	17	0.2	0.07	0.19
(2,345)	1:A:84:THR:HG22	1:A:85:CYS:H	17	0.2	0.07	0.19
(2,345)	1:A:84:THR:HG23	1:A:85:CYS:H	17	0.2	0.07	0.19
(2,345)	1:A:91:THR:HG21	1:A:85:CYS:H	17	0.2	0.07	0.19
(2,345)	1:A:91:THR:HG22	1:A:85:CYS:H	17	0.2	0.07	0.19
(2,345)	1:A:91:THR:HG23	1:A:85:CYS:H	17	0.2	0.07	0.19
(1,414)	1:A:63:TRP:H	1:A:63:TRP:HB2	17	0.19	0.06	0.19
(1,414)	1:A:63:TRP:H	1:A:63:TRP:HB3	17	0.19	0.06	0.19
(3,7)	2:A:202:CA:CA	1:A:63:TRP:O	17	0.17	0.03	0.17
(1,550)	1:A:104:CYS:HB2	1:A:104:CYS:H	17	0.17	0.1	0.13
(1,550)	1:A:104:CYS:HB3	1:A:104:CYS:H	17	0.17	0.1	0.13
(1,551)	1:A:104:CYS:HB2	1:A:104:CYS:H	17	0.17	0.1	0.13
(1,551)	1:A:104:CYS:HB3	1:A:104:CYS:H	17	0.17	0.1	0.13
(1,2)	1:A:112:ASP:H	1:A:113:GLY:H	16	0.55	0.06	0.54
(1,517)	1:A:59:ILE:HG12	1:A:59:ILE:H	16	0.45	0.11	0.44
(1,517)	1:A:59:ILE:HG12	1:A:59:ILE:H	16	0.45	0.11	0.44
(1,517)	1:A:59:ILE:HG13	1:A:59:ILE:H	16	0.45	0.11	0.44

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)	Median (Å)
(1,517)	1:A:59:ILE:HG13	1:A:59:ILE:H	16	0.45	0.11	0.44
(1,862)	1:A:21:LYS:HE2	1:A:19:ARG:H	16	0.35	0.11	0.4
(1,862)	1:A:21:LYS:HE3	1:A:19:ARG:H	16	0.35	0.11	0.4
(1,534)	1:A:77:GLU:HB2	1:A:77:GLU:H	16	0.35	0.12	0.38
(1,534)	1:A:77:GLU:HB3	1:A:77:GLU:H	16	0.35	0.12	0.38
(2,277)	1:A:19:ARG:HG2	1:A:19:ARG:H	16	0.27	0.07	0.29
(2,277)	1:A:19:ARG:HG2	1:A:19:ARG:H	16	0.27	0.07	0.29
(2,277)	1:A:19:ARG:HG3	1:A:19:ARG:H	16	0.27	0.07	0.29
(2,277)	1:A:19:ARG:HG3	1:A:19:ARG:H	16	0.27	0.07	0.29
(2,277)	1:A:21:LYS:HD2	1:A:19:ARG:H	16	0.27	0.07	0.29
(1,796)	1:A:96:ARG:H	1:A:83:ILE:HG21	16	0.26	0.1	0.24
(1,796)	1:A:96:ARG:H	1:A:83:ILE:HG22	16	0.26	0.1	0.24
(1,796)	1:A:96:ARG:H	1:A:83:ILE:HG23	16	0.26	0.1	0.24
(2,42)	1:A:49:ILE:HG21	1:A:61:VAL:H	16	0.24	0.07	0.29
(2,42)	1:A:49:ILE:HG22	1:A:61:VAL:H	16	0.24	0.07	0.29
(2,42)	1:A:49:ILE:HG23	1:A:61:VAL:H	16	0.24	0.07	0.29
(2,42)	1:A:59:ILE:HD11	1:A:61:VAL:H	16	0.24	0.07	0.29
(2,42)	1:A:59:ILE:HD12	1:A:61:VAL:H	16	0.24	0.07	0.29
(2,42)	1:A:59:ILE:HD13	1:A:61:VAL:H	16	0.24	0.07	0.29
(2,42)	1:A:60:PRO:HB2	1:A:61:VAL:H	16	0.24	0.07	0.29
(2,42)	1:A:60:PRO:HB3	1:A:61:VAL:H	16	0.24	0.07	0.29
(2,42)	1:A:61:VAL:HG11	1:A:61:VAL:H	16	0.24	0.07	0.29
(2,42)	1:A:61:VAL:HG12	1:A:61:VAL:H	16	0.24	0.07	0.29
(2,42)	1:A:61:VAL:HG13	1:A:61:VAL:H	16	0.24	0.07	0.29
(2,42)	1:A:61:VAL:HG21	1:A:61:VAL:H	16	0.24	0.07	0.29
(2,42)	1:A:61:VAL:HG22	1:A:61:VAL:H	16	0.24	0.07	0.29
(2,42)	1:A:61:VAL:HG23	1:A:61:VAL:H	16	0.24	0.07	0.29
(1,49)	1:A:94:SER:H	1:A:93:SER:H	16	0.24	0.08	0.22
(1,328)	1:A:22:CYS:HB2	1:A:22:CYS:H	16	0.22	0.03	0.22
(1,328)	1:A:22:CYS:HB3	1:A:22:CYS:H	16	0.22	0.03	0.22
(2,300)	1:A:44:CYS:HB2	1:A:48:GLU:H	16	0.22	0.06	0.22
(2,300)	1:A:44:CYS:HB3	1:A:48:GLU:H	16	0.22	0.06	0.22
(2,300)	1:A:48:GLU:HG2	1:A:48:GLU:H	16	0.22	0.06	0.22
(2,300)	1:A:48:GLU:HG3	1:A:48:GLU:H	16	0.22	0.06	0.22
(1,518)	1:A:49:ILE:H	1:A:61:VAL:H	16	0.22	0.06	0.22
(2,263)	1:A:62:SER:HB2	1:A:63:TRP:H	16	0.21	0.05	0.21
(2,263)	1:A:62:SER:HB3	1:A:63:TRP:H	16	0.21	0.05	0.21
(2,263)	1:A:63:TRP:HB2	1:A:63:TRP:H	16	0.21	0.05	0.21
(4,5)	1:A:49:ILE:O	1:A:59:ILE:H	16	0.21	0.06	0.2
(1,501)	1:A:34:GLU:HB2	1:A:34:GLU:H	16	0.2	0.05	0.2
(1,501)	1:A:34:GLU:HB3	1:A:34:GLU:H	16	0.2	0.05	0.2
(2,259)	1:A:69:ASN:HB2	1:A:69:ASN:HD21	16	0.19	0.05	0.18

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)	Median (Å)
(2,259)	1:A:69:ASN:HB3	1:A:69:ASN:HD21	16	0.19	0.05	0.18
(2,259)	1:A:70:ASP:HB2	1:A:69:ASN:HD21	16	0.19	0.05	0.18
(2,259)	1:A:70:ASP:HB3	1:A:69:ASN:HD21	16	0.19	0.05	0.18
(1,591)	1:A:69:ASN:HB2	1:A:69:ASN:HD21	16	0.18	0.05	0.17
(1,591)	1:A:69:ASN:HB3	1:A:69:ASN:HD21	16	0.18	0.05	0.17
(1,809)	1:A:106:GLY:H	1:A:104:CYS:H	16	0.18	0.04	0.18
(1,204)	1:A:98:ILE:HG12	1:A:98:ILE:H	16	0.18	0.05	0.17
(1,204)	1:A:98:ILE:HG13	1:A:98:ILE:H	16	0.18	0.05	0.17
(1,308)	1:A:13:GLY:H	1:A:14:GLN:H	16	0.16	0.04	0.16
(1,451)	1:A:75:GLU:H	1:A:76:ASP:H	16	0.16	0.03	0.16
(1,475)	1:A:75:GLU:H	1:A:76:ASP:H	16	0.16	0.03	0.16
(1,531)	1:A:71:CYS:HB2	1:A:71:CYS:H	15	0.5	0.08	0.5
(1,531)	1:A:71:CYS:HB3	1:A:71:CYS:H	15	0.5	0.08	0.5
(2,64)	1:A:45:ARG:HB2	1:A:46:ILE:H	15	0.42	0.16	0.38
(2,64)	1:A:45:ARG:HB3	1:A:46:ILE:H	15	0.42	0.16	0.38
(2,64)	1:A:46:ILE:HG12	1:A:46:ILE:H	15	0.42	0.16	0.38
(2,64)	1:A:46:ILE:HG13	1:A:46:ILE:H	15	0.42	0.16	0.38
(2,216)	1:A:49:ILE:HD11	1:A:50:SER:H	15	0.35	0.08	0.32
(2,216)	1:A:49:ILE:HD12	1:A:50:SER:H	15	0.35	0.08	0.32
(2,216)	1:A:49:ILE:HD13	1:A:50:SER:H	15	0.35	0.08	0.32
(2,216)	1:A:49:ILE:HG12	1:A:50:SER:H	15	0.35	0.08	0.32
(2,216)	1:A:49:ILE:HG13	1:A:50:SER:H	15	0.35	0.08	0.32
(2,216)	1:A:49:ILE:HG21	1:A:50:SER:H	15	0.35	0.08	0.32
(2,216)	1:A:49:ILE:HG22	1:A:50:SER:H	15	0.35	0.08	0.32
(2,216)	1:A:49:ILE:HG23	1:A:50:SER:H	15	0.35	0.08	0.32
(1,696)	1:A:44:CYS:HB2	1:A:34:GLU:H	15	0.35	0.14	0.35
(1,696)	1:A:44:CYS:HB3	1:A:34:GLU:H	15	0.35	0.14	0.35
(2,137)	1:A:116:GLU:HB2	1:A:117:LEU:H	15	0.31	0.11	0.34
(2,137)	1:A:116:GLU:HB3	1:A:117:LEU:H	15	0.31	0.11	0.34
(2,137)	1:A:117:LEU:HB2	1:A:117:LEU:H	15	0.31	0.11	0.34
(2,137)	1:A:117:LEU:HB3	1:A:117:LEU:H	15	0.31	0.11	0.34
(1,806)	1:A:101:ASN:HD21	1:A:102:PHE:H	15	0.28	0.11	0.26
(1,909)	1:A:43:THR:HG1	1:A:46:ILE:H	15	0.24	0.11	0.21
(1,909)	1:A:43:THR:HG21	1:A:46:ILE:H	15	0.24	0.11	0.21
(1,909)	1:A:43:THR:HG22	1:A:46:ILE:H	15	0.24	0.11	0.21
(1,909)	1:A:43:THR:HG23	1:A:46:ILE:H	15	0.24	0.11	0.21
(1,658)	1:A:102:PHE:HA	1:A:105:ASN:HD22	15	0.22	0.07	0.24
(1,390)	1:A:51:CYS:HB2	1:A:52:GLY:H	15	0.22	0.09	0.18
(1,390)	1:A:51:CYS:HB3	1:A:52:GLY:H	15	0.22	0.09	0.18
(1,248)	1:A:83:ILE:HB	1:A:84:THR:H	15	0.21	0.08	0.21
(1,123)	1:A:115:ASP:HB2	1:A:115:ASP:H	15	0.19	0.03	0.18
(1,123)	1:A:115:ASP:HB3	1:A:115:ASP:H	15	0.19	0.03	0.18

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)	Median (Å)
(1,372)	1:A:48:GLU:H	1:A:48:GLU:HA	15	0.17	0.04	0.19
(1,277)	1:A:6:SER:HB2	1:A:6:SER:H	15	0.16	0.05	0.13
(1,277)	1:A:6:SER:HB3	1:A:6:SER:H	15	0.16	0.05	0.13
(1,279)	1:A:6:SER:HB2	1:A:6:SER:H	15	0.16	0.05	0.13
(1,279)	1:A:6:SER:HB3	1:A:6:SER:H	15	0.16	0.05	0.13
(1,876)	1:A:39:CYS:HB2	1:A:43:THR:H	15	0.16	0.05	0.15
(1,876)	1:A:39:CYS:HB3	1:A:43:THR:H	15	0.16	0.05	0.15
(1,409)	1:A:60:PRO:HA	1:A:61:VAL:H	15	0.15	0.02	0.15
(1,59)	1:A:65:CYS:H	1:A:66:ASP:H	15	0.15	0.02	0.15
(1,435)	1:A:72:ASP:HA	1:A:72:ASP:H	15	0.14	0.02	0.15
(2,236)	1:A:19:ARG:HB2	1:A:21:LYS:H	15	0.14	0.02	0.14
(2,236)	1:A:19:ARG:HB3	1:A:21:LYS:H	15	0.14	0.02	0.14
(2,236)	1:A:21:LYS:HB2	1:A:21:LYS:H	15	0.14	0.02	0.14
(2,236)	1:A:21:LYS:HB3	1:A:21:LYS:H	15	0.14	0.02	0.14
(1,371)	1:A:44:CYS:HA	1:A:45:ARG:H	14	0.5	0.06	0.52
(2,98)	1:A:28:CYS:HB2	1:A:11:ASN:H	14	0.49	0.25	0.44
(2,98)	1:A:28:CYS:HB3	1:A:11:ASN:H	14	0.49	0.25	0.44
(2,98)	1:A:32:SER:HB2	1:A:11:ASN:H	14	0.49	0.25	0.44
(2,98)	1:A:32:SER:HB3	1:A:11:ASN:H	14	0.49	0.25	0.44
(1,118)	1:A:115:ASP:H	1:A:113:GLY:H	14	0.46	0.08	0.45
(1,729)	1:A:32:SER:H	1:A:28:CYS:H	14	0.36	0.05	0.36
(1,733)	1:A:32:SER:H	1:A:28:CYS:H	14	0.36	0.05	0.36
(2,223)	1:A:45:ARG:HG2	1:A:45:ARG:H	14	0.34	0.1	0.31
(2,223)	1:A:45:ARG:HG3	1:A:45:ARG:H	14	0.34	0.1	0.31
(2,223)	1:A:46:ILE:HB	1:A:45:ARG:H	14	0.34	0.1	0.31
(1,911)	1:A:57:GLN:HE21	1:A:71:CYS:H	14	0.33	0.16	0.37
(1,296)	1:A:10:CYS:HB2	1:A:10:CYS:H	14	0.31	0.07	0.31
(1,296)	1:A:10:CYS:HB3	1:A:10:CYS:H	14	0.31	0.07	0.31
(2,116)	1:A:37:GLU:HB2	1:A:38:GLN:HE22	14	0.31	0.06	0.3
(2,116)	1:A:37:GLU:HB3	1:A:38:GLN:HE22	14	0.31	0.06	0.3
(2,116)	1:A:37:GLU:HB3	1:A:38:GLN:HE22	14	0.31	0.06	0.3
(2,116)	1:A:38:GLN:HB2	1:A:38:GLN:HE22	14	0.31	0.06	0.3
(2,116)	1:A:38:GLN:HB2	1:A:38:GLN:HE22	14	0.31	0.06	0.3
(2,116)	1:A:38:GLN:HB3	1:A:38:GLN:HE22	14	0.31	0.06	0.3
(2,24)	1:A:11:ASN:HB2	1:A:11:ASN:H	14	0.3	0.15	0.27
(2,24)	1:A:11:ASN:HB3	1:A:11:ASN:H	14	0.3	0.15	0.27
(2,24)	1:A:12:ASN:HB2	1:A:11:ASN:H	14	0.3	0.15	0.27
(1,916)	1:A:77:GLU:HB2	1:A:77:GLU:H	14	0.28	0.1	0.3
(1,916)	1:A:77:GLU:HB3	1:A:77:GLU:H	14	0.28	0.1	0.3
(4,2)	1:A:90:PHE:O	1:A:98:ILE:H	14	0.25	0.08	0.25
(1,55)	1:A:71:CYS:H	1:A:70:ASP:H	14	0.25	0.07	0.25
(2,156)	1:A:51:CYS:HB2	1:A:71:CYS:H	14	0.22	0.07	0.22

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)	Median (Å)
(2,156)	1:A:51:CYS:HB3	1:A:71:CYS:H	14	0.22	0.07	0.22
(2,156)	1:A:71:CYS:HB2	1:A:71:CYS:H	14	0.22	0.07	0.22
(2,156)	1:A:71:CYS:HB3	1:A:71:CYS:H	14	0.22	0.07	0.22
(1,884)	1:A:50:SER:H	1:A:59:ILE:H	14	0.19	0.05	0.18
(1,516)	1:A:49:ILE:H	1:A:59:ILE:H	14	0.19	0.04	0.18
(2,132)	1:A:45:ARG:HB2	1:A:45:ARG:H	14	0.16	0.04	0.15
(2,132)	1:A:45:ARG:HB3	1:A:45:ARG:H	14	0.16	0.04	0.15
(2,132)	1:A:46:ILE:HG12	1:A:45:ARG:H	14	0.16	0.04	0.15
(2,132)	1:A:46:ILE:HG13	1:A:45:ARG:H	14	0.16	0.04	0.15
(1,257)	1:A:82:ASN:HB2	1:A:82:ASN:H	14	0.14	0.03	0.15
(1,257)	1:A:82:ASN:HB2	1:A:82:ASN:H	14	0.14	0.03	0.15
(1,257)	1:A:82:ASN:HB3	1:A:82:ASN:H	14	0.14	0.03	0.15
(1,257)	1:A:82:ASN:HB3	1:A:82:ASN:H	14	0.14	0.03	0.15
(1,437)	1:A:72:ASP:H	1:A:71:CYS:H	13	0.45	0.35	0.24
(1,667)	1:A:107:GLN:HG2	1:A:105:ASN:HD22	13	0.38	0.08	0.41
(1,667)	1:A:107:GLN:HG2	1:A:105:ASN:HD22	13	0.38	0.08	0.41
(1,667)	1:A:107:GLN:HG3	1:A:105:ASN:HD22	13	0.38	0.08	0.41
(1,667)	1:A:107:GLN:HG3	1:A:105:ASN:HD22	13	0.38	0.08	0.41
(1,174)	1:A:103:VAL:H	1:A:101:ASN:HB2	13	0.36	0.1	0.39
(1,174)	1:A:103:VAL:H	1:A:101:ASN:HB3	13	0.36	0.1	0.39
(1,711)	1:A:10:CYS:HB2	1:A:11:ASN:H	13	0.35	0.14	0.32
(1,711)	1:A:10:CYS:HB3	1:A:11:ASN:H	13	0.35	0.14	0.32
(2,359)	1:A:83:ILE:HD11	1:A:98:ILE:H	13	0.29	0.07	0.3
(2,359)	1:A:83:ILE:HD12	1:A:98:ILE:H	13	0.29	0.07	0.3
(2,359)	1:A:83:ILE:HD13	1:A:98:ILE:H	13	0.29	0.07	0.3
(2,359)	1:A:98:ILE:HD11	1:A:98:ILE:H	13	0.29	0.07	0.3
(2,359)	1:A:98:ILE:HD12	1:A:98:ILE:H	13	0.29	0.07	0.3
(2,359)	1:A:98:ILE:HD13	1:A:98:ILE:H	13	0.29	0.07	0.3
(1,592)	1:A:74:GLY:HA2	1:A:69:ASN:HD21	13	0.27	0.07	0.29
(1,592)	1:A:74:GLY:HA3	1:A:69:ASN:HD21	13	0.27	0.07	0.29
(1,800)	1:A:85:CYS:HB2	1:A:98:ILE:H	13	0.26	0.09	0.28
(1,800)	1:A:85:CYS:HB3	1:A:98:ILE:H	13	0.26	0.09	0.28
(1,92)	1:A:7:ASP:HB2	1:A:8:PHE:H	13	0.25	0.08	0.24
(1,92)	1:A:7:ASP:HB3	1:A:8:PHE:H	13	0.25	0.08	0.24
(1,724)	1:A:34:GLU:HB2	1:A:25:ASP:H	13	0.23	0.07	0.23
(1,724)	1:A:34:GLU:HB3	1:A:25:ASP:H	13	0.23	0.07	0.23
(1,286)	1:A:7:ASP:HB2	1:A:7:ASP:H	13	0.2	0.08	0.16
(1,286)	1:A:7:ASP:HB3	1:A:7:ASP:H	13	0.2	0.08	0.16
(1,810)	1:A:101:ASN:HD21	1:A:105:ASN:HD22	13	0.19	0.03	0.19
(1,718)	1:A:16:VAL:HB	1:A:20:TRP:HE1	13	0.18	0.05	0.17
(1,838)	1:A:58:CYS:HA	1:A:52:GLY:H	13	0.18	0.05	0.17
(2,349)	1:A:99:SER:HB2	1:A:101:ASN:H	13	0.17	0.03	0.17

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)	Median (Å)
(2,349)	1:A:99:SER:HB3	1:A:101:ASN:H	13	0.17	0.03	0.17
(2,349)	1:A:102:PHE:HB2	1:A:101:ASN:H	13	0.17	0.03	0.17
(2,349)	1:A:102:PHE:HB3	1:A:101:ASN:H	13	0.17	0.03	0.17
(1,560)	1:A:90:PHE:H	1:A:99:SER:H	13	0.17	0.04	0.15
(1,369)	1:A:43:THR:HB	1:A:44:CYS:H	13	0.17	0.04	0.16
(1,7)	1:A:22:CYS:H	1:A:23:ASP:H	13	0.13	0.01	0.13
(1,357)	1:A:40:HIS:H	1:A:39:CYS:HA	13	0.12	0.01	0.12
(1,879)	1:A:48:GLU:H	1:A:45:ARG:H	12	0.36	0.11	0.36
(1,881)	1:A:48:GLU:H	1:A:45:ARG:H	12	0.36	0.11	0.36
(1,541)	1:A:115:ASP:HB2	1:A:116:GLU:H	12	0.34	0.25	0.2
(1,541)	1:A:115:ASP:HB3	1:A:116:GLU:H	12	0.34	0.25	0.2
(1,281)	1:A:5:GLU:HB2	1:A:6:SER:H	12	0.3	0.05	0.3
(1,281)	1:A:5:GLU:HB2	1:A:6:SER:H	12	0.3	0.05	0.3
(1,281)	1:A:5:GLU:HB3	1:A:6:SER:H	12	0.3	0.05	0.3
(1,281)	1:A:5:GLU:HB3	1:A:6:SER:H	12	0.3	0.05	0.3
(2,331)	1:A:2:THR:H	1:A:99:SER:H	12	0.27	0.13	0.23
(2,331)	1:A:3:CYS:H	1:A:99:SER:H	12	0.27	0.13	0.23
(2,331)	1:A:80:CYS:H	1:A:99:SER:H	12	0.27	0.13	0.23
(2,331)	1:A:81:GLY:H	1:A:99:SER:H	12	0.27	0.13	0.23
(2,331)	1:A:101:ASN:H	1:A:99:SER:H	12	0.27	0.13	0.23
(1,784)	1:A:71:CYS:HB2	1:A:76:ASP:H	12	0.27	0.17	0.18
(1,784)	1:A:71:CYS:HB3	1:A:76:ASP:H	12	0.27	0.17	0.18
(4,7)	1:A:8:PHE:H	1:A:16:VAL:O	12	0.25	0.07	0.26
(1,837)	1:A:50:SER:H	1:A:45:ARG:HD2	12	0.23	0.08	0.2
(1,837)	1:A:50:SER:H	1:A:45:ARG:HD3	12	0.23	0.08	0.2
(2,89)	1:A:107:GLN:HB2	1:A:108:ASP:H	12	0.23	0.09	0.2
(2,89)	1:A:107:GLN:HB3	1:A:108:ASP:H	12	0.23	0.09	0.2
(1,33)	1:A:115:ASP:H	1:A:114:SER:H	12	0.22	0.09	0.19
(1,731)	1:A:28:CYS:HB2	1:A:32:SER:H	12	0.22	0.06	0.22
(1,731)	1:A:28:CYS:HB3	1:A:32:SER:H	12	0.22	0.06	0.22
(1,187)	1:A:103:VAL:HG11	1:A:102:PHE:H	12	0.21	0.06	0.22
(1,187)	1:A:103:VAL:HG12	1:A:102:PHE:H	12	0.21	0.06	0.22
(1,187)	1:A:103:VAL:HG13	1:A:102:PHE:H	12	0.21	0.06	0.22
(1,187)	1:A:103:VAL:HG21	1:A:102:PHE:H	12	0.21	0.06	0.22
(1,187)	1:A:103:VAL:HG22	1:A:102:PHE:H	12	0.21	0.06	0.22
(1,187)	1:A:103:VAL:HG23	1:A:102:PHE:H	12	0.21	0.06	0.22
(1,9)	1:A:12:ASN:H	1:A:11:ASN:H	12	0.2	0.07	0.2
(1,925)	1:A:8:PHE:HB3	1:A:16:VAL:HG21	12	0.18	0.05	0.18
(1,925)	1:A:8:PHE:HB3	1:A:16:VAL:HG22	12	0.18	0.05	0.18
(1,925)	1:A:8:PHE:HB3	1:A:16:VAL:HG23	12	0.18	0.05	0.18
(1,726)	1:A:34:GLU:HG2	1:A:27:ASP:H	12	0.18	0.05	0.18
(1,726)	1:A:34:GLU:HG3	1:A:27:ASP:H	12	0.18	0.05	0.18

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)	Median (Å)
(2,261)	1:A:110:CYS:HB2	1:A:110:CYS:H	12	0.18	0.05	0.18
(2,261)	1:A:110:CYS:HB3	1:A:110:CYS:H	12	0.18	0.05	0.18
(2,261)	1:A:111:SER:HB2	1:A:110:CYS:H	12	0.18	0.05	0.18
(2,261)	1:A:113:GLY:HA2	1:A:110:CYS:H	12	0.18	0.05	0.18
(2,261)	1:A:113:GLY:HA3	1:A:110:CYS:H	12	0.18	0.05	0.18
(1,708)	1:A:44:CYS:HB2	1:A:45:ARG:H	11	0.48	0.2	0.57
(1,708)	1:A:44:CYS:HB3	1:A:45:ARG:H	11	0.48	0.2	0.57
(1,833)	1:A:42:ARG:HG2	1:A:41:MET:H	11	0.41	0.06	0.41
(1,833)	1:A:42:ARG:HG2	1:A:41:MET:H	11	0.41	0.06	0.41
(1,833)	1:A:42:ARG:HG3	1:A:41:MET:H	11	0.41	0.06	0.41
(1,833)	1:A:42:ARG:HG3	1:A:41:MET:H	11	0.41	0.06	0.41
(1,685)	1:A:107:GLN:HG2	1:A:107:GLN:HE21	11	0.41	0.07	0.39
(1,685)	1:A:107:GLN:HG2	1:A:107:GLN:HE21	11	0.41	0.07	0.39
(1,685)	1:A:107:GLN:HG3	1:A:107:GLN:HE21	11	0.41	0.07	0.39
(1,685)	1:A:107:GLN:HG3	1:A:107:GLN:HE21	11	0.41	0.07	0.39
(1,807)	1:A:98:ILE:HG12	1:A:103:VAL:H	11	0.39	0.12	0.44
(1,807)	1:A:98:ILE:HG13	1:A:103:VAL:H	11	0.39	0.12	0.44
(2,228)	1:A:28:CYS:HB2	1:A:28:CYS:H	11	0.28	0.08	0.29
(2,228)	1:A:28:CYS:HB3	1:A:28:CYS:H	11	0.28	0.08	0.29
(2,228)	1:A:29:GLU:HA	1:A:28:CYS:H	11	0.28	0.08	0.29
(2,228)	1:A:32:SER:HA	1:A:28:CYS:H	11	0.28	0.08	0.29
(1,203)	1:A:89:GLU:HB2	1:A:98:ILE:H	11	0.25	0.06	0.27
(1,203)	1:A:89:GLU:HB3	1:A:98:ILE:H	11	0.25	0.06	0.27
(2,193)	1:A:98:ILE:HD11	1:A:109:ASP:H	11	0.25	0.07	0.25
(2,193)	1:A:98:ILE:HD12	1:A:109:ASP:H	11	0.25	0.07	0.25
(2,193)	1:A:98:ILE:HD13	1:A:109:ASP:H	11	0.25	0.07	0.25
(2,193)	1:A:117:LEU:HD11	1:A:109:ASP:H	11	0.25	0.07	0.25
(2,193)	1:A:117:LEU:HD12	1:A:109:ASP:H	11	0.25	0.07	0.25
(2,193)	1:A:117:LEU:HD13	1:A:109:ASP:H	11	0.25	0.07	0.25
(2,193)	1:A:117:LEU:HD21	1:A:109:ASP:H	11	0.25	0.07	0.25
(2,193)	1:A:117:LEU:HD22	1:A:109:ASP:H	11	0.25	0.07	0.25
(2,193)	1:A:117:LEU:HD23	1:A:109:ASP:H	11	0.25	0.07	0.25
(1,788)	1:A:80:CYS:H	1:A:78:GLU:H	11	0.24	0.1	0.21
(1,228)	1:A:92:CYS:HB2	1:A:93:SER:H	11	0.22	0.07	0.22
(1,228)	1:A:92:CYS:HB3	1:A:93:SER:H	11	0.22	0.07	0.22
(1,679)	1:A:78:GLU:HG2	1:A:79:ASN:HD22	11	0.22	0.09	0.19
(1,679)	1:A:78:GLU:HG3	1:A:79:ASN:HD22	11	0.22	0.09	0.19
(2,388)	1:A:64:ARG:HD2	1:A:68:GLU:H	11	0.21	0.08	0.19
(2,388)	1:A:64:ARG:HD3	1:A:68:GLU:H	11	0.21	0.08	0.19
(2,388)	1:A:66:ASP:HB2	1:A:68:GLU:H	11	0.21	0.08	0.19
(2,388)	1:A:66:ASP:HB3	1:A:68:GLU:H	11	0.21	0.08	0.19
(1,510)	1:A:48:GLU:HB2	1:A:48:GLU:H	11	0.18	0.04	0.17

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)	Median (Å)
(1,510)	1:A:48:GLU:HB3	1:A:48:GLU:H	11	0.18	0.04	0.17
(1,792)	1:A:97:CYS:HB2	1:A:91:THR:H	11	0.17	0.04	0.17
(1,792)	1:A:97:CYS:HB3	1:A:91:THR:H	11	0.17	0.04	0.17
(1,482)	1:A:11:ASN:HD21	1:A:11:ASN:H	11	0.17	0.03	0.15
(1,240)	1:A:90:PHE:H	1:A:98:ILE:HD11	11	0.16	0.04	0.15
(1,240)	1:A:90:PHE:H	1:A:98:ILE:HD12	11	0.16	0.04	0.15
(1,240)	1:A:90:PHE:H	1:A:98:ILE:HD13	11	0.16	0.04	0.15
(1,607)	1:A:11:ASN:HB2	1:A:11:ASN:HD21	11	0.15	0.02	0.16
(1,607)	1:A:11:ASN:HB3	1:A:11:ASN:HD21	11	0.15	0.02	0.16
(2,376)	1:A:61:VAL:HB	1:A:88:ASP:H	11	0.15	0.02	0.15
(2,376)	1:A:62:SER:H	1:A:88:ASP:H	11	0.15	0.02	0.15
(2,376)	1:A:87:PRO:HB2	1:A:88:ASP:H	11	0.15	0.02	0.15
(2,376)	1:A:87:PRO:HB3	1:A:88:ASP:H	11	0.15	0.02	0.15
(1,496)	1:A:31:GLY:HA2	1:A:31:GLY:H	11	0.13	0.01	0.13
(1,496)	1:A:31:GLY:HA3	1:A:31:GLY:H	11	0.13	0.01	0.13
(1,654)	1:A:107:GLN:HB2	1:A:107:GLN:HE22	10	0.44	0.04	0.44
(1,654)	1:A:107:GLN:HB2	1:A:107:GLN:HE22	10	0.44	0.04	0.44
(1,654)	1:A:107:GLN:HB3	1:A:107:GLN:HE22	10	0.44	0.04	0.44
(1,654)	1:A:107:GLN:HB3	1:A:107:GLN:HE22	10	0.44	0.04	0.44
(1,670)	1:A:107:GLN:HB2	1:A:105:ASN:HD22	10	0.4	0.15	0.44
(1,670)	1:A:107:GLN:HB2	1:A:105:ASN:HD22	10	0.4	0.15	0.44
(1,670)	1:A:107:GLN:HB3	1:A:105:ASN:HD22	10	0.4	0.15	0.44
(1,670)	1:A:107:GLN:HB3	1:A:105:ASN:HD22	10	0.4	0.15	0.44
(1,853)	1:A:10:CYS:HB2	1:A:12:ASN:H	10	0.33	0.09	0.37
(1,853)	1:A:10:CYS:HB3	1:A:12:ASN:H	10	0.33	0.09	0.37
(1,99)	1:A:98:ILE:HG12	1:A:99:SER:H	10	0.32	0.1	0.34
(1,99)	1:A:98:ILE:HG13	1:A:99:SER:H	10	0.32	0.1	0.34
(1,628)	1:A:71:CYS:HB2	1:A:57:GLN:HE22	10	0.31	0.13	0.28
(1,628)	1:A:71:CYS:HB3	1:A:57:GLN:HE22	10	0.31	0.13	0.28
(1,759)	1:A:57:GLN:HE21	1:A:71:CYS:HA	10	0.27	0.07	0.28
(1,761)	1:A:72:ASP:H	1:A:57:GLN:HE21	10	0.25	0.07	0.24
(1,900)	1:A:83:ILE:HG12	1:A:82:ASN:H	10	0.2	0.04	0.2
(1,900)	1:A:83:ILE:HG13	1:A:82:ASN:H	10	0.2	0.04	0.2
(2,134)	1:A:79:ASN:HB2	1:A:85:CYS:H	10	0.2	0.05	0.22
(2,134)	1:A:79:ASN:HB3	1:A:85:CYS:H	10	0.2	0.05	0.22
(2,134)	1:A:97:CYS:HB2	1:A:85:CYS:H	10	0.2	0.05	0.22
(2,134)	1:A:97:CYS:HB3	1:A:85:CYS:H	10	0.2	0.05	0.22
(2,296)	1:A:113:GLY:HA2	1:A:117:LEU:H	10	0.19	0.04	0.18
(2,296)	1:A:113:GLY:HA3	1:A:117:LEU:H	10	0.19	0.04	0.18
(2,296)	1:A:114:SER:HB2	1:A:117:LEU:H	10	0.19	0.04	0.18
(2,296)	1:A:114:SER:HB3	1:A:117:LEU:H	10	0.19	0.04	0.18
(1,226)	1:A:92:CYS:HB2	1:A:94:SER:H	10	0.18	0.05	0.18

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)	Median (Å)
(1,226)	1:A:92:CYS:HB3	1:A:94:SER:H	10	0.18	0.05	0.18
(1,22)	1:A:91:THR:H	1:A:92:CYS:H	10	0.18	0.02	0.18
(1,712)	1:A:32:SER:H	1:A:11:ASN:H	10	0.17	0.05	0.17
(1,734)	1:A:32:SER:H	1:A:11:ASN:H	10	0.17	0.05	0.17
(2,382)	1:A:72:ASP:HB2	1:A:73:SER:H	10	0.15	0.03	0.14
(2,382)	1:A:72:ASP:HB3	1:A:73:SER:H	10	0.15	0.03	0.14
(1,392)	1:A:52:GLY:HA2	1:A:53:ALA:H	10	0.12	0.01	0.12
(1,392)	1:A:52:GLY:HA3	1:A:53:ALA:H	10	0.12	0.01	0.12
(1,770)	1:A:63:TRP:H	1:A:77:GLU:HG2	9	0.7	0.12	0.73
(1,770)	1:A:63:TRP:H	1:A:77:GLU:HG3	9	0.7	0.12	0.73
(1,850)	1:A:12:ASN:H	1:A:11:ASN:HD22	9	0.48	0.05	0.49
(2,11)	1:A:108:ASP:HA	1:A:113:GLY:H	9	0.45	0.06	0.46
(2,11)	1:A:109:ASP:HA	1:A:113:GLY:H	9	0.45	0.06	0.46
(2,11)	1:A:110:CYS:HA	1:A:113:GLY:H	9	0.45	0.06	0.46
(2,11)	1:A:114:SER:HG	1:A:113:GLY:H	9	0.45	0.06	0.46
(1,80)	1:A:44:CYS:HB2	1:A:45:ARG:H	9	0.45	0.15	0.51
(1,80)	1:A:44:CYS:HB3	1:A:45:ARG:H	9	0.45	0.15	0.51
(1,346)	1:A:32:SER:H	1:A:31:GLY:H	9	0.4	0.14	0.42
(1,750)	1:A:57:GLN:HB2	1:A:52:GLY:H	9	0.37	0.13	0.41
(1,750)	1:A:57:GLN:HB2	1:A:52:GLY:H	9	0.37	0.13	0.41
(1,750)	1:A:57:GLN:HB3	1:A:52:GLY:H	9	0.37	0.13	0.41
(1,750)	1:A:57:GLN:HB3	1:A:52:GLY:H	9	0.37	0.13	0.41
(1,704)	1:A:100:ARG:HG2	1:A:100:ARG:H	9	0.36	0.07	0.32
(1,704)	1:A:100:ARG:HG2	1:A:100:ARG:H	9	0.36	0.07	0.32
(1,704)	1:A:100:ARG:HG3	1:A:100:ARG:H	9	0.36	0.07	0.32
(1,704)	1:A:100:ARG:HG3	1:A:100:ARG:H	9	0.36	0.07	0.32
(1,189)	1:A:101:ASN:HB2	1:A:101:ASN:H	9	0.34	0.02	0.34
(1,189)	1:A:101:ASN:HB3	1:A:101:ASN:H	9	0.34	0.02	0.34
(1,14)	1:A:110:CYS:H	1:A:109:ASP:H	9	0.3	0.07	0.34
(2,303)	1:A:75:GLU:HB2	1:A:77:GLU:H	9	0.27	0.09	0.22
(2,303)	1:A:75:GLU:HB3	1:A:77:GLU:H	9	0.27	0.09	0.22
(2,303)	1:A:77:GLU:HG2	1:A:77:GLU:H	9	0.27	0.09	0.22
(2,303)	1:A:77:GLU:HG3	1:A:77:GLU:H	9	0.27	0.09	0.22
(2,303)	1:A:78:GLU:HB2	1:A:77:GLU:H	9	0.27	0.09	0.22
(2,303)	1:A:78:GLU:HB3	1:A:77:GLU:H	9	0.27	0.09	0.22
(2,303)	1:A:87:PRO:HG2	1:A:77:GLU:H	9	0.27	0.09	0.22
(2,303)	1:A:87:PRO:HG3	1:A:77:GLU:H	9	0.27	0.09	0.22
(1,553)	1:A:115:ASP:HB2	1:A:104:CYS:H	9	0.25	0.1	0.21
(1,553)	1:A:115:ASP:HB3	1:A:104:CYS:H	9	0.25	0.1	0.21
(1,335)	1:A:45:ARG:HD2	1:A:24:GLY:H	9	0.25	0.1	0.23
(1,335)	1:A:45:ARG:HD3	1:A:24:GLY:H	9	0.25	0.1	0.23
(2,293)	1:A:18:SER:HA	1:A:8:PHE:H	9	0.24	0.11	0.17

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)	Median (Å)
(2,293)	1:A:18:SER:HB2	1:A:8:PHE:H	9	0.24	0.11	0.17
(2,293)	1:A:18:SER:HB3	1:A:8:PHE:H	9	0.24	0.11	0.17
(2,109)	1:A:89:GLU:HB2	1:A:100:ARG:H	9	0.24	0.02	0.24
(2,109)	1:A:89:GLU:HB3	1:A:100:ARG:H	9	0.24	0.02	0.24
(2,109)	1:A:100:ARG:HB2	1:A:100:ARG:H	9	0.24	0.02	0.24
(2,109)	1:A:100:ARG:HB3	1:A:100:ARG:H	9	0.24	0.02	0.24
(2,305)	1:A:72:ASP:HB2	1:A:72:ASP:H	9	0.24	0.13	0.14
(2,305)	1:A:72:ASP:HB3	1:A:72:ASP:H	9	0.24	0.13	0.14
(2,305)	1:A:72:ASP:HB3	1:A:72:ASP:H	9	0.24	0.13	0.14
(2,305)	1:A:76:ASP:HB2	1:A:72:ASP:H	9	0.24	0.13	0.14
(2,305)	1:A:76:ASP:HB2	1:A:72:ASP:H	9	0.24	0.13	0.14
(2,305)	1:A:76:ASP:HB3	1:A:72:ASP:H	9	0.24	0.13	0.14
(2,22)	1:A:75:GLU:HA	1:A:78:GLU:H	9	0.22	0.08	0.21
(2,22)	1:A:87:PRO:HD2	1:A:78:GLU:H	9	0.22	0.08	0.21
(1,343)	1:A:28:CYS:HB2	1:A:28:CYS:H	9	0.2	0.05	0.19
(1,343)	1:A:28:CYS:HB3	1:A:28:CYS:H	9	0.2	0.05	0.19
(1,96)	1:A:100:ARG:H	1:A:89:GLU:HA	9	0.2	0.05	0.21
(1,184)	1:A:103:VAL:HB	1:A:102:PHE:H	9	0.18	0.04	0.18
(1,811)	1:A:107:GLN:H	1:A:105:ASN:HD21	9	0.18	0.04	0.2
(1,74)	1:A:65:CYS:H	1:A:65:CYS:HB2	9	0.17	0.04	0.17
(1,74)	1:A:65:CYS:H	1:A:65:CYS:HB3	9	0.17	0.04	0.17
(1,378)	1:A:48:GLU:HG2	1:A:49:ILE:H	9	0.17	0.05	0.16
(1,378)	1:A:48:GLU:HG3	1:A:49:ILE:H	9	0.17	0.05	0.16
(1,580)	1:A:48:GLU:HG2	1:A:49:ILE:H	9	0.17	0.05	0.16
(1,580)	1:A:48:GLU:HG3	1:A:49:ILE:H	9	0.17	0.05	0.16
(1,872)	1:A:32:SER:H	1:A:33:ASP:HB2	9	0.17	0.07	0.15
(1,872)	1:A:32:SER:H	1:A:33:ASP:HB3	9	0.17	0.07	0.15
(1,374)	1:A:61:VAL:H	1:A:49:ILE:H	9	0.16	0.03	0.16
(1,781)	1:A:73:SER:H	1:A:71:CYS:HB2	9	0.15	0.04	0.14
(1,781)	1:A:73:SER:H	1:A:71:CYS:HB3	9	0.15	0.04	0.14
(1,313)	1:A:14:GLN:HG2	1:A:14:GLN:H	9	0.15	0.03	0.14
(1,313)	1:A:14:GLN:HG3	1:A:14:GLN:H	9	0.15	0.03	0.14
(1,828)	1:A:85:CYS:HA	1:A:86:SER:H	9	0.13	0.01	0.13
(2,122)	1:A:7:ASP:HA	1:A:16:VAL:H	9	0.12	0.01	0.11
(2,122)	1:A:16:VAL:HA	1:A:16:VAL:H	9	0.12	0.01	0.11
(1,463)	1:A:71:CYS:HB2	1:A:78:GLU:H	8	0.53	0.25	0.54
(1,463)	1:A:71:CYS:HB3	1:A:78:GLU:H	8	0.53	0.25	0.54
(2,276)	1:A:42:ARG:HA	1:A:57:GLN:H	8	0.31	0.13	0.28
(2,276)	1:A:43:THR:HA	1:A:57:GLN:H	8	0.31	0.13	0.28
(2,276)	1:A:56:THR:HB	1:A:57:GLN:H	8	0.31	0.13	0.28
(1,98)	1:A:98:ILE:HG12	1:A:99:SER:H	8	0.26	0.06	0.27
(1,98)	1:A:98:ILE:HG13	1:A:99:SER:H	8	0.26	0.06	0.27

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)	Median (Å)
(1,808)	1:A:116:GLU:HB2	1:A:104:CYS:H	8	0.25	0.08	0.26
(1,808)	1:A:116:GLU:HB3	1:A:104:CYS:H	8	0.25	0.08	0.26
(2,266)	1:A:31:GLY:HA2	1:A:32:SER:H	8	0.25	0.09	0.24
(2,266)	1:A:31:GLY:HA3	1:A:32:SER:H	8	0.25	0.09	0.24
(2,266)	1:A:32:SER:HB2	1:A:32:SER:H	8	0.25	0.09	0.24
(2,266)	1:A:32:SER:HB3	1:A:32:SER:H	8	0.25	0.09	0.24
(2,200)	1:A:77:GLU:HG2	1:A:76:ASP:H	8	0.24	0.11	0.24
(2,200)	1:A:77:GLU:HG3	1:A:76:ASP:H	8	0.24	0.11	0.24
(2,200)	1:A:87:PRO:HG2	1:A:76:ASP:H	8	0.24	0.11	0.24
(2,200)	1:A:87:PRO:HG3	1:A:76:ASP:H	8	0.24	0.11	0.24
(1,542)	1:A:112:ASP:H	1:A:114:SER:H	8	0.23	0.06	0.26
(1,840)	1:A:71:CYS:HB2	1:A:77:GLU:H	8	0.22	0.07	0.2
(1,840)	1:A:71:CYS:HB3	1:A:77:GLU:H	8	0.22	0.07	0.2
(1,15)	1:A:109:ASP:H	1:A:110:CYS:H	8	0.22	0.06	0.24
(1,125)	1:A:114:SER:H	1:A:113:GLY:HA2	8	0.21	0.12	0.15
(1,125)	1:A:114:SER:H	1:A:113:GLY:HA3	8	0.21	0.12	0.15
(1,562)	1:A:102:PHE:HB2	1:A:99:SER:H	8	0.21	0.06	0.21
(1,562)	1:A:102:PHE:HB3	1:A:99:SER:H	8	0.21	0.06	0.21
(1,705)	1:A:100:ARG:H	1:A:100:ARG:HD2	8	0.2	0.08	0.18
(1,705)	1:A:100:ARG:H	1:A:100:ARG:HD3	8	0.2	0.08	0.18
(1,180)	1:A:99:SER:HB2	1:A:102:PHE:H	8	0.18	0.05	0.18
(1,180)	1:A:99:SER:HB3	1:A:102:PHE:H	8	0.18	0.05	0.18
(1,864)	1:A:20:TRP:HA	1:A:20:TRP:HE1	8	0.18	0.02	0.18
(2,328)	1:A:49:ILE:HG21	1:A:62:SER:H	8	0.18	0.05	0.19
(2,328)	1:A:49:ILE:HG22	1:A:62:SER:H	8	0.18	0.05	0.19
(2,328)	1:A:49:ILE:HG23	1:A:62:SER:H	8	0.18	0.05	0.19
(2,328)	1:A:59:ILE:HD11	1:A:62:SER:H	8	0.18	0.05	0.19
(2,328)	1:A:59:ILE:HD12	1:A:62:SER:H	8	0.18	0.05	0.19
(2,328)	1:A:59:ILE:HD13	1:A:62:SER:H	8	0.18	0.05	0.19
(2,328)	1:A:60:PRO:HB2	1:A:62:SER:H	8	0.18	0.05	0.19
(2,328)	1:A:60:PRO:HB3	1:A:62:SER:H	8	0.18	0.05	0.19
(2,328)	1:A:61:VAL:HG11	1:A:62:SER:H	8	0.18	0.05	0.19
(2,328)	1:A:61:VAL:HG12	1:A:62:SER:H	8	0.18	0.05	0.19
(2,328)	1:A:61:VAL:HG13	1:A:62:SER:H	8	0.18	0.05	0.19
(2,328)	1:A:61:VAL:HG21	1:A:62:SER:H	8	0.18	0.05	0.19
(2,328)	1:A:61:VAL:HG21	1:A:62:SER:H	8	0.18	0.05	0.19
(2,328)	1:A:61:VAL:HG22	1:A:62:SER:H	8	0.18	0.05	0.19
(2,328)	1:A:61:VAL:HG22	1:A:62:SER:H	8	0.18	0.05	0.19
(2,328)	1:A:61:VAL:HG23	1:A:62:SER:H	8	0.18	0.05	0.19
(2,328)	1:A:61:VAL:HG23	1:A:62:SER:H	8	0.18	0.05	0.19
(1,627)	1:A:72:ASP:HA	1:A:57:GLN:HE22	8	0.17	0.09	0.12
(1,645)	1:A:101:ASN:HD22	1:A:101:ASN:H	8	0.17	0.03	0.18

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)	Median (Å)
(1,623)	1:A:30:ASP:HB2	1:A:12:ASN:HD22	8	0.16	0.04	0.16
(1,623)	1:A:30:ASP:HB3	1:A:12:ASN:HD22	8	0.16	0.04	0.16
(1,444)	1:A:76:ASP:H	1:A:74:GLY:H	8	0.16	0.06	0.12
(1,905)	1:A:101:ASN:HD21	1:A:105:ASN:HD21	8	0.16	0.04	0.18
(1,419)	1:A:65:CYS:HB2	1:A:66:ASP:H	8	0.15	0.03	0.15
(1,419)	1:A:65:CYS:HB3	1:A:66:ASP:H	8	0.15	0.03	0.15
(1,241)	1:A:86:SER:H	1:A:89:GLU:H	8	0.15	0.02	0.15
(1,190)	1:A:101:ASN:HB2	1:A:101:ASN:H	8	0.14	0.01	0.15
(1,190)	1:A:101:ASN:HB3	1:A:101:ASN:H	8	0.14	0.01	0.15
(1,302)	1:A:14:GLN:H	1:A:12:ASN:H	8	0.14	0.02	0.13
(2,209)	1:A:28:CYS:HB2	1:A:31:GLY:H	8	0.13	0.02	0.13
(2,209)	1:A:28:CYS:HB3	1:A:31:GLY:H	8	0.13	0.02	0.13
(2,209)	1:A:29:GLU:HA	1:A:31:GLY:H	8	0.13	0.02	0.13
(2,209)	1:A:32:SER:HA	1:A:31:GLY:H	8	0.13	0.02	0.13
(2,209)	1:A:32:SER:HB2	1:A:31:GLY:H	8	0.13	0.02	0.13
(2,209)	1:A:32:SER:HB3	1:A:31:GLY:H	8	0.13	0.02	0.13
(1,137)	1:A:109:ASP:H	1:A:113:GLY:HA2	7	0.4	0.21	0.54
(1,137)	1:A:109:ASP:H	1:A:113:GLY:HA3	7	0.4	0.21	0.54
(1,431)	1:A:72:ASP:H	1:A:70:ASP:H	7	0.39	0.21	0.39
(1,813)	1:A:107:GLN:HE21	1:A:108:ASP:HA	7	0.37	0.23	0.36
(1,347)	1:A:31:GLY:H	1:A:28:CYS:H	7	0.3	0.15	0.27
(1,446)	1:A:73:SER:H	1:A:74:GLY:H	7	0.27	0.15	0.19
(1,897)	1:A:77:GLU:HB2	1:A:69:ASN:HD22	7	0.26	0.11	0.26
(1,897)	1:A:77:GLU:HB3	1:A:69:ASN:HD22	7	0.26	0.11	0.26
(1,56)	1:A:70:ASP:H	1:A:71:CYS:H	7	0.25	0.15	0.16
(2,327)	1:A:64:ARG:HG2	1:A:71:CYS:H	7	0.24	0.1	0.22
(2,327)	1:A:64:ARG:HG3	1:A:71:CYS:H	7	0.24	0.1	0.22
(2,327)	1:A:68:GLU:HG2	1:A:71:CYS:H	7	0.24	0.1	0.22
(2,327)	1:A:68:GLU:HG3	1:A:71:CYS:H	7	0.24	0.1	0.22
(1,319)	1:A:16:VAL:H	1:A:9:VAL:HA	7	0.24	0.06	0.24
(1,445)	1:A:75:GLU:H	1:A:74:GLY:H	7	0.24	0.06	0.21
(1,844)	1:A:79:ASN:HB2	1:A:92:CYS:H	7	0.2	0.04	0.2
(1,844)	1:A:79:ASN:HB3	1:A:92:CYS:H	7	0.2	0.04	0.2
(2,246)	1:A:90:PHE:HB2	1:A:100:ARG:H	7	0.19	0.05	0.16
(2,246)	1:A:90:PHE:HB3	1:A:100:ARG:H	7	0.19	0.05	0.16
(1,612)	1:A:15:CYS:H	1:A:14:GLN:HE22	7	0.16	0.02	0.17
(1,350)	1:A:31:GLY:H	1:A:32:SER:H	7	0.16	0.07	0.13
(1,94)	1:A:120:ALA:H	1:A:119:CYS:HB2	7	0.16	0.05	0.14
(1,94)	1:A:120:ALA:H	1:A:119:CYS:HB3	7	0.16	0.05	0.14
(1,295)	1:A:15:CYS:HA	1:A:10:CYS:H	7	0.16	0.07	0.13
(1,196)	1:A:98:ILE:HA	1:A:99:SER:H	7	0.16	0.03	0.14
(1,882)	1:A:58:CYS:HA	1:A:50:SER:H	7	0.14	0.03	0.13

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)	Median (Å)
(1,832)	1:A:35:SER:H	1:A:38:GLN:H	7	0.14	0.02	0.14
(1,867)	1:A:34:GLU:HG2	1:A:24:GLY:H	7	0.13	0.02	0.13
(1,867)	1:A:34:GLU:HG3	1:A:24:GLY:H	7	0.13	0.02	0.13
(2,180)	1:A:10:CYS:HA	1:A:11:ASN:HD21	6	0.39	0.01	0.38
(2,180)	1:A:11:ASN:HA	1:A:11:ASN:HD21	6	0.39	0.01	0.38
(1,636)	1:A:78:GLU:HB2	1:A:79:ASN:HD22	6	0.36	0.1	0.39
(1,636)	1:A:78:GLU:HB2	1:A:79:ASN:HD22	6	0.36	0.1	0.39
(1,636)	1:A:78:GLU:HB3	1:A:79:ASN:HD22	6	0.36	0.1	0.39
(1,636)	1:A:78:GLU:HB3	1:A:79:ASN:HD22	6	0.36	0.1	0.39
(1,134)	1:A:110:CYS:H	1:A:109:ASP:HB2	6	0.34	0.14	0.3
(1,134)	1:A:110:CYS:H	1:A:109:ASP:HB2	6	0.34	0.14	0.3
(1,134)	1:A:110:CYS:H	1:A:109:ASP:HB3	6	0.34	0.14	0.3
(1,134)	1:A:110:CYS:H	1:A:109:ASP:HB3	6	0.34	0.14	0.3
(2,244)	1:A:45:ARG:HA	1:A:47:HIS:H	6	0.32	0.04	0.33
(2,244)	1:A:60:PRO:HA	1:A:47:HIS:H	6	0.32	0.04	0.33
(1,787)	1:A:73:SER:H	1:A:76:ASP:H	6	0.24	0.23	0.13
(1,597)	1:A:74:GLY:HA2	1:A:69:ASN:HD22	6	0.22	0.1	0.19
(1,597)	1:A:74:GLY:HA3	1:A:69:ASN:HD22	6	0.22	0.1	0.19
(1,598)	1:A:74:GLY:HA2	1:A:69:ASN:HD22	6	0.22	0.1	0.19
(1,598)	1:A:74:GLY:HA3	1:A:69:ASN:HD22	6	0.22	0.1	0.19
(1,822)	1:A:113:GLY:HA2	1:A:116:GLU:H	6	0.21	0.04	0.2
(1,822)	1:A:113:GLY:HA3	1:A:116:GLU:H	6	0.21	0.04	0.2
(1,683)	1:A:78:GLU:HG2	1:A:79:ASN:HD21	6	0.2	0.05	0.2
(1,683)	1:A:78:GLU:HG3	1:A:79:ASN:HD21	6	0.2	0.05	0.2
(2,46)	1:A:114:SER:HG	1:A:115:ASP:H	6	0.2	0.07	0.18
(2,46)	1:A:116:GLU:HA	1:A:115:ASP:H	6	0.2	0.07	0.18
(2,46)	1:A:119:CYS:HA	1:A:115:ASP:H	6	0.2	0.07	0.18
(2,39)	1:A:98:ILE:HD11	1:A:115:ASP:H	6	0.2	0.05	0.2
(2,39)	1:A:98:ILE:HD12	1:A:115:ASP:H	6	0.2	0.05	0.2
(2,39)	1:A:98:ILE:HD13	1:A:115:ASP:H	6	0.2	0.05	0.2
(2,39)	1:A:117:LEU:HD11	1:A:115:ASP:H	6	0.2	0.05	0.2
(2,39)	1:A:117:LEU:HD12	1:A:115:ASP:H	6	0.2	0.05	0.2
(2,39)	1:A:117:LEU:HD13	1:A:115:ASP:H	6	0.2	0.05	0.2
(2,39)	1:A:117:LEU:HD21	1:A:115:ASP:H	6	0.2	0.05	0.2
(2,39)	1:A:117:LEU:HD22	1:A:115:ASP:H	6	0.2	0.05	0.2
(2,39)	1:A:117:LEU:HD23	1:A:115:ASP:H	6	0.2	0.05	0.2
(1,476)	1:A:7:ASP:H	1:A:3:CYS:HB2	6	0.19	0.04	0.2
(1,476)	1:A:7:ASP:H	1:A:3:CYS:HB3	6	0.19	0.04	0.2
(2,279)	1:A:10:CYS:HA	1:A:11:ASN:H	6	0.19	0.04	0.2
(2,279)	1:A:11:ASN:HA	1:A:11:ASN:H	6	0.19	0.04	0.2
(1,69)	1:A:78:GLU:HG2	1:A:78:GLU:H	6	0.18	0.07	0.16
(1,69)	1:A:78:GLU:HG3	1:A:78:GLU:H	6	0.18	0.07	0.16

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)	Median (Å)
(1,215)	1:A:96:ARG:H	1:A:92:CYS:HB2	6	0.17	0.04	0.16
(1,215)	1:A:96:ARG:H	1:A:92:CYS:HB3	6	0.17	0.04	0.16
(1,603)	1:A:32:SER:HB2	1:A:11:ASN:HD22	6	0.16	0.03	0.16
(1,603)	1:A:32:SER:HB3	1:A:11:ASN:HD22	6	0.16	0.03	0.16
(1,851)	1:A:32:SER:H	1:A:11:ASN:HD22	6	0.16	0.02	0.15
(1,680)	1:A:79:ASN:HD22	1:A:79:ASN:HB2	6	0.15	0.03	0.15
(1,680)	1:A:79:ASN:HD22	1:A:79:ASN:HB3	6	0.15	0.03	0.15
(1,41)	1:A:96:ARG:H	1:A:97:CYS:H	6	0.14	0.02	0.15
(1,42)	1:A:96:ARG:H	1:A:97:CYS:H	6	0.14	0.02	0.15
(1,116)	1:A:116:GLU:HG2	1:A:116:GLU:H	6	0.14	0.03	0.12
(1,116)	1:A:116:GLU:HG3	1:A:116:GLU:H	6	0.14	0.03	0.12
(1,906)	1:A:13:GLY:HA2	1:A:12:ASN:HD22	6	0.12	0.01	0.12
(1,906)	1:A:13:GLY:HA3	1:A:12:ASN:HD22	6	0.12	0.01	0.12
(2,348)	1:A:35:SER:HB2	1:A:35:SER:H	6	0.12	0.01	0.12
(2,348)	1:A:35:SER:HB3	1:A:35:SER:H	6	0.12	0.01	0.12
(2,348)	1:A:36:PRO:HA	1:A:35:SER:H	6	0.12	0.01	0.12
(1,890)	1:A:81:GLY:HA2	1:A:63:TRP:HE1	5	0.44	0.23	0.5
(1,890)	1:A:81:GLY:HA2	1:A:63:TRP:HE1	5	0.44	0.23	0.5
(1,890)	1:A:81:GLY:HA3	1:A:63:TRP:HE1	5	0.44	0.23	0.5
(1,890)	1:A:81:GLY:HA3	1:A:63:TRP:HE1	5	0.44	0.23	0.5
(1,871)	1:A:30:ASP:HB2	1:A:32:SER:H	5	0.35	0.11	0.37
(1,871)	1:A:30:ASP:HB3	1:A:32:SER:H	5	0.35	0.11	0.37
(1,786)	1:A:71:CYS:H	1:A:76:ASP:H	5	0.3	0.15	0.21
(1,139)	1:A:109:ASP:H	1:A:109:ASP:HB2	5	0.29	0.09	0.3
(1,139)	1:A:109:ASP:H	1:A:109:ASP:HB3	5	0.29	0.09	0.3
(2,149)	1:A:49:ILE:HG21	1:A:59:ILE:H	5	0.26	0.1	0.24
(2,149)	1:A:49:ILE:HG22	1:A:59:ILE:H	5	0.26	0.1	0.24
(2,149)	1:A:49:ILE:HG23	1:A:59:ILE:H	5	0.26	0.1	0.24
(2,149)	1:A:59:ILE:HD11	1:A:59:ILE:H	5	0.26	0.1	0.24
(2,149)	1:A:59:ILE:HD12	1:A:59:ILE:H	5	0.26	0.1	0.24
(2,149)	1:A:59:ILE:HD13	1:A:59:ILE:H	5	0.26	0.1	0.24
(2,149)	1:A:59:ILE:HG21	1:A:59:ILE:H	5	0.26	0.1	0.24
(2,149)	1:A:59:ILE:HG22	1:A:59:ILE:H	5	0.26	0.1	0.24
(2,149)	1:A:59:ILE:HG23	1:A:59:ILE:H	5	0.26	0.1	0.24
(1,293)	1:A:8:PHE:HB2	1:A:9:VAL:H	5	0.25	0.08	0.29
(1,293)	1:A:8:PHE:HB3	1:A:9:VAL:H	5	0.25	0.08	0.29
(1,894)	1:A:66:ASP:H	1:A:77:GLU:HG2	5	0.25	0.11	0.3
(1,894)	1:A:66:ASP:H	1:A:77:GLU:HG3	5	0.25	0.11	0.3
(1,895)	1:A:77:GLU:HG2	1:A:66:ASP:H	5	0.25	0.11	0.3
(1,895)	1:A:77:GLU:HG3	1:A:66:ASP:H	5	0.25	0.11	0.3
(1,52)	1:A:76:ASP:H	1:A:77:GLU:H	5	0.23	0.08	0.27
(1,53)	1:A:77:GLU:H	1:A:76:ASP:H	5	0.23	0.08	0.27

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)	Median (Å)
(1,379)	1:A:50:SER:H	1:A:50:SER:HA	5	0.22	0.06	0.23
(2,3)	1:A:49:ILE:HD11	1:A:49:ILE:H	5	0.22	0.1	0.16
(2,3)	1:A:49:ILE:HD12	1:A:49:ILE:H	5	0.22	0.1	0.16
(2,3)	1:A:49:ILE:HD13	1:A:49:ILE:H	5	0.22	0.1	0.16
(2,3)	1:A:49:ILE:HG12	1:A:49:ILE:H	5	0.22	0.1	0.16
(2,3)	1:A:49:ILE:HG13	1:A:49:ILE:H	5	0.22	0.1	0.16
(2,3)	1:A:49:ILE:HG21	1:A:49:ILE:H	5	0.22	0.1	0.16
(2,3)	1:A:49:ILE:HG22	1:A:49:ILE:H	5	0.22	0.1	0.16
(2,3)	1:A:49:ILE:HG23	1:A:49:ILE:H	5	0.22	0.1	0.16
(2,3)	1:A:59:ILE:HD11	1:A:49:ILE:H	5	0.22	0.1	0.16
(2,3)	1:A:59:ILE:HD12	1:A:49:ILE:H	5	0.22	0.1	0.16
(2,3)	1:A:59:ILE:HD13	1:A:49:ILE:H	5	0.22	0.1	0.16
(2,3)	1:A:59:ILE:HG21	1:A:49:ILE:H	5	0.22	0.1	0.16
(2,3)	1:A:59:ILE:HG22	1:A:49:ILE:H	5	0.22	0.1	0.16
(2,3)	1:A:59:ILE:HG23	1:A:49:ILE:H	5	0.22	0.1	0.16
(2,3)	1:A:61:VAL:HG11	1:A:49:ILE:H	5	0.22	0.1	0.16
(2,3)	1:A:61:VAL:HG12	1:A:49:ILE:H	5	0.22	0.1	0.16
(2,3)	1:A:61:VAL:HG13	1:A:49:ILE:H	5	0.22	0.1	0.16
(2,3)	1:A:61:VAL:HG21	1:A:49:ILE:H	5	0.22	0.1	0.16
(2,3)	1:A:61:VAL:HG21	1:A:49:ILE:H	5	0.22	0.1	0.16
(2,3)	1:A:61:VAL:HG22	1:A:49:ILE:H	5	0.22	0.1	0.16
(2,3)	1:A:61:VAL:HG22	1:A:49:ILE:H	5	0.22	0.1	0.16
(2,3)	1:A:61:VAL:HG23	1:A:49:ILE:H	5	0.22	0.1	0.16
(2,3)	1:A:61:VAL:HG23	1:A:49:ILE:H	5	0.22	0.1	0.16
(1,626)	1:A:71:CYS:HA	1:A:57:GLN:HE22	5	0.21	0.09	0.18
(2,91)	1:A:83:ILE:HD11	1:A:84:THR:H	5	0.2	0.05	0.2
(2,91)	1:A:83:ILE:HD12	1:A:84:THR:H	5	0.2	0.05	0.2
(2,91)	1:A:83:ILE:HD13	1:A:84:THR:H	5	0.2	0.05	0.2
(2,91)	1:A:83:ILE:HG21	1:A:84:THR:H	5	0.2	0.05	0.2
(2,91)	1:A:83:ILE:HG22	1:A:84:THR:H	5	0.2	0.05	0.2
(2,91)	1:A:83:ILE:HG23	1:A:84:THR:H	5	0.2	0.05	0.2
(1,639)	1:A:82:ASN:H	1:A:82:ASN:HD21	5	0.2	0.04	0.21
(1,433)	1:A:74:GLY:HA2	1:A:71:CYS:H	5	0.19	0.04	0.2
(1,433)	1:A:74:GLY:HA3	1:A:71:CYS:H	5	0.19	0.04	0.2
(2,56)	1:A:114:SER:HA	1:A:117:LEU:H	5	0.18	0.03	0.18
(2,123)	1:A:16:VAL:HG11	1:A:33:ASP:H	5	0.18	0.05	0.19
(2,123)	1:A:16:VAL:HG12	1:A:33:ASP:H	5	0.18	0.05	0.19
(2,123)	1:A:16:VAL:HG13	1:A:33:ASP:H	5	0.18	0.05	0.19
(2,123)	1:A:16:VAL:HG21	1:A:33:ASP:H	5	0.18	0.05	0.19
(2,123)	1:A:16:VAL:HG22	1:A:33:ASP:H	5	0.18	0.05	0.19
(2,123)	1:A:16:VAL:HG23	1:A:33:ASP:H	5	0.18	0.05	0.19
(2,238)	1:A:10:CYS:HB2	1:A:11:ASN:H	5	0.18	0.08	0.12

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)	Median (Å)
(2,238)	1:A:10:CYS:HB3	1:A:11:ASN:H	5	0.18	0.08	0.12
(2,238)	1:A:11:ASN:HB2	1:A:11:ASN:H	5	0.18	0.08	0.12
(2,238)	1:A:11:ASN:HB3	1:A:11:ASN:H	5	0.18	0.08	0.12
(2,238)	1:A:28:CYS:HB2	1:A:11:ASN:H	5	0.18	0.08	0.12
(2,238)	1:A:28:CYS:HB3	1:A:11:ASN:H	5	0.18	0.08	0.12
(2,272)	1:A:19:ARG:HD2	1:A:19:ARG:H	5	0.18	0.05	0.2
(2,272)	1:A:19:ARG:HD3	1:A:19:ARG:H	5	0.18	0.05	0.2
(2,272)	1:A:20:TRP:HB2	1:A:19:ARG:H	5	0.18	0.05	0.2
(2,272)	1:A:20:TRP:HB3	1:A:19:ARG:H	5	0.18	0.05	0.2
(1,468)	1:A:78:GLU:HG2	1:A:79:ASN:H	5	0.18	0.03	0.18
(1,468)	1:A:78:GLU:HG3	1:A:79:ASN:H	5	0.18	0.03	0.18
(1,816)	1:A:109:ASP:H	1:A:116:GLU:HG2	5	0.17	0.03	0.16
(1,816)	1:A:109:ASP:H	1:A:116:GLU:HG3	5	0.17	0.03	0.16
(2,101)	1:A:37:GLU:HB2	1:A:38:GLN:HE21	5	0.17	0.04	0.18
(2,101)	1:A:37:GLU:HB3	1:A:38:GLN:HE21	5	0.17	0.04	0.18
(2,101)	1:A:38:GLN:HB2	1:A:38:GLN:HE21	5	0.17	0.04	0.18
(2,101)	1:A:38:GLN:HB3	1:A:38:GLN:HE21	5	0.17	0.04	0.18
(1,299)	1:A:11:ASN:H	1:A:12:ASN:H	5	0.16	0.03	0.16
(1,716)	1:A:28:CYS:HB2	1:A:14:GLN:HE22	5	0.16	0.03	0.16
(1,716)	1:A:28:CYS:HB3	1:A:14:GLN:HE22	5	0.16	0.03	0.16
(2,295)	1:A:10:CYS:HA	1:A:38:GLN:HE21	5	0.15	0.02	0.14
(2,295)	1:A:38:GLN:HA	1:A:38:GLN:HE21	5	0.15	0.02	0.14
(2,112)	1:A:83:ILE:HG12	1:A:84:THR:H	5	0.15	0.05	0.13
(2,112)	1:A:83:ILE:HG13	1:A:84:THR:H	5	0.15	0.05	0.13
(2,112)	1:A:84:THR:HG1	1:A:84:THR:H	5	0.15	0.05	0.13
(2,112)	1:A:84:THR:HG21	1:A:84:THR:H	5	0.15	0.05	0.13
(2,112)	1:A:84:THR:HG22	1:A:84:THR:H	5	0.15	0.05	0.13
(2,112)	1:A:84:THR:HG23	1:A:84:THR:H	5	0.15	0.05	0.13
(1,707)	1:A:45:ARG:HD2	1:A:45:ARG:H	5	0.15	0.04	0.13
(1,707)	1:A:45:ARG:HD3	1:A:45:ARG:H	5	0.15	0.04	0.13
(1,709)	1:A:45:ARG:HD2	1:A:45:ARG:H	5	0.15	0.04	0.13
(1,709)	1:A:45:ARG:HD3	1:A:45:ARG:H	5	0.15	0.04	0.13
(1,439)	1:A:75:GLU:H	1:A:73:SER:H	5	0.15	0.01	0.14
(1,432)	1:A:70:ASP:HB2	1:A:70:ASP:H	5	0.15	0.04	0.13
(1,432)	1:A:70:ASP:HB3	1:A:70:ASP:H	5	0.15	0.04	0.13
(1,477)	1:A:9:VAL:HA	1:A:9:VAL:H	5	0.13	0.02	0.12
(1,717)	1:A:20:TRP:HE1	1:A:20:TRP:H	5	0.13	0.02	0.13
(1,574)	1:A:64:ARG:H	1:A:65:CYS:H	5	0.13	0.01	0.12
(2,117)	1:A:14:GLN:HB2	1:A:12:ASN:HD21	5	0.13	0.01	0.13
(2,117)	1:A:14:GLN:HB3	1:A:12:ASN:HD21	5	0.13	0.01	0.13
(1,121)	1:A:114:SER:HA	1:A:115:ASP:H	5	0.12	0.01	0.12
(1,662)	1:A:102:PHE:HB2	1:A:105:ASN:HD21	5	0.12	0.01	0.12

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)	Median (Å)
(1,662)	1:A:102:PHE:HB3	1:A:105:ASN:HD21	5	0.12	0.01	0.12
(1,527)	1:A:67:GLY:HA2	1:A:67:GLY:H	5	0.11	0.0	0.11
(1,527)	1:A:67:GLY:HA3	1:A:67:GLY:H	5	0.11	0.0	0.11
(1,253)	1:A:83:ILE:HB	1:A:83:ILE:H	4	0.84	0.01	0.84
(1,119)	1:A:112:ASP:H	1:A:115:ASP:H	4	0.48	0.03	0.47
(2,302)	1:A:114:SER:HG	1:A:120:ALA:H	4	0.43	0.05	0.42
(2,302)	1:A:119:CYS:HA	1:A:120:ALA:H	4	0.43	0.05	0.42
(1,582)	1:A:46:ILE:H	1:A:45:ARG:H	4	0.31	0.08	0.35
(1,777)	1:A:77:GLU:HB2	1:A:70:ASP:H	4	0.3	0.1	0.34
(1,777)	1:A:77:GLU:HB3	1:A:70:ASP:H	4	0.3	0.1	0.34
(1,690)	1:A:61:VAL:HG11	1:A:49:ILE:H	4	0.3	0.05	0.29
(1,690)	1:A:61:VAL:HG12	1:A:49:ILE:H	4	0.3	0.05	0.29
(1,690)	1:A:61:VAL:HG13	1:A:49:ILE:H	4	0.3	0.05	0.29
(1,690)	1:A:61:VAL:HG21	1:A:49:ILE:H	4	0.3	0.05	0.29
(1,690)	1:A:61:VAL:HG22	1:A:49:ILE:H	4	0.3	0.05	0.29
(1,690)	1:A:61:VAL:HG23	1:A:49:ILE:H	4	0.3	0.05	0.29
(1,586)	1:A:69:ASN:HA	1:A:64:ARG:H	4	0.26	0.15	0.19
(1,165)	1:A:104:CYS:H	1:A:116:GLU:HA	4	0.26	0.09	0.28
(2,135)	1:A:79:ASN:HB2	1:A:79:ASN:HD21	4	0.24	0.06	0.26
(2,135)	1:A:97:CYS:HB2	1:A:79:ASN:HD21	4	0.24	0.06	0.26
(2,257)	1:A:32:SER:HB2	1:A:38:GLN:HE22	4	0.24	0.13	0.22
(2,257)	1:A:32:SER:HB3	1:A:38:GLN:HE22	4	0.24	0.13	0.22
(2,257)	1:A:33:ASP:HA	1:A:38:GLN:HE22	4	0.24	0.13	0.22
(2,257)	1:A:35:SER:HB2	1:A:38:GLN:HE22	4	0.24	0.13	0.22
(2,257)	1:A:35:SER:HB3	1:A:38:GLN:HE22	4	0.24	0.13	0.22
(1,136)	1:A:112:ASP:H	1:A:110:CYS:H	4	0.22	0.02	0.22
(1,549)	1:A:115:ASP:HA	1:A:104:CYS:H	4	0.22	0.06	0.22
(1,18)	1:A:81:GLY:H	1:A:82:ASN:H	4	0.2	0.07	0.18
(2,151)	1:A:46:ILE:HD11	1:A:46:ILE:H	4	0.2	0.06	0.2
(2,151)	1:A:46:ILE:HD12	1:A:46:ILE:H	4	0.2	0.06	0.2
(2,151)	1:A:46:ILE:HD13	1:A:46:ILE:H	4	0.2	0.06	0.2
(2,151)	1:A:46:ILE:HG21	1:A:46:ILE:H	4	0.2	0.06	0.2
(2,151)	1:A:46:ILE:HG22	1:A:46:ILE:H	4	0.2	0.06	0.2
(2,151)	1:A:46:ILE:HG23	1:A:46:ILE:H	4	0.2	0.06	0.2
(1,873)	1:A:34:GLU:HB2	1:A:33:ASP:H	4	0.19	0.06	0.19
(1,873)	1:A:34:GLU:HB3	1:A:33:ASP:H	4	0.19	0.06	0.19
(1,673)	1:A:17:PRO:HB2	1:A:20:TRP:HE1	4	0.19	0.07	0.2
(1,673)	1:A:17:PRO:HB3	1:A:20:TRP:HE1	4	0.19	0.07	0.2
(1,921)	1:A:8:PHE:HA	1:A:16:VAL:HG21	4	0.19	0.04	0.2
(1,921)	1:A:8:PHE:HA	1:A:16:VAL:HG22	4	0.19	0.04	0.2
(1,921)	1:A:8:PHE:HA	1:A:16:VAL:HG23	4	0.19	0.04	0.2
(1,674)	1:A:17:PRO:HG2	1:A:20:TRP:HE1	4	0.19	0.08	0.14

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)	Median (Å)
(1,674)	1:A:17:PRO:HG3	1:A:20:TRP:HE1	4	0.19	0.08	0.14
(2,5)	1:A:39:CYS:HB2	1:A:42:ARG:H	4	0.18	0.01	0.18
(2,5)	1:A:39:CYS:HB3	1:A:42:ARG:H	4	0.18	0.01	0.18
(2,5)	1:A:42:ARG:HD2	1:A:42:ARG:H	4	0.18	0.01	0.18
(2,5)	1:A:42:ARG:HD3	1:A:42:ARG:H	4	0.18	0.01	0.18
(1,84)	1:A:14:GLN:HG2	1:A:29:GLU:H	4	0.18	0.04	0.17
(1,84)	1:A:14:GLN:HG3	1:A:29:GLU:H	4	0.18	0.04	0.17
(1,689)	1:A:69:ASN:HD21	1:A:69:ASN:H	4	0.18	0.04	0.18
(2,9)	1:A:51:CYS:HB2	1:A:72:ASP:H	4	0.18	0.11	0.12
(2,9)	1:A:51:CYS:HB3	1:A:72:ASP:H	4	0.18	0.11	0.12
(2,9)	1:A:71:CYS:HB3	1:A:72:ASP:H	4	0.18	0.11	0.12
(2,173)	1:A:69:ASN:HD21	1:A:69:ASN:H	4	0.18	0.04	0.18
(2,104)	1:A:63:TRP:HB2	1:A:80:CYS:H	4	0.17	0.03	0.18
(2,104)	1:A:63:TRP:HB3	1:A:80:CYS:H	4	0.17	0.03	0.18
(2,104)	1:A:80:CYS:HB3	1:A:80:CYS:H	4	0.17	0.03	0.18
(1,924)	1:A:8:PHE:HB2	1:A:16:VAL:HG11	4	0.16	0.04	0.16
(1,924)	1:A:8:PHE:HB2	1:A:16:VAL:HG12	4	0.16	0.04	0.16
(1,924)	1:A:8:PHE:HB2	1:A:16:VAL:HG13	4	0.16	0.04	0.16
(1,924)	1:A:8:PHE:HB2	1:A:16:VAL:HG21	4	0.16	0.04	0.16
(1,924)	1:A:8:PHE:HB2	1:A:16:VAL:HG22	4	0.16	0.04	0.16
(1,924)	1:A:8:PHE:HB2	1:A:16:VAL:HG23	4	0.16	0.04	0.16
(1,917)	1:A:28:CYS:H	1:A:14:GLN:HG2	4	0.16	0.03	0.16
(1,610)	1:A:14:GLN:HE22	1:A:29:GLU:H	4	0.16	0.02	0.16
(1,751)	1:A:52:GLY:H	1:A:57:GLN:HG2	4	0.16	0.04	0.16
(1,751)	1:A:52:GLY:H	1:A:57:GLN:HG3	4	0.16	0.04	0.16
(1,126)	1:A:117:LEU:HD11	1:A:114:SER:H	4	0.15	0.02	0.14
(1,126)	1:A:117:LEU:HD12	1:A:114:SER:H	4	0.15	0.02	0.14
(1,126)	1:A:117:LEU:HD13	1:A:114:SER:H	4	0.15	0.02	0.14
(1,126)	1:A:117:LEU:HD21	1:A:114:SER:H	4	0.15	0.02	0.14
(1,126)	1:A:117:LEU:HD22	1:A:114:SER:H	4	0.15	0.02	0.14
(1,126)	1:A:117:LEU:HD23	1:A:114:SER:H	4	0.15	0.02	0.14
(1,143)	1:A:106:GLY:H	1:A:107:GLN:H	4	0.15	0.02	0.15
(1,127)	1:A:114:SER:H	1:A:114:SER:HB2	4	0.15	0.01	0.15
(1,127)	1:A:114:SER:H	1:A:114:SER:HB3	4	0.15	0.01	0.15
(1,930)	1:A:102:PHE:HE2	1:A:107:GLN:HG2	4	0.15	0.02	0.15
(1,220)	1:A:92:CYS:HB2	1:A:95:GLY:H	4	0.14	0.05	0.12
(1,220)	1:A:92:CYS:HB3	1:A:95:GLY:H	4	0.14	0.05	0.12
(2,108)	1:A:92:CYS:H	1:A:95:GLY:H	4	0.14	0.04	0.12
(2,108)	1:A:93:SER:H	1:A:95:GLY:H	4	0.14	0.04	0.12
(1,57)	1:A:66:ASP:H	1:A:67:GLY:H	4	0.14	0.01	0.14
(2,339)	1:A:9:VAL:HG11	1:A:13:GLY:H	4	0.14	0.01	0.14
(2,339)	1:A:9:VAL:HG12	1:A:13:GLY:H	4	0.14	0.01	0.14

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)	Median (Å)
(2,339)	1:A:9:VAL:HG13	1:A:13:GLY:H	4	0.14	0.01	0.14
(2,339)	1:A:9:VAL:HG21	1:A:13:GLY:H	4	0.14	0.01	0.14
(2,339)	1:A:9:VAL:HG22	1:A:13:GLY:H	4	0.14	0.01	0.14
(2,339)	1:A:9:VAL:HG23	1:A:13:GLY:H	4	0.14	0.01	0.14
(1,512)	1:A:59:ILE:H	1:A:49:ILE:H	4	0.14	0.02	0.14
(2,115)	1:A:80:CYS:H	1:A:81:GLY:H	4	0.14	0.01	0.14
(2,115)	1:A:85:CYS:H	1:A:81:GLY:H	4	0.14	0.01	0.14
(1,1)	1:A:112:ASP:H	1:A:113:GLY:H	4	0.14	0.01	0.14
(2,179)	1:A:9:VAL:HG11	1:A:10:CYS:H	4	0.13	0.01	0.14
(2,179)	1:A:9:VAL:HG12	1:A:10:CYS:H	4	0.13	0.01	0.14
(2,179)	1:A:9:VAL:HG13	1:A:10:CYS:H	4	0.13	0.01	0.14
(2,179)	1:A:9:VAL:HG21	1:A:10:CYS:H	4	0.13	0.01	0.14
(2,179)	1:A:9:VAL:HG22	1:A:10:CYS:H	4	0.13	0.01	0.14
(2,179)	1:A:9:VAL:HG23	1:A:10:CYS:H	4	0.13	0.01	0.14
(1,122)	1:A:115:ASP:HB2	1:A:115:ASP:H	4	0.13	0.02	0.12
(1,122)	1:A:115:ASP:HB3	1:A:115:ASP:H	4	0.13	0.02	0.12
(1,478)	1:A:9:VAL:HB	1:A:9:VAL:H	4	0.13	0.01	0.14
(2,121)	1:A:93:SER:HB2	1:A:93:SER:H	4	0.13	0.01	0.13
(2,121)	1:A:93:SER:HB3	1:A:93:SER:H	4	0.13	0.01	0.13
(2,121)	1:A:94:SER:HB3	1:A:93:SER:H	4	0.13	0.01	0.13
(1,529)	1:A:59:ILE:HD11	1:A:70:ASP:H	3	0.46	0.06	0.43
(1,529)	1:A:59:ILE:HD12	1:A:70:ASP:H	3	0.46	0.06	0.43
(1,529)	1:A:59:ILE:HD13	1:A:70:ASP:H	3	0.46	0.06	0.43
(2,304)	1:A:11:ASN:HD21	1:A:12:ASN:H	3	0.44	0.01	0.44
(2,304)	1:A:12:ASN:HD22	1:A:12:ASN:H	3	0.44	0.01	0.44
(2,20)	1:A:82:ASN:H	1:A:83:ILE:H	3	0.33	0.06	0.34
(2,20)	1:A:85:CYS:H	1:A:83:ILE:H	3	0.33	0.06	0.34
(1,280)	1:A:5:GLU:HG2	1:A:6:SER:H	3	0.28	0.1	0.35
(1,280)	1:A:5:GLU:HG2	1:A:6:SER:H	3	0.28	0.1	0.35
(1,280)	1:A:5:GLU:HG3	1:A:6:SER:H	3	0.28	0.1	0.35
(1,280)	1:A:5:GLU:HG3	1:A:6:SER:H	3	0.28	0.1	0.35
(1,51)	1:A:78:GLU:H	1:A:77:GLU:H	3	0.27	0.02	0.26
(1,776)	1:A:77:GLU:HG2	1:A:70:ASP:H	3	0.26	0.14	0.21
(1,776)	1:A:77:GLU:HG3	1:A:70:ASP:H	3	0.26	0.14	0.21
(1,348)	1:A:30:ASP:HB2	1:A:31:GLY:H	3	0.23	0.1	0.17
(1,348)	1:A:30:ASP:HB3	1:A:31:GLY:H	3	0.23	0.1	0.17
(2,211)	1:A:49:ILE:HD11	1:A:49:ILE:H	3	0.23	0.08	0.19
(2,211)	1:A:49:ILE:HD12	1:A:49:ILE:H	3	0.23	0.08	0.19
(2,211)	1:A:49:ILE:HD13	1:A:49:ILE:H	3	0.23	0.08	0.19
(2,211)	1:A:49:ILE:HG12	1:A:49:ILE:H	3	0.23	0.08	0.19
(2,211)	1:A:49:ILE:HG13	1:A:49:ILE:H	3	0.23	0.08	0.19
(2,211)	1:A:49:ILE:HG21	1:A:49:ILE:H	3	0.23	0.08	0.19

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)	Median (Å)
(2,211)	1:A:49:ILE:HG22	1:A:49:ILE:H	3	0.23	0.08	0.19
(2,211)	1:A:49:ILE:HG23	1:A:49:ILE:H	3	0.23	0.08	0.19
(1,926)	1:A:16:VAL:HG11	1:A:20:TRP:HZ3	3	0.21	0.05	0.22
(1,926)	1:A:16:VAL:HG12	1:A:20:TRP:HZ3	3	0.21	0.05	0.22
(1,926)	1:A:16:VAL:HG13	1:A:20:TRP:HZ3	3	0.21	0.05	0.22
(1,826)	1:A:114:SER:H	1:A:117:LEU:H	3	0.2	0.04	0.22
(1,479)	1:A:9:VAL:HG11	1:A:9:VAL:H	3	0.19	0.09	0.13
(1,479)	1:A:9:VAL:HG12	1:A:9:VAL:H	3	0.19	0.09	0.13
(1,479)	1:A:9:VAL:HG13	1:A:9:VAL:H	3	0.19	0.09	0.13
(1,479)	1:A:9:VAL:HG21	1:A:9:VAL:H	3	0.19	0.09	0.13
(1,479)	1:A:9:VAL:HG22	1:A:9:VAL:H	3	0.19	0.09	0.13
(1,479)	1:A:9:VAL:HG23	1:A:9:VAL:H	3	0.19	0.09	0.13
(1,694)	1:A:21:LYS:HE2	1:A:21:LYS:H	3	0.18	0.04	0.2
(1,694)	1:A:21:LYS:HE3	1:A:21:LYS:H	3	0.18	0.04	0.2
(2,34)	1:A:3:CYS:HB2	1:A:16:VAL:H	3	0.18	0.05	0.2
(2,34)	1:A:3:CYS:HB3	1:A:16:VAL:H	3	0.18	0.05	0.2
(2,34)	1:A:15:CYS:HB2	1:A:16:VAL:H	3	0.18	0.05	0.2
(2,34)	1:A:15:CYS:HB3	1:A:16:VAL:H	3	0.18	0.05	0.2
(4,6)	1:A:51:CYS:H	1:A:57:GLN:O	3	0.18	0.05	0.2
(1,367)	1:A:42:ARG:HG2	1:A:43:THR:H	3	0.17	0.03	0.18
(1,367)	1:A:42:ARG:HG2	1:A:43:THR:H	3	0.17	0.03	0.18
(1,367)	1:A:42:ARG:HG3	1:A:43:THR:H	3	0.17	0.03	0.18
(1,367)	1:A:42:ARG:HG3	1:A:43:THR:H	3	0.17	0.03	0.18
(1,91)	1:A:14:GLN:HG2	1:A:15:CYS:H	3	0.17	0.04	0.19
(1,91)	1:A:14:GLN:HG3	1:A:15:CYS:H	3	0.17	0.04	0.19
(1,915)	1:A:51:CYS:HA	1:A:71:CYS:H	3	0.17	0.05	0.16
(2,362)	1:A:14:GLN:HB2	1:A:10:CYS:H	3	0.17	0.04	0.15
(2,362)	1:A:14:GLN:HB3	1:A:10:CYS:H	3	0.17	0.04	0.15
(1,273)	1:A:7:ASP:HB2	1:A:4:ALA:H	3	0.16	0.03	0.14
(1,273)	1:A:7:ASP:HB3	1:A:4:ALA:H	3	0.16	0.03	0.14
(1,130)	1:A:115:ASP:HB2	1:A:113:GLY:H	3	0.16	0.01	0.16
(1,130)	1:A:115:ASP:HB3	1:A:113:GLY:H	3	0.16	0.01	0.16
(2,176)	1:A:99:SER:HG	1:A:101:ASN:HD21	3	0.15	0.03	0.14
(2,176)	1:A:102:PHE:HA	1:A:101:ASN:HD21	3	0.15	0.03	0.14
(1,12)	1:A:34:GLU:H	1:A:33:ASP:H	3	0.15	0.01	0.15
(1,875)	1:A:38:GLN:HE22	1:A:38:GLN:H	3	0.15	0.04	0.13
(1,63)	1:A:39:CYS:H	1:A:40:HIS:H	3	0.14	0.01	0.13
(1,329)	1:A:25:ASP:H	1:A:23:ASP:H	3	0.14	0.01	0.14
(1,377)	1:A:60:PRO:HA	1:A:49:ILE:H	3	0.14	0.02	0.13
(2,44)	1:A:83:ILE:HD11	1:A:97:CYS:H	3	0.14	0.02	0.12
(2,44)	1:A:83:ILE:HD12	1:A:97:CYS:H	3	0.14	0.02	0.12
(2,44)	1:A:83:ILE:HD13	1:A:97:CYS:H	3	0.14	0.02	0.12

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)	Median (Å)
(2,44)	1:A:83:ILE:HG21	1:A:97:CYS:H	3	0.14	0.02	0.12
(2,44)	1:A:83:ILE:HG22	1:A:97:CYS:H	3	0.14	0.02	0.12
(2,44)	1:A:83:ILE:HG23	1:A:97:CYS:H	3	0.14	0.02	0.12
(1,495)	1:A:31:GLY:H	1:A:29:GLU:H	3	0.13	0.02	0.13
(1,536)	1:A:89:GLU:HB2	1:A:86:SER:H	3	0.13	0.02	0.12
(1,536)	1:A:89:GLU:HB3	1:A:86:SER:H	3	0.13	0.02	0.12
(1,601)	1:A:11:ASN:H	1:A:11:ASN:HD22	3	0.13	0.01	0.13
(2,312)	1:A:73:SER:HB2	1:A:73:SER:H	3	0.13	0.03	0.12
(2,312)	1:A:73:SER:HB3	1:A:73:SER:H	3	0.13	0.03	0.12
(2,312)	1:A:74:GLY:HA2	1:A:73:SER:H	3	0.13	0.03	0.12
(2,312)	1:A:74:GLY:HA3	1:A:73:SER:H	3	0.13	0.03	0.12
(2,367)	1:A:35:SER:HB2	1:A:37:GLU:H	3	0.13	0.01	0.13
(2,367)	1:A:35:SER:HB3	1:A:37:GLU:H	3	0.13	0.01	0.13
(2,367)	1:A:36:PRO:HA	1:A:37:GLU:H	3	0.13	0.01	0.13
(1,547)	1:A:104:CYS:HB2	1:A:105:ASN:H	3	0.13	0.0	0.13
(1,547)	1:A:104:CYS:HB3	1:A:105:ASN:H	3	0.13	0.0	0.13
(2,191)	1:A:53:ALA:H	1:A:55:SER:H	3	0.13	0.02	0.13
(2,191)	1:A:54:HIS:H	1:A:55:SER:H	3	0.13	0.02	0.13
(2,191)	1:A:56:THR:H	1:A:55:SER:H	3	0.13	0.02	0.13
(1,247)	1:A:83:ILE:HA	1:A:84:THR:H	3	0.13	0.01	0.13
(1,565)	1:A:91:THR:HG1	1:A:91:THR:H	3	0.12	0.02	0.11
(1,565)	1:A:91:THR:HG21	1:A:91:THR:H	3	0.12	0.02	0.11
(1,565)	1:A:91:THR:HG22	1:A:91:THR:H	3	0.12	0.02	0.11
(1,565)	1:A:91:THR:HG23	1:A:91:THR:H	3	0.12	0.02	0.11
(2,374)	1:A:20:TRP:HA	1:A:23:ASP:H	3	0.12	0.01	0.12
(2,374)	1:A:25:ASP:HA	1:A:23:ASP:H	3	0.12	0.01	0.12
(1,67)	1:A:19:ARG:H	1:A:18:SER:H	3	0.12	0.01	0.12
(1,387)	1:A:51:CYS:H	1:A:51:CYS:HB2	3	0.12	0.01	0.12
(1,387)	1:A:51:CYS:H	1:A:51:CYS:HB3	3	0.12	0.01	0.12
(2,61)	1:A:4:ALA:HA	1:A:5:GLU:H	3	0.12	0.01	0.12
(2,61)	1:A:6:SER:HA	1:A:5:GLU:H	3	0.12	0.01	0.12
(1,631)	1:A:79:ASN:HD22	1:A:79:ASN:H	3	0.12	0.01	0.11
(2,150)	1:A:11:ASN:HB2	1:A:31:GLY:H	3	0.12	0.0	0.12
(2,150)	1:A:11:ASN:HB3	1:A:31:GLY:H	3	0.12	0.0	0.12
(2,150)	1:A:28:CYS:HB2	1:A:31:GLY:H	3	0.12	0.0	0.12
(2,150)	1:A:28:CYS:HB3	1:A:31:GLY:H	3	0.12	0.0	0.12
(2,185)	1:A:3:CYS:HB2	1:A:15:CYS:H	3	0.12	0.01	0.11
(2,185)	1:A:3:CYS:HB3	1:A:15:CYS:H	3	0.12	0.01	0.11
(2,185)	1:A:15:CYS:HB2	1:A:15:CYS:H	3	0.12	0.01	0.11
(2,185)	1:A:15:CYS:HB3	1:A:15:CYS:H	3	0.12	0.01	0.11
(2,107)	1:A:34:GLU:HA	1:A:44:CYS:H	3	0.11	0.0	0.11
(2,107)	1:A:35:SER:HA	1:A:44:CYS:H	3	0.11	0.0	0.11

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)	Median (Å)
(2,107)	1:A:44:CYS:HA	1:A:44:CYS:H	3	0.11	0.0	0.11
(1,878)	1:A:48:GLU:HB2	1:A:45:ARG:H	2	0.5	0.01	0.5
(1,878)	1:A:48:GLU:HB3	1:A:45:ARG:H	2	0.5	0.01	0.5
(1,635)	1:A:78:GLU:HB2	1:A:79:ASN:HD21	2	0.43	0.08	0.43
(1,635)	1:A:78:GLU:HB2	1:A:79:ASN:HD21	2	0.43	0.08	0.43
(1,635)	1:A:78:GLU:HB3	1:A:79:ASN:HD21	2	0.43	0.08	0.43
(1,635)	1:A:78:GLU:HB3	1:A:79:ASN:HD21	2	0.43	0.08	0.43
(1,747)	1:A:57:GLN:HB2	1:A:51:CYS:H	2	0.4	0.05	0.4
(1,747)	1:A:57:GLN:HB2	1:A:51:CYS:H	2	0.4	0.05	0.4
(1,747)	1:A:57:GLN:HB3	1:A:51:CYS:H	2	0.4	0.05	0.4
(1,747)	1:A:57:GLN:HB3	1:A:51:CYS:H	2	0.4	0.05	0.4
(1,797)	1:A:91:THR:HG1	1:A:96:ARG:H	2	0.33	0.12	0.33
(1,797)	1:A:91:THR:HG21	1:A:96:ARG:H	2	0.33	0.12	0.33
(1,797)	1:A:91:THR:HG22	1:A:96:ARG:H	2	0.33	0.12	0.33
(1,797)	1:A:91:THR:HG23	1:A:96:ARG:H	2	0.33	0.12	0.33
(1,544)	1:A:110:CYS:H	1:A:108:ASP:HB2	2	0.3	0.0	0.3
(1,544)	1:A:110:CYS:H	1:A:108:ASP:HB2	2	0.3	0.0	0.3
(1,544)	1:A:110:CYS:H	1:A:108:ASP:HB3	2	0.3	0.0	0.3
(1,544)	1:A:110:CYS:H	1:A:108:ASP:HB3	2	0.3	0.0	0.3
(1,54)	1:A:73:SER:H	1:A:74:GLY:H	2	0.29	0.05	0.29
(2,52)	1:A:60:PRO:HD2	1:A:63:TRP:HE1	2	0.26	0.02	0.26
(2,52)	1:A:60:PRO:HD3	1:A:63:TRP:HE1	2	0.26	0.02	0.26
(2,52)	1:A:80:CYS:HB2	1:A:63:TRP:HE1	2	0.26	0.02	0.26
(2,52)	1:A:80:CYS:HB3	1:A:63:TRP:HE1	2	0.26	0.02	0.26
(1,737)	1:A:33:ASP:HB2	1:A:34:GLU:H	2	0.22	0.02	0.22
(1,737)	1:A:33:ASP:HB3	1:A:34:GLU:H	2	0.22	0.02	0.22
(1,70)	1:A:77:GLU:HB2	1:A:78:GLU:H	2	0.2	0.02	0.2
(1,70)	1:A:77:GLU:HB3	1:A:78:GLU:H	2	0.2	0.02	0.2
(1,79)	1:A:61:VAL:HB	1:A:61:VAL:H	2	0.2	0.09	0.2
(1,460)	1:A:74:GLY:HA2	1:A:77:GLU:H	2	0.2	0.02	0.2
(1,460)	1:A:74:GLY:HA3	1:A:77:GLU:H	2	0.2	0.02	0.2
(1,438)	1:A:72:ASP:H	1:A:73:SER:H	2	0.18	0.02	0.18
(1,470)	1:A:79:ASN:HB2	1:A:79:ASN:H	2	0.18	0.06	0.18
(1,470)	1:A:79:ASN:HB3	1:A:79:ASN:H	2	0.18	0.06	0.18
(2,32)	1:A:69:ASN:HB2	1:A:70:ASP:H	2	0.18	0.02	0.18
(2,32)	1:A:69:ASN:HB3	1:A:70:ASP:H	2	0.18	0.02	0.18
(2,32)	1:A:70:ASP:HB2	1:A:70:ASP:H	2	0.18	0.02	0.18
(2,32)	1:A:70:ASP:HB3	1:A:70:ASP:H	2	0.18	0.02	0.18
(2,32)	1:A:76:ASP:HB2	1:A:70:ASP:H	2	0.18	0.02	0.18
(2,32)	1:A:76:ASP:HB3	1:A:70:ASP:H	2	0.18	0.02	0.18
(1,35)	1:A:115:ASP:H	1:A:116:GLU:H	2	0.18	0.02	0.18
(2,254)	1:A:33:ASP:HB2	1:A:38:GLN:HE21	2	0.18	0.02	0.18

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)	Median (Å)
(2,254)	1:A:33:ASP:HB3	1:A:38:GLN:HE21	2	0.18	0.02	0.18
(2,254)	1:A:37:GLU:HG2	1:A:38:GLN:HE21	2	0.18	0.02	0.18
(2,254)	1:A:37:GLU:HG3	1:A:38:GLN:HE21	2	0.18	0.02	0.18
(2,254)	1:A:38:GLN:HG2	1:A:38:GLN:HE21	2	0.18	0.02	0.18
(2,254)	1:A:38:GLN:HG3	1:A:38:GLN:HE21	2	0.18	0.02	0.18
(2,255)	1:A:37:GLU:HB2	1:A:39:CYS:H	2	0.16	0.01	0.16
(2,255)	1:A:37:GLU:HB3	1:A:39:CYS:H	2	0.16	0.01	0.16
(2,255)	1:A:37:GLU:HB3	1:A:39:CYS:H	2	0.16	0.01	0.16
(2,255)	1:A:38:GLN:HB2	1:A:39:CYS:H	2	0.16	0.01	0.16
(2,255)	1:A:38:GLN:HB2	1:A:39:CYS:H	2	0.16	0.01	0.16
(2,255)	1:A:38:GLN:HB3	1:A:39:CYS:H	2	0.16	0.01	0.16
(1,578)	1:A:52:GLY:H	1:A:50:SER:HB2	2	0.16	0.02	0.16
(1,578)	1:A:52:GLY:H	1:A:50:SER:HB3	2	0.16	0.02	0.16
(1,902)	1:A:94:SER:HB2	1:A:82:ASN:HD21	2	0.16	0.02	0.16
(1,902)	1:A:94:SER:HB3	1:A:82:ASN:HD21	2	0.16	0.02	0.16
(1,469)	1:A:78:GLU:HB2	1:A:79:ASN:H	2	0.16	0.01	0.16
(1,469)	1:A:78:GLU:HB2	1:A:79:ASN:H	2	0.16	0.01	0.16
(1,469)	1:A:78:GLU:HB3	1:A:79:ASN:H	2	0.16	0.01	0.16
(1,469)	1:A:78:GLU:HB3	1:A:79:ASN:H	2	0.16	0.01	0.16
(2,316)	1:A:90:PHE:HB2	1:A:98:ILE:H	2	0.15	0.02	0.15
(2,316)	1:A:90:PHE:HB3	1:A:98:ILE:H	2	0.15	0.02	0.15
(2,316)	1:A:97:CYS:HB2	1:A:98:ILE:H	2	0.15	0.02	0.15
(2,316)	1:A:97:CYS:HB3	1:A:98:ILE:H	2	0.15	0.02	0.15
(2,371)	1:A:83:ILE:HD11	1:A:83:ILE:H	2	0.15	0.02	0.15
(2,371)	1:A:83:ILE:HD12	1:A:83:ILE:H	2	0.15	0.02	0.15
(2,371)	1:A:83:ILE:HD13	1:A:83:ILE:H	2	0.15	0.02	0.15
(2,371)	1:A:83:ILE:HG21	1:A:83:ILE:H	2	0.15	0.02	0.15
(2,371)	1:A:83:ILE:HG22	1:A:83:ILE:H	2	0.15	0.02	0.15
(2,371)	1:A:83:ILE:HG23	1:A:83:ILE:H	2	0.15	0.02	0.15
(1,798)	1:A:85:CYS:HB2	1:A:97:CYS:H	2	0.15	0.02	0.15
(1,798)	1:A:85:CYS:HB3	1:A:97:CYS:H	2	0.15	0.02	0.15
(2,133)	1:A:78:GLU:HG2	1:A:79:ASN:HD22	2	0.15	0.0	0.15
(2,133)	1:A:78:GLU:HG3	1:A:79:ASN:HD22	2	0.15	0.0	0.15
(2,133)	1:A:89:GLU:HB2	1:A:79:ASN:HD22	2	0.15	0.0	0.15
(2,133)	1:A:89:GLU:HB3	1:A:79:ASN:HD22	2	0.15	0.0	0.15
(1,741)	1:A:9:VAL:HG11	1:A:38:GLN:HE21	2	0.14	0.02	0.14
(1,741)	1:A:9:VAL:HG12	1:A:38:GLN:HE21	2	0.14	0.02	0.14
(1,741)	1:A:9:VAL:HG13	1:A:38:GLN:HE21	2	0.14	0.02	0.14
(1,741)	1:A:9:VAL:HG21	1:A:38:GLN:HE21	2	0.14	0.02	0.14
(1,741)	1:A:9:VAL:HG22	1:A:38:GLN:HE21	2	0.14	0.02	0.14
(1,741)	1:A:9:VAL:HG23	1:A:38:GLN:HE21	2	0.14	0.02	0.14
(1,928)	1:A:102:PHE:HA	1:A:103:VAL:HG11	2	0.14	0.01	0.14

Continued on next page...

Continued from previous page...

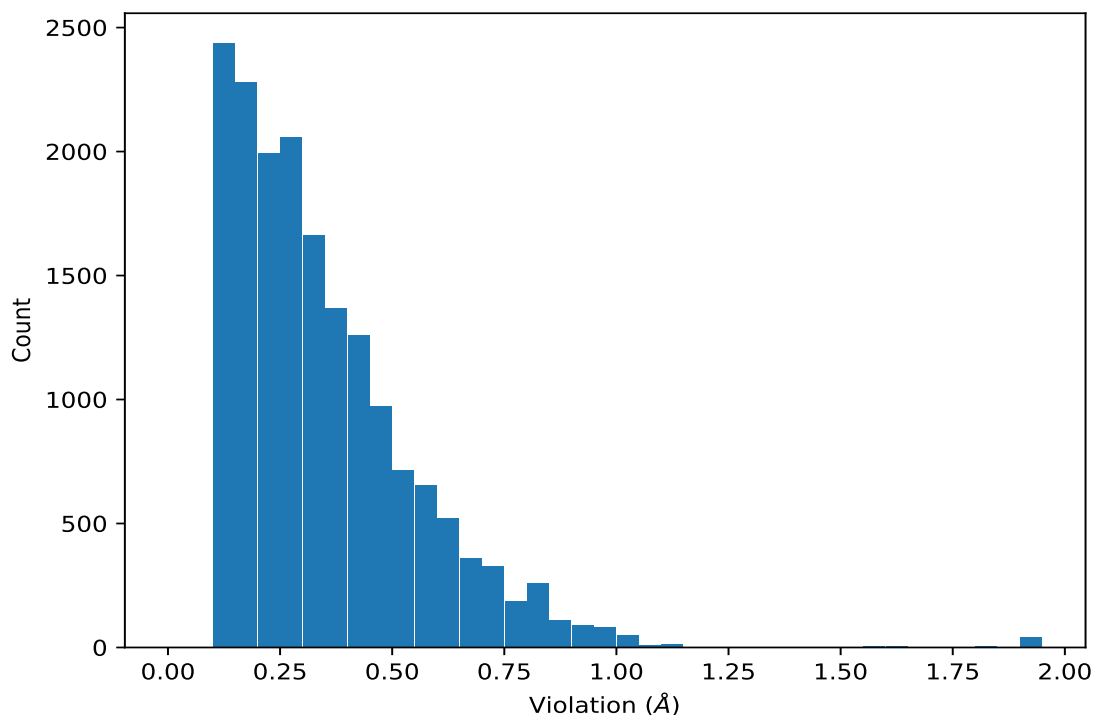
Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)	Median (Å)
(1,928)	1:A:102:PHE:HA	1:A:103:VAL:HG12	2	0.14	0.01	0.14
(1,928)	1:A:102:PHE:HA	1:A:103:VAL:HG13	2	0.14	0.01	0.14
(2,234)	1:A:64:ARG:HB2	1:A:66:ASP:H	2	0.14	0.02	0.14
(2,234)	1:A:64:ARG:HB3	1:A:66:ASP:H	2	0.14	0.02	0.14
(2,234)	1:A:64:ARG:HG2	1:A:66:ASP:H	2	0.14	0.02	0.14
(2,234)	1:A:64:ARG:HG3	1:A:66:ASP:H	2	0.14	0.02	0.14
(3,10)	2:A:202:CA:CA	1:A:70:ASP:OD2	2	0.14	0.01	0.14
(2,288)	1:A:75:GLU:HB2	1:A:75:GLU:H	2	0.13	0.02	0.13
(2,288)	1:A:75:GLU:HB3	1:A:75:GLU:H	2	0.13	0.02	0.13
(1,129)	1:A:114:SER:H	1:A:114:SER:HG	2	0.12	0.02	0.12
(1,682)	1:A:79:ASN:HD22	1:A:87:PRO:HD2	2	0.12	0.02	0.12
(1,682)	1:A:79:ASN:HD22	1:A:87:PRO:HD3	2	0.12	0.02	0.12
(1,931)	1:A:99:SER:HB2	1:A:102:PHE:HD1	2	0.12	0.02	0.12
(1,931)	1:A:99:SER:HB2	1:A:102:PHE:HD2	2	0.12	0.02	0.12
(1,931)	1:A:99:SER:HB3	1:A:102:PHE:HD1	2	0.12	0.02	0.12
(1,931)	1:A:99:SER:HB3	1:A:102:PHE:HD2	2	0.12	0.02	0.12
(2,35)	1:A:110:CYS:HB2	1:A:112:ASP:H	2	0.12	0.01	0.12
(2,35)	1:A:110:CYS:HB3	1:A:112:ASP:H	2	0.12	0.01	0.12
(2,35)	1:A:111:SER:HB2	1:A:112:ASP:H	2	0.12	0.01	0.12
(2,35)	1:A:111:SER:HB3	1:A:112:ASP:H	2	0.12	0.01	0.12
(2,35)	1:A:113:GLY:HA2	1:A:112:ASP:H	2	0.12	0.01	0.12
(2,35)	1:A:113:GLY:HA3	1:A:112:ASP:H	2	0.12	0.01	0.12
(2,111)	1:A:72:ASP:H	1:A:71:CYS:H	2	0.12	0.01	0.12
(2,111)	1:A:76:ASP:H	1:A:71:CYS:H	2	0.12	0.01	0.12
(2,195)	1:A:3:CYS:HB2	1:A:18:SER:H	2	0.12	0.02	0.12
(2,195)	1:A:3:CYS:HB3	1:A:18:SER:H	2	0.12	0.02	0.12
(2,195)	1:A:7:ASP:HB2	1:A:18:SER:H	2	0.12	0.02	0.12
(2,195)	1:A:7:ASP:HB3	1:A:18:SER:H	2	0.12	0.02	0.12
(2,88)	1:A:78:GLU:HG2	1:A:79:ASN:HD21	2	0.12	0.01	0.12
(2,88)	1:A:78:GLU:HG3	1:A:79:ASN:HD21	2	0.12	0.01	0.12
(2,88)	1:A:89:GLU:HB2	1:A:79:ASN:HD21	2	0.12	0.01	0.12
(2,88)	1:A:89:GLU:HB3	1:A:79:ASN:HD21	2	0.12	0.01	0.12
(1,315)	1:A:15:CYS:H	1:A:15:CYS:HB2	2	0.12	0.0	0.12
(1,315)	1:A:15:CYS:H	1:A:15:CYS:HB3	2	0.12	0.0	0.12
(1,588)	1:A:12:ASN:HA	1:A:13:GLY:H	2	0.12	0.0	0.12
(1,600)	1:A:11:ASN:H	1:A:11:ASN:HD21	2	0.11	0.0	0.11
(1,652)	1:A:101:ASN:HD21	1:A:101:ASN:HB2	2	0.11	0.0	0.11
(1,652)	1:A:101:ASN:HD21	1:A:101:ASN:HB3	2	0.11	0.0	0.11
(2,287)	1:A:5:GLU:HB2	1:A:5:GLU:H	2	0.11	0.0	0.11
(2,287)	1:A:5:GLU:HB3	1:A:5:GLU:H	2	0.11	0.0	0.11

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)
(1,820)	1:A:110:CYS:H	1:A:115:ASP:H	13	1.95
(2,384)	1:A:5:GLU:HB2	1:A:5:GLU:HB3	1	1.94
(2,384)	1:A:5:GLU:HB3	1:A:5:GLU:HB2	1	1.94
(2,384)	1:A:5:GLU:HB2	1:A:5:GLU:HB3	2	1.94
(2,384)	1:A:5:GLU:HB3	1:A:5:GLU:HB2	2	1.94
(2,384)	1:A:5:GLU:HB2	1:A:5:GLU:HB3	3	1.94
(2,384)	1:A:5:GLU:HB3	1:A:5:GLU:HB2	3	1.94
(2,384)	1:A:5:GLU:HB2	1:A:5:GLU:HB3	4	1.94
(2,384)	1:A:5:GLU:HB3	1:A:5:GLU:HB2	4	1.94
(2,384)	1:A:5:GLU:HB2	1:A:5:GLU:HB3	5	1.94

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,384)	1:A:5:GLU:HB3	1:A:5:GLU:HB2	5	1.94
(2,384)	1:A:5:GLU:HB2	1:A:5:GLU:HB3	6	1.94
(2,384)	1:A:5:GLU:HB3	1:A:5:GLU:HB2	6	1.94
(2,384)	1:A:5:GLU:HB2	1:A:5:GLU:HB3	7	1.94
(2,384)	1:A:5:GLU:HB3	1:A:5:GLU:HB2	7	1.94
(2,384)	1:A:5:GLU:HB2	1:A:5:GLU:HB3	8	1.94
(2,384)	1:A:5:GLU:HB3	1:A:5:GLU:HB2	8	1.94
(2,384)	1:A:5:GLU:HB2	1:A:5:GLU:HB3	9	1.94
(2,384)	1:A:5:GLU:HB3	1:A:5:GLU:HB2	9	1.94
(2,384)	1:A:5:GLU:HB2	1:A:5:GLU:HB3	10	1.94
(2,384)	1:A:5:GLU:HB3	1:A:5:GLU:HB2	10	1.94
(2,384)	1:A:5:GLU:HB2	1:A:5:GLU:HB3	11	1.94
(2,384)	1:A:5:GLU:HB3	1:A:5:GLU:HB2	11	1.94
(2,384)	1:A:5:GLU:HB2	1:A:5:GLU:HB3	12	1.94
(2,384)	1:A:5:GLU:HB3	1:A:5:GLU:HB2	12	1.94
(2,384)	1:A:5:GLU:HB2	1:A:5:GLU:HB3	13	1.94
(2,384)	1:A:5:GLU:HB3	1:A:5:GLU:HB2	13	1.94
(2,384)	1:A:5:GLU:HB2	1:A:5:GLU:HB3	14	1.94
(2,384)	1:A:5:GLU:HB3	1:A:5:GLU:HB2	14	1.94
(2,384)	1:A:5:GLU:HB2	1:A:5:GLU:HB3	15	1.94
(2,384)	1:A:5:GLU:HB3	1:A:5:GLU:HB2	15	1.94
(2,384)	1:A:5:GLU:HB2	1:A:5:GLU:HB3	16	1.94
(2,384)	1:A:5:GLU:HB3	1:A:5:GLU:HB2	16	1.94
(2,384)	1:A:5:GLU:HB2	1:A:5:GLU:HB3	17	1.94
(2,384)	1:A:5:GLU:HB3	1:A:5:GLU:HB2	17	1.94
(2,384)	1:A:5:GLU:HB2	1:A:5:GLU:HB3	18	1.94
(2,384)	1:A:5:GLU:HB3	1:A:5:GLU:HB2	18	1.94
(2,384)	1:A:5:GLU:HB2	1:A:5:GLU:HB3	19	1.94
(2,384)	1:A:5:GLU:HB3	1:A:5:GLU:HB2	19	1.94
(2,384)	1:A:5:GLU:HB2	1:A:5:GLU:HB3	20	1.94
(2,384)	1:A:5:GLU:HB3	1:A:5:GLU:HB2	20	1.94
(1,820)	1:A:110:CYS:H	1:A:115:ASP:H	11	1.91
(1,820)	1:A:110:CYS:H	1:A:115:ASP:H	14	1.88
(1,820)	1:A:110:CYS:H	1:A:115:ASP:H	9	1.82
(1,820)	1:A:110:CYS:H	1:A:115:ASP:H	12	1.82
(1,820)	1:A:110:CYS:H	1:A:115:ASP:H	18	1.81
(1,820)	1:A:110:CYS:H	1:A:115:ASP:H	20	1.81
(1,820)	1:A:110:CYS:H	1:A:115:ASP:H	16	1.8
(1,820)	1:A:110:CYS:H	1:A:115:ASP:H	15	1.73
(1,819)	1:A:112:ASP:HB2	1:A:115:ASP:H	17	1.67
(1,819)	1:A:112:ASP:HB3	1:A:115:ASP:H	17	1.67
(1,819)	1:A:112:ASP:HB2	1:A:115:ASP:H	5	1.63

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,819)	1:A:112:ASP:HB3	1:A:115:ASP:H	5	1.63
(1,819)	1:A:112:ASP:HB2	1:A:115:ASP:H	2	1.61
(1,819)	1:A:112:ASP:HB3	1:A:115:ASP:H	2	1.61
(1,819)	1:A:112:ASP:HB2	1:A:115:ASP:H	19	1.6
(1,819)	1:A:112:ASP:HB3	1:A:115:ASP:H	19	1.6
(1,819)	1:A:112:ASP:HB2	1:A:115:ASP:H	8	1.58
(1,819)	1:A:112:ASP:HB3	1:A:115:ASP:H	8	1.58
(1,819)	1:A:112:ASP:HB2	1:A:115:ASP:H	1	1.55
(1,819)	1:A:112:ASP:HB3	1:A:115:ASP:H	1	1.55
(1,819)	1:A:112:ASP:HB2	1:A:115:ASP:H	10	1.52
(1,819)	1:A:112:ASP:HB3	1:A:115:ASP:H	10	1.52
(1,459)	1:A:70:ASP:HA	1:A:76:ASP:H	7	1.27
(2,145)	1:A:43:THR:HA	1:A:58:CYS:H	8	1.19
(2,145)	1:A:56:THR:HB	1:A:58:CYS:H	8	1.19
(2,145)	1:A:43:THR:HA	1:A:58:CYS:H	2	1.14
(2,145)	1:A:56:THR:HB	1:A:58:CYS:H	2	1.14
(2,145)	1:A:43:THR:HA	1:A:58:CYS:H	6	1.12
(2,145)	1:A:56:THR:HB	1:A:58:CYS:H	6	1.12
(1,459)	1:A:70:ASP:HA	1:A:76:ASP:H	17	1.12
(2,98)	1:A:28:CYS:HB2	1:A:11:ASN:H	8	1.11
(2,98)	1:A:28:CYS:HB3	1:A:11:ASN:H	8	1.11
(2,98)	1:A:32:SER:HB2	1:A:11:ASN:H	8	1.11
(2,98)	1:A:32:SER:HB3	1:A:11:ASN:H	8	1.11
(2,145)	1:A:43:THR:HA	1:A:58:CYS:H	20	1.11
(2,145)	1:A:56:THR:HB	1:A:58:CYS:H	20	1.11
(2,145)	1:A:43:THR:HA	1:A:58:CYS:H	7	1.1
(2,145)	1:A:56:THR:HB	1:A:58:CYS:H	7	1.1
(2,145)	1:A:43:THR:HA	1:A:58:CYS:H	1	1.09
(2,145)	1:A:56:THR:HB	1:A:58:CYS:H	1	1.09
(2,145)	1:A:43:THR:HA	1:A:58:CYS:H	9	1.09
(2,145)	1:A:56:THR:HB	1:A:58:CYS:H	9	1.09
(2,145)	1:A:43:THR:HA	1:A:58:CYS:H	17	1.09
(2,145)	1:A:56:THR:HB	1:A:58:CYS:H	17	1.09
(2,145)	1:A:43:THR:HA	1:A:58:CYS:H	4	1.06
(2,145)	1:A:56:THR:HB	1:A:58:CYS:H	4	1.06
(2,145)	1:A:43:THR:HA	1:A:58:CYS:H	13	1.06
(2,145)	1:A:56:THR:HB	1:A:58:CYS:H	13	1.06
(1,898)	1:A:57:GLN:HE22	1:A:71:CYS:H	17	1.05
(2,145)	1:A:43:THR:HA	1:A:58:CYS:H	5	1.04
(2,145)	1:A:56:THR:HB	1:A:58:CYS:H	5	1.04
(2,145)	1:A:43:THR:HA	1:A:58:CYS:H	15	1.04
(2,145)	1:A:56:THR:HB	1:A:58:CYS:H	15	1.04

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,145)	1:A:43:THR:HA	1:A:58:CYS:H	16	1.04
(2,145)	1:A:56:THR:HB	1:A:58:CYS:H	16	1.04
(1,713)	1:A:14:GLN:HA	1:A:12:ASN:H	13	1.04
(2,264)	1:A:42:ARG:HB2	1:A:50:SER:H	12	1.03
(2,264)	1:A:42:ARG:HB3	1:A:50:SER:H	12	1.03
(2,264)	1:A:49:ILE:HB	1:A:50:SER:H	12	1.03
(2,145)	1:A:43:THR:HA	1:A:58:CYS:H	19	1.03
(2,145)	1:A:56:THR:HB	1:A:58:CYS:H	19	1.03
(1,713)	1:A:14:GLN:HA	1:A:12:ASN:H	11	1.03
(1,713)	1:A:14:GLN:HA	1:A:12:ASN:H	16	1.03
(1,713)	1:A:14:GLN:HA	1:A:12:ASN:H	20	1.03
(2,264)	1:A:42:ARG:HB2	1:A:50:SER:H	4	1.02
(2,264)	1:A:42:ARG:HB3	1:A:50:SER:H	4	1.02
(2,264)	1:A:49:ILE:HB	1:A:50:SER:H	4	1.02
(2,145)	1:A:43:THR:HA	1:A:58:CYS:H	10	1.02
(2,145)	1:A:56:THR:HB	1:A:58:CYS:H	10	1.02
(1,447)	1:A:71:CYS:HA	1:A:74:GLY:H	8	1.02
(1,4)	1:A:55:SER:H	1:A:54:HIS:H	1	1.02
(2,63)	1:A:80:CYS:HA	1:A:83:ILE:H	16	1.01
(2,63)	1:A:82:ASN:HA	1:A:83:ILE:H	16	1.01
(2,145)	1:A:43:THR:HA	1:A:58:CYS:H	3	1.01
(2,145)	1:A:56:THR:HB	1:A:58:CYS:H	3	1.01
(1,819)	1:A:112:ASP:HB2	1:A:115:ASP:H	4	1.01
(1,819)	1:A:112:ASP:HB3	1:A:115:ASP:H	4	1.01
(1,819)	1:A:112:ASP:HB2	1:A:115:ASP:H	6	1.01
(1,819)	1:A:112:ASP:HB3	1:A:115:ASP:H	6	1.01
(1,819)	1:A:112:ASP:HB2	1:A:115:ASP:H	7	1.01
(1,819)	1:A:112:ASP:HB3	1:A:115:ASP:H	7	1.01
(1,688)	1:A:69:ASN:H	1:A:69:ASN:HD22	1	1.01
(2,63)	1:A:80:CYS:HA	1:A:83:ILE:H	2	1.0
(2,63)	1:A:82:ASN:HA	1:A:83:ILE:H	2	1.0
(2,63)	1:A:80:CYS:HA	1:A:83:ILE:H	6	1.0
(2,63)	1:A:82:ASN:HA	1:A:83:ILE:H	6	1.0
(2,63)	1:A:80:CYS:HA	1:A:83:ILE:H	15	1.0
(2,63)	1:A:82:ASN:HA	1:A:83:ILE:H	15	1.0
(2,63)	1:A:80:CYS:HA	1:A:83:ILE:H	20	1.0
(2,63)	1:A:82:ASN:HA	1:A:83:ILE:H	20	1.0
(2,357)	1:A:69:ASN:HA	1:A:69:ASN:HD21	4	1.0
(2,357)	1:A:70:ASP:HA	1:A:69:ASN:HD21	4	1.0
(2,357)	1:A:69:ASN:HA	1:A:69:ASN:HD21	18	1.0
(2,357)	1:A:70:ASP:HA	1:A:69:ASN:HD21	18	1.0
(1,97)	1:A:98:ILE:HD11	1:A:99:SER:H	9	1.0

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,97)	1:A:98:ILE:HD12	1:A:99:SER:H	9	1.0
(1,97)	1:A:98:ILE:HD13	1:A:99:SER:H	9	1.0
(1,713)	1:A:14:GLN:HA	1:A:12:ASN:H	7	1.0
(1,459)	1:A:70:ASP:HA	1:A:76:ASP:H	20	1.0
(1,4)	1:A:55:SER:H	1:A:54:HIS:H	18	1.0
(2,63)	1:A:80:CYS:HA	1:A:83:ILE:H	3	0.99
(2,63)	1:A:82:ASN:HA	1:A:83:ILE:H	3	0.99
(2,63)	1:A:80:CYS:HA	1:A:83:ILE:H	11	0.99
(2,63)	1:A:82:ASN:HA	1:A:83:ILE:H	11	0.99
(2,63)	1:A:80:CYS:HA	1:A:83:ILE:H	14	0.99
(2,63)	1:A:82:ASN:HA	1:A:83:ILE:H	14	0.99
(2,63)	1:A:80:CYS:HA	1:A:83:ILE:H	18	0.99
(2,63)	1:A:82:ASN:HA	1:A:83:ILE:H	18	0.99
(1,97)	1:A:98:ILE:HD11	1:A:99:SER:H	16	0.99
(1,97)	1:A:98:ILE:HD12	1:A:99:SER:H	16	0.99
(1,97)	1:A:98:ILE:HD13	1:A:99:SER:H	16	0.99
(1,713)	1:A:14:GLN:HA	1:A:12:ASN:H	12	0.99
(1,688)	1:A:69:ASN:H	1:A:69:ASN:HD22	10	0.99
(2,357)	1:A:69:ASN:HA	1:A:69:ASN:HD21	6	0.98
(2,357)	1:A:70:ASP:HA	1:A:69:ASN:HD21	6	0.98
(2,357)	1:A:69:ASN:HA	1:A:69:ASN:HD21	10	0.98
(2,357)	1:A:70:ASP:HA	1:A:69:ASN:HD21	10	0.98
(1,877)	1:A:22:CYS:HA	1:A:44:CYS:H	12	0.98
(1,688)	1:A:69:ASN:H	1:A:69:ASN:HD22	5	0.98
(1,688)	1:A:69:ASN:H	1:A:69:ASN:HD22	9	0.98
(1,688)	1:A:69:ASN:H	1:A:69:ASN:HD22	16	0.98
(1,4)	1:A:55:SER:H	1:A:54:HIS:H	5	0.98
(2,63)	1:A:80:CYS:HA	1:A:83:ILE:H	5	0.97
(2,63)	1:A:82:ASN:HA	1:A:83:ILE:H	5	0.97
(2,63)	1:A:80:CYS:HA	1:A:83:ILE:H	8	0.97
(2,63)	1:A:82:ASN:HA	1:A:83:ILE:H	8	0.97
(2,63)	1:A:80:CYS:HA	1:A:83:ILE:H	9	0.97
(2,63)	1:A:82:ASN:HA	1:A:83:ILE:H	9	0.97
(2,63)	1:A:80:CYS:HA	1:A:83:ILE:H	13	0.97
(2,63)	1:A:82:ASN:HA	1:A:83:ILE:H	13	0.97
(2,63)	1:A:80:CYS:HA	1:A:83:ILE:H	17	0.97
(2,63)	1:A:82:ASN:HA	1:A:83:ILE:H	17	0.97
(2,63)	1:A:80:CYS:HA	1:A:83:ILE:H	19	0.97
(2,63)	1:A:82:ASN:HA	1:A:83:ILE:H	19	0.97
(1,819)	1:A:112:ASP:HB2	1:A:115:ASP:H	3	0.97
(1,819)	1:A:112:ASP:HB3	1:A:115:ASP:H	3	0.97
(1,688)	1:A:69:ASN:H	1:A:69:ASN:HD22	3	0.97

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,688)	1:A:69:ASN:H	1:A:69:ASN:HD22	11	0.97
(1,455)	1:A:76:ASP:HB2	1:A:76:ASP:H	20	0.97
(1,455)	1:A:76:ASP:HB2	1:A:76:ASP:H	20	0.97
(1,455)	1:A:76:ASP:HB3	1:A:76:ASP:H	20	0.97
(1,455)	1:A:76:ASP:HB3	1:A:76:ASP:H	20	0.97
(1,4)	1:A:55:SER:H	1:A:54:HIS:H	14	0.97
(1,4)	1:A:55:SER:H	1:A:54:HIS:H	15	0.97
(2,63)	1:A:80:CYS:HA	1:A:83:ILE:H	1	0.96
(2,63)	1:A:82:ASN:HA	1:A:83:ILE:H	1	0.96
(2,63)	1:A:80:CYS:HA	1:A:83:ILE:H	7	0.96
(2,63)	1:A:82:ASN:HA	1:A:83:ILE:H	7	0.96
(2,63)	1:A:80:CYS:HA	1:A:83:ILE:H	10	0.96
(2,63)	1:A:82:ASN:HA	1:A:83:ILE:H	10	0.96
(2,63)	1:A:80:CYS:HA	1:A:83:ILE:H	12	0.96
(2,63)	1:A:82:ASN:HA	1:A:83:ILE:H	12	0.96
(2,264)	1:A:42:ARG:HB2	1:A:50:SER:H	18	0.96
(2,264)	1:A:42:ARG:HB3	1:A:50:SER:H	18	0.96
(2,264)	1:A:49:ILE:HB	1:A:50:SER:H	18	0.96
(1,687)	1:A:69:ASN:HD21	1:A:74:GLY:H	19	0.96
(1,463)	1:A:71:CYS:HB2	1:A:78:GLU:H	8	0.96
(1,463)	1:A:71:CYS:HB3	1:A:78:GLU:H	8	0.96
(1,455)	1:A:76:ASP:HB2	1:A:76:ASP:H	14	0.96
(1,455)	1:A:76:ASP:HB2	1:A:76:ASP:H	14	0.96
(1,455)	1:A:76:ASP:HB3	1:A:76:ASP:H	14	0.96
(1,455)	1:A:76:ASP:HB3	1:A:76:ASP:H	14	0.96
(2,357)	1:A:69:ASN:HA	1:A:69:ASN:HD21	7	0.95
(2,357)	1:A:70:ASP:HA	1:A:69:ASN:HD21	7	0.95
(2,357)	1:A:69:ASN:HA	1:A:69:ASN:HD21	8	0.95
(2,357)	1:A:70:ASP:HA	1:A:69:ASN:HD21	8	0.95
(2,145)	1:A:43:THR:HA	1:A:58:CYS:H	18	0.95
(2,145)	1:A:56:THR:HB	1:A:58:CYS:H	18	0.95
(1,923)	1:A:8:PHE:HB2	1:A:16:VAL:HA	5	0.95
(1,877)	1:A:22:CYS:HA	1:A:44:CYS:H	8	0.95
(1,877)	1:A:22:CYS:HA	1:A:44:CYS:H	20	0.95
(1,713)	1:A:14:GLN:HA	1:A:12:ASN:H	8	0.95
(1,713)	1:A:14:GLN:HA	1:A:12:ASN:H	18	0.95
(1,688)	1:A:69:ASN:H	1:A:69:ASN:HD22	7	0.95
(1,455)	1:A:76:ASP:HB2	1:A:76:ASP:H	7	0.95
(1,455)	1:A:76:ASP:HB2	1:A:76:ASP:H	7	0.95
(1,455)	1:A:76:ASP:HB3	1:A:76:ASP:H	7	0.95
(1,455)	1:A:76:ASP:HB3	1:A:76:ASP:H	7	0.95
(1,447)	1:A:71:CYS:HA	1:A:74:GLY:H	10	0.95

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,4)	1:A:55:SER:H	1:A:54:HIS:H	12	0.95
(1,4)	1:A:55:SER:H	1:A:54:HIS:H	13	0.95
(2,63)	1:A:80:CYS:HA	1:A:83:ILE:H	4	0.94
(2,63)	1:A:82:ASN:HA	1:A:83:ILE:H	4	0.94
(2,145)	1:A:43:THR:HA	1:A:58:CYS:H	11	0.94
(2,145)	1:A:56:THR:HB	1:A:58:CYS:H	11	0.94
(2,145)	1:A:43:THR:HA	1:A:58:CYS:H	14	0.94
(2,145)	1:A:56:THR:HB	1:A:58:CYS:H	14	0.94
(1,898)	1:A:57:GLN:HE22	1:A:71:CYS:H	13	0.94
(1,713)	1:A:14:GLN:HA	1:A:12:ASN:H	3	0.94
(1,713)	1:A:14:GLN:HA	1:A:12:ASN:H	4	0.94
(1,688)	1:A:69:ASN:H	1:A:69:ASN:HD22	13	0.94
(1,688)	1:A:69:ASN:H	1:A:69:ASN:HD22	20	0.94
(1,543)	1:A:112:ASP:HB2	1:A:114:SER:H	3	0.94
(1,543)	1:A:112:ASP:HB3	1:A:114:SER:H	3	0.94
(1,455)	1:A:76:ASP:HB2	1:A:76:ASP:H	4	0.94
(1,455)	1:A:76:ASP:HB2	1:A:76:ASP:H	4	0.94
(1,455)	1:A:76:ASP:HB3	1:A:76:ASP:H	4	0.94
(1,455)	1:A:76:ASP:HB3	1:A:76:ASP:H	4	0.94
(1,455)	1:A:76:ASP:HB2	1:A:76:ASP:H	8	0.94
(1,455)	1:A:76:ASP:HB2	1:A:76:ASP:H	8	0.94
(1,455)	1:A:76:ASP:HB3	1:A:76:ASP:H	8	0.94
(1,455)	1:A:76:ASP:HB3	1:A:76:ASP:H	8	0.94
(1,4)	1:A:55:SER:H	1:A:54:HIS:H	10	0.94
(1,4)	1:A:55:SER:H	1:A:54:HIS:H	11	0.94
(1,191)	1:A:100:ARG:HA	1:A:101:ASN:H	16	0.94
(2,357)	1:A:69:ASN:HA	1:A:69:ASN:HD21	14	0.93
(2,357)	1:A:70:ASP:HA	1:A:69:ASN:HD21	14	0.93
(2,145)	1:A:43:THR:HA	1:A:58:CYS:H	12	0.93
(2,145)	1:A:56:THR:HB	1:A:58:CYS:H	12	0.93
(1,713)	1:A:14:GLN:HA	1:A:12:ASN:H	1	0.93
(1,713)	1:A:14:GLN:HA	1:A:12:ASN:H	9	0.93
(1,543)	1:A:112:ASP:HB2	1:A:114:SER:H	4	0.93
(1,543)	1:A:112:ASP:HB3	1:A:114:SER:H	4	0.93
(1,459)	1:A:70:ASP:HA	1:A:76:ASP:H	2	0.93
(1,455)	1:A:76:ASP:HB2	1:A:76:ASP:H	10	0.93
(1,455)	1:A:76:ASP:HB2	1:A:76:ASP:H	10	0.93
(1,455)	1:A:76:ASP:HB3	1:A:76:ASP:H	10	0.93
(1,455)	1:A:76:ASP:HB3	1:A:76:ASP:H	10	0.93
(1,455)	1:A:76:ASP:HB2	1:A:76:ASP:H	11	0.93
(1,455)	1:A:76:ASP:HB2	1:A:76:ASP:H	11	0.93
(1,455)	1:A:76:ASP:HB3	1:A:76:ASP:H	11	0.93

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,455)	1:A:76:ASP:HB3	1:A:76:ASP:H	11	0.93
(1,455)	1:A:76:ASP:HB2	1:A:76:ASP:H	17	0.93
(1,455)	1:A:76:ASP:HB2	1:A:76:ASP:H	17	0.93
(1,455)	1:A:76:ASP:HB3	1:A:76:ASP:H	17	0.93
(1,455)	1:A:76:ASP:HB3	1:A:76:ASP:H	17	0.93
(1,4)	1:A:55:SER:H	1:A:54:HIS:H	4	0.93
(1,4)	1:A:55:SER:H	1:A:54:HIS:H	16	0.93
(1,898)	1:A:57:GLN:HE22	1:A:71:CYS:H	7	0.92
(1,746)	1:A:50:SER:H	1:A:49:ILE:HG12	1	0.92
(1,746)	1:A:50:SER:H	1:A:49:ILE:HG13	1	0.92
(1,713)	1:A:14:GLN:HA	1:A:12:ASN:H	2	0.92
(1,713)	1:A:14:GLN:HA	1:A:12:ASN:H	19	0.92
(1,459)	1:A:70:ASP:HA	1:A:76:ASP:H	5	0.92
(1,455)	1:A:76:ASP:HB2	1:A:76:ASP:H	3	0.92
(1,455)	1:A:76:ASP:HB2	1:A:76:ASP:H	3	0.92
(1,455)	1:A:76:ASP:HB3	1:A:76:ASP:H	3	0.92
(1,455)	1:A:76:ASP:HB3	1:A:76:ASP:H	3	0.92
(1,437)	1:A:72:ASP:H	1:A:71:CYS:H	18	0.92
(1,4)	1:A:55:SER:H	1:A:54:HIS:H	7	0.92
(1,97)	1:A:98:ILE:HD11	1:A:99:SER:H	20	0.91
(1,97)	1:A:98:ILE:HD12	1:A:99:SER:H	20	0.91
(1,97)	1:A:98:ILE:HD13	1:A:99:SER:H	20	0.91
(1,877)	1:A:22:CYS:HA	1:A:44:CYS:H	9	0.91
(1,746)	1:A:50:SER:H	1:A:49:ILE:HG12	20	0.91
(1,746)	1:A:50:SER:H	1:A:49:ILE:HG13	20	0.91
(1,713)	1:A:14:GLN:HA	1:A:12:ASN:H	6	0.91
(1,455)	1:A:76:ASP:HB2	1:A:76:ASP:H	18	0.91
(1,455)	1:A:76:ASP:HB2	1:A:76:ASP:H	18	0.91
(1,455)	1:A:76:ASP:HB3	1:A:76:ASP:H	18	0.91
(1,455)	1:A:76:ASP:HB3	1:A:76:ASP:H	18	0.91
(1,4)	1:A:55:SER:H	1:A:54:HIS:H	9	0.91
(2,330)	1:A:92:CYS:HA	1:A:93:SER:H	2	0.9
(2,330)	1:A:111:SER:HG	1:A:93:SER:H	2	0.9
(2,330)	1:A:114:SER:HG	1:A:93:SER:H	2	0.9
(2,330)	1:A:92:CYS:HA	1:A:93:SER:H	5	0.9
(2,330)	1:A:111:SER:HG	1:A:93:SER:H	5	0.9
(2,330)	1:A:114:SER:HG	1:A:93:SER:H	5	0.9
(2,215)	1:A:6:SER:H	1:A:5:GLU:H	18	0.9
(2,215)	1:A:7:ASP:H	1:A:5:GLU:H	18	0.9
(1,746)	1:A:50:SER:H	1:A:49:ILE:HG12	17	0.9
(1,746)	1:A:50:SER:H	1:A:49:ILE:HG13	17	0.9
(1,543)	1:A:112:ASP:HB2	1:A:114:SER:H	7	0.9

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,543)	1:A:112:ASP:HB3	1:A:114:SER:H	7	0.9
(1,455)	1:A:76:ASP:HB2	1:A:76:ASP:H	12	0.9
(1,455)	1:A:76:ASP:HB2	1:A:76:ASP:H	12	0.9
(1,455)	1:A:76:ASP:HB3	1:A:76:ASP:H	12	0.9
(1,455)	1:A:76:ASP:HB3	1:A:76:ASP:H	12	0.9
(1,437)	1:A:72:ASP:H	1:A:71:CYS:H	14	0.9
(1,191)	1:A:100:ARG:HA	1:A:101:ASN:H	3	0.9
(2,264)	1:A:42:ARG:HB2	1:A:50:SER:H	15	0.89
(2,264)	1:A:42:ARG:HB3	1:A:50:SER:H	15	0.89
(2,264)	1:A:49:ILE:HB	1:A:50:SER:H	15	0.89
(2,215)	1:A:6:SER:H	1:A:5:GLU:H	3	0.89
(2,215)	1:A:7:ASP:H	1:A:5:GLU:H	3	0.89
(2,215)	1:A:6:SER:H	1:A:5:GLU:H	13	0.89
(2,215)	1:A:7:ASP:H	1:A:5:GLU:H	13	0.89
(1,713)	1:A:14:GLN:HA	1:A:12:ASN:H	14	0.89
(1,688)	1:A:69:ASN:H	1:A:69:ASN:HD22	4	0.89
(1,543)	1:A:112:ASP:HB2	1:A:114:SER:H	6	0.89
(1,543)	1:A:112:ASP:HB3	1:A:114:SER:H	6	0.89
(1,459)	1:A:70:ASP:HA	1:A:76:ASP:H	16	0.89
(1,455)	1:A:76:ASP:HB2	1:A:76:ASP:H	9	0.89
(1,455)	1:A:76:ASP:HB2	1:A:76:ASP:H	9	0.89
(1,455)	1:A:76:ASP:HB3	1:A:76:ASP:H	9	0.89
(1,455)	1:A:76:ASP:HB3	1:A:76:ASP:H	9	0.89
(1,455)	1:A:76:ASP:HB2	1:A:76:ASP:H	19	0.89
(1,455)	1:A:76:ASP:HB2	1:A:76:ASP:H	19	0.89
(1,455)	1:A:76:ASP:HB3	1:A:76:ASP:H	19	0.89
(1,455)	1:A:76:ASP:HB3	1:A:76:ASP:H	19	0.89
(1,4)	1:A:55:SER:H	1:A:54:HIS:H	2	0.89
(1,4)	1:A:55:SER:H	1:A:54:HIS:H	6	0.89
(1,4)	1:A:55:SER:H	1:A:54:HIS:H	17	0.89
(2,264)	1:A:42:ARG:HB2	1:A:50:SER:H	10	0.88
(2,264)	1:A:42:ARG:HB3	1:A:50:SER:H	10	0.88
(2,264)	1:A:49:ILE:HB	1:A:50:SER:H	10	0.88
(1,746)	1:A:50:SER:H	1:A:49:ILE:HG12	3	0.88
(1,746)	1:A:50:SER:H	1:A:49:ILE:HG13	3	0.88
(1,713)	1:A:14:GLN:HA	1:A:12:ASN:H	10	0.88
(1,687)	1:A:69:ASN:HD21	1:A:74:GLY:H	12	0.88
(1,459)	1:A:70:ASP:HA	1:A:76:ASP:H	19	0.88
(1,447)	1:A:71:CYS:HA	1:A:74:GLY:H	15	0.88
(1,437)	1:A:72:ASP:H	1:A:71:CYS:H	10	0.88
(1,4)	1:A:55:SER:H	1:A:54:HIS:H	19	0.88
(1,191)	1:A:100:ARG:HA	1:A:101:ASN:H	10	0.88

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,191)	1:A:100:ARG:HA	1:A:101:ASN:H	20	0.88
(1,923)	1:A:8:PHE:HB2	1:A:16:VAL:HA	20	0.87
(1,713)	1:A:14:GLN:HA	1:A:12:ASN:H	15	0.87
(1,688)	1:A:69:ASN:H	1:A:69:ASN:HD22	14	0.87
(1,688)	1:A:69:ASN:H	1:A:69:ASN:HD22	18	0.87
(1,584)	1:A:27:ASP:HB2	1:A:27:ASP:H	10	0.87
(1,584)	1:A:27:ASP:HB3	1:A:27:ASP:H	10	0.87
(1,455)	1:A:76:ASP:HB2	1:A:76:ASP:H	1	0.87
(1,455)	1:A:76:ASP:HB2	1:A:76:ASP:H	1	0.87
(1,455)	1:A:76:ASP:HB3	1:A:76:ASP:H	1	0.87
(1,455)	1:A:76:ASP:HB3	1:A:76:ASP:H	1	0.87
(1,4)	1:A:55:SER:H	1:A:54:HIS:H	3	0.87
(1,191)	1:A:100:ARG:HA	1:A:101:ASN:H	7	0.87
(1,191)	1:A:100:ARG:HA	1:A:101:ASN:H	14	0.87
(1,191)	1:A:100:ARG:HA	1:A:101:ASN:H	15	0.87
(1,150)	1:A:104:CYS:H	1:A:106:GLY:H	3	0.87
(2,72)	1:A:110:CYS:HB2	1:A:113:GLY:H	2	0.86
(2,72)	1:A:110:CYS:HB3	1:A:113:GLY:H	2	0.86
(2,72)	1:A:112:ASP:HB2	1:A:113:GLY:H	2	0.86
(2,72)	1:A:112:ASP:HB3	1:A:113:GLY:H	2	0.86
(2,357)	1:A:69:ASN:HA	1:A:69:ASN:HD21	9	0.86
(2,357)	1:A:70:ASP:HA	1:A:69:ASN:HD21	9	0.86
(2,330)	1:A:92:CYS:HA	1:A:93:SER:H	19	0.86
(2,330)	1:A:111:SER:HG	1:A:93:SER:H	19	0.86
(2,330)	1:A:114:SER:HG	1:A:93:SER:H	19	0.86
(2,23)	1:A:31:GLY:HA2	1:A:33:ASP:H	8	0.86
(2,23)	1:A:31:GLY:HA3	1:A:33:ASP:H	8	0.86
(2,23)	1:A:32:SER:HB2	1:A:33:ASP:H	8	0.86
(2,23)	1:A:32:SER:HB3	1:A:33:ASP:H	8	0.86
(2,215)	1:A:6:SER:H	1:A:5:GLU:H	8	0.86
(2,215)	1:A:7:ASP:H	1:A:5:GLU:H	8	0.86
(2,215)	1:A:6:SER:H	1:A:5:GLU:H	17	0.86
(2,215)	1:A:7:ASP:H	1:A:5:GLU:H	17	0.86
(1,97)	1:A:98:ILE:HD11	1:A:99:SER:H	15	0.86
(1,97)	1:A:98:ILE:HD12	1:A:99:SER:H	15	0.86
(1,97)	1:A:98:ILE:HD13	1:A:99:SER:H	15	0.86
(1,888)	1:A:49:ILE:HA	1:A:61:VAL:H	10	0.86
(1,877)	1:A:22:CYS:HA	1:A:44:CYS:H	19	0.86
(1,824)	1:A:118:ASP:H	1:A:116:GLU:H	6	0.86
(1,584)	1:A:27:ASP:HB2	1:A:27:ASP:H	19	0.86
(1,584)	1:A:27:ASP:HB3	1:A:27:ASP:H	19	0.86
(1,459)	1:A:70:ASP:HA	1:A:76:ASP:H	11	0.86

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,455)	1:A:76:ASP:HB2	1:A:76:ASP:H	6	0.86
(1,455)	1:A:76:ASP:HB2	1:A:76:ASP:H	6	0.86
(1,455)	1:A:76:ASP:HB3	1:A:76:ASP:H	6	0.86
(1,455)	1:A:76:ASP:HB3	1:A:76:ASP:H	6	0.86
(1,455)	1:A:76:ASP:HB2	1:A:76:ASP:H	15	0.86
(1,455)	1:A:76:ASP:HB2	1:A:76:ASP:H	15	0.86
(1,455)	1:A:76:ASP:HB3	1:A:76:ASP:H	15	0.86
(1,455)	1:A:76:ASP:HB3	1:A:76:ASP:H	15	0.86
(1,191)	1:A:100:ARG:HA	1:A:101:ASN:H	2	0.86
(1,191)	1:A:100:ARG:HA	1:A:101:ASN:H	9	0.86
(2,98)	1:A:28:CYS:HB2	1:A:11:ASN:H	4	0.85
(2,98)	1:A:28:CYS:HB3	1:A:11:ASN:H	4	0.85
(2,98)	1:A:32:SER:HB2	1:A:11:ASN:H	4	0.85
(2,98)	1:A:32:SER:HB3	1:A:11:ASN:H	4	0.85
(2,215)	1:A:6:SER:H	1:A:5:GLU:H	2	0.85
(2,215)	1:A:7:ASP:H	1:A:5:GLU:H	2	0.85
(2,215)	1:A:6:SER:H	1:A:5:GLU:H	19	0.85
(2,215)	1:A:7:ASP:H	1:A:5:GLU:H	19	0.85
(2,215)	1:A:6:SER:H	1:A:5:GLU:H	20	0.85
(2,215)	1:A:7:ASP:H	1:A:5:GLU:H	20	0.85
(1,97)	1:A:98:ILE:HD11	1:A:99:SER:H	13	0.85
(1,97)	1:A:98:ILE:HD12	1:A:99:SER:H	13	0.85
(1,97)	1:A:98:ILE:HD13	1:A:99:SER:H	13	0.85
(1,898)	1:A:57:GLN:HE22	1:A:71:CYS:H	2	0.85
(1,877)	1:A:22:CYS:HA	1:A:44:CYS:H	5	0.85
(1,877)	1:A:22:CYS:HA	1:A:44:CYS:H	14	0.85
(1,877)	1:A:22:CYS:HA	1:A:44:CYS:H	17	0.85
(1,459)	1:A:70:ASP:HA	1:A:76:ASP:H	3	0.85
(1,447)	1:A:71:CYS:HA	1:A:74:GLY:H	4	0.85
(1,447)	1:A:71:CYS:HA	1:A:74:GLY:H	12	0.85
(1,437)	1:A:72:ASP:H	1:A:71:CYS:H	8	0.85
(1,253)	1:A:83:ILE:HB	1:A:83:ILE:H	17	0.85
(1,191)	1:A:100:ARG:HA	1:A:101:ASN:H	4	0.85
(1,191)	1:A:100:ARG:HA	1:A:101:ASN:H	11	0.85
(1,191)	1:A:100:ARG:HA	1:A:101:ASN:H	13	0.85
(2,45)	1:A:21:LYS:HB2	1:A:22:CYS:H	2	0.84
(2,45)	1:A:21:LYS:HB3	1:A:22:CYS:H	2	0.84
(2,45)	1:A:42:ARG:HB2	1:A:22:CYS:H	2	0.84
(2,45)	1:A:42:ARG:HB3	1:A:22:CYS:H	2	0.84
(2,330)	1:A:92:CYS:HA	1:A:93:SER:H	16	0.84
(2,330)	1:A:111:SER:HG	1:A:93:SER:H	16	0.84
(2,330)	1:A:114:SER:HG	1:A:93:SER:H	16	0.84

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,215)	1:A:6:SER:H	1:A:5:GLU:H	1	0.84
(2,215)	1:A:7:ASP:H	1:A:5:GLU:H	1	0.84
(2,215)	1:A:6:SER:H	1:A:5:GLU:H	6	0.84
(2,215)	1:A:7:ASP:H	1:A:5:GLU:H	6	0.84
(1,687)	1:A:69:ASN:HD21	1:A:74:GLY:H	8	0.84
(1,584)	1:A:27:ASP:HB2	1:A:27:ASP:H	2	0.84
(1,584)	1:A:27:ASP:HB3	1:A:27:ASP:H	2	0.84
(1,584)	1:A:27:ASP:HB2	1:A:27:ASP:H	4	0.84
(1,584)	1:A:27:ASP:HB3	1:A:27:ASP:H	4	0.84
(1,459)	1:A:70:ASP:HA	1:A:76:ASP:H	9	0.84
(1,4)	1:A:55:SER:H	1:A:54:HIS:H	8	0.84
(1,4)	1:A:55:SER:H	1:A:54:HIS:H	20	0.84
(1,253)	1:A:83:ILE:HB	1:A:83:ILE:H	13	0.84
(1,253)	1:A:83:ILE:HB	1:A:83:ILE:H	15	0.84
(1,191)	1:A:100:ARG:HA	1:A:101:ASN:H	1	0.84
(1,191)	1:A:100:ARG:HA	1:A:101:ASN:H	5	0.84
(1,191)	1:A:100:ARG:HA	1:A:101:ASN:H	6	0.84
(1,191)	1:A:100:ARG:HA	1:A:101:ASN:H	8	0.84
(1,191)	1:A:100:ARG:HA	1:A:101:ASN:H	12	0.84
(1,191)	1:A:100:ARG:HA	1:A:101:ASN:H	17	0.84
(1,191)	1:A:100:ARG:HA	1:A:101:ASN:H	18	0.84
(1,150)	1:A:104:CYS:H	1:A:106:GLY:H	7	0.84
(2,45)	1:A:21:LYS:HB2	1:A:22:CYS:H	17	0.83
(2,45)	1:A:21:LYS:HB3	1:A:22:CYS:H	17	0.83
(2,45)	1:A:42:ARG:HB2	1:A:22:CYS:H	17	0.83
(2,45)	1:A:42:ARG:HB3	1:A:22:CYS:H	17	0.83
(2,357)	1:A:69:ASN:HA	1:A:69:ASN:HD21	20	0.83
(2,357)	1:A:70:ASP:HA	1:A:69:ASN:HD21	20	0.83
(2,354)	1:A:51:CYS:HA	1:A:69:ASN:H	14	0.83
(2,354)	1:A:68:GLU:HA	1:A:69:ASN:H	14	0.83
(2,330)	1:A:92:CYS:HA	1:A:93:SER:H	9	0.83
(2,330)	1:A:111:SER:HG	1:A:93:SER:H	9	0.83
(2,330)	1:A:114:SER:HG	1:A:93:SER:H	9	0.83
(2,330)	1:A:92:CYS:HA	1:A:93:SER:H	10	0.83
(2,330)	1:A:111:SER:HG	1:A:93:SER:H	10	0.83
(2,330)	1:A:114:SER:HG	1:A:93:SER:H	10	0.83
(2,330)	1:A:92:CYS:HA	1:A:93:SER:H	17	0.83
(2,330)	1:A:111:SER:HG	1:A:93:SER:H	17	0.83
(2,330)	1:A:114:SER:HG	1:A:93:SER:H	17	0.83
(2,215)	1:A:6:SER:H	1:A:5:GLU:H	5	0.83
(2,215)	1:A:7:ASP:H	1:A:5:GLU:H	5	0.83
(2,215)	1:A:6:SER:H	1:A:5:GLU:H	9	0.83

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,215)	1:A:7:ASP:H	1:A:5:GLU:H	9	0.83
(2,215)	1:A:6:SER:H	1:A:5:GLU:H	11	0.83
(2,215)	1:A:7:ASP:H	1:A:5:GLU:H	11	0.83
(2,207)	1:A:79:ASN:HB2	1:A:79:ASN:HD22	19	0.83
(2,207)	1:A:97:CYS:HB2	1:A:79:ASN:HD22	19	0.83
(1,824)	1:A:118:ASP:H	1:A:116:GLU:H	17	0.83
(1,746)	1:A:50:SER:H	1:A:49:ILE:HG12	2	0.83
(1,746)	1:A:50:SER:H	1:A:49:ILE:HG13	2	0.83
(1,746)	1:A:50:SER:H	1:A:49:ILE:HG12	6	0.83
(1,746)	1:A:50:SER:H	1:A:49:ILE:HG13	6	0.83
(1,713)	1:A:14:GLN:HA	1:A:12:ASN:H	5	0.83
(1,584)	1:A:27:ASP:HB2	1:A:27:ASP:H	3	0.83
(1,584)	1:A:27:ASP:HB3	1:A:27:ASP:H	3	0.83
(1,584)	1:A:27:ASP:HB2	1:A:27:ASP:H	9	0.83
(1,584)	1:A:27:ASP:HB3	1:A:27:ASP:H	9	0.83
(1,459)	1:A:70:ASP:HA	1:A:76:ASP:H	1	0.83
(1,455)	1:A:76:ASP:HB2	1:A:76:ASP:H	13	0.83
(1,455)	1:A:76:ASP:HB2	1:A:76:ASP:H	13	0.83
(1,455)	1:A:76:ASP:HB3	1:A:76:ASP:H	13	0.83
(1,455)	1:A:76:ASP:HB3	1:A:76:ASP:H	13	0.83
(1,437)	1:A:72:ASP:H	1:A:71:CYS:H	4	0.83
(1,150)	1:A:104:CYS:H	1:A:106:GLY:H	4	0.83
(2,72)	1:A:110:CYS:HB2	1:A:113:GLY:H	19	0.82
(2,72)	1:A:110:CYS:HB3	1:A:113:GLY:H	19	0.82
(2,72)	1:A:112:ASP:HB2	1:A:113:GLY:H	19	0.82
(2,72)	1:A:112:ASP:HB3	1:A:113:GLY:H	19	0.82
(2,354)	1:A:51:CYS:HA	1:A:69:ASN:H	3	0.82
(2,354)	1:A:68:GLU:HA	1:A:69:ASN:H	3	0.82
(2,354)	1:A:51:CYS:HA	1:A:69:ASN:H	4	0.82
(2,354)	1:A:68:GLU:HA	1:A:69:ASN:H	4	0.82
(2,354)	1:A:51:CYS:HA	1:A:69:ASN:H	7	0.82
(2,354)	1:A:68:GLU:HA	1:A:69:ASN:H	7	0.82
(2,354)	1:A:51:CYS:HA	1:A:69:ASN:H	18	0.82
(2,354)	1:A:68:GLU:HA	1:A:69:ASN:H	18	0.82
(2,354)	1:A:51:CYS:HA	1:A:69:ASN:H	20	0.82
(2,354)	1:A:68:GLU:HA	1:A:69:ASN:H	20	0.82
(2,330)	1:A:92:CYS:HA	1:A:93:SER:H	1	0.82
(2,330)	1:A:111:SER:HG	1:A:93:SER:H	1	0.82
(2,330)	1:A:114:SER:HG	1:A:93:SER:H	1	0.82
(2,330)	1:A:92:CYS:HA	1:A:93:SER:H	8	0.82
(2,330)	1:A:111:SER:HG	1:A:93:SER:H	8	0.82
(2,330)	1:A:114:SER:HG	1:A:93:SER:H	8	0.82

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,215)	1:A:6:SER:H	1:A:5:GLU:H	7	0.82
(2,215)	1:A:7:ASP:H	1:A:5:GLU:H	7	0.82
(2,215)	1:A:6:SER:H	1:A:5:GLU:H	16	0.82
(2,215)	1:A:7:ASP:H	1:A:5:GLU:H	16	0.82
(1,97)	1:A:98:ILE:HD11	1:A:99:SER:H	14	0.82
(1,97)	1:A:98:ILE:HD12	1:A:99:SER:H	14	0.82
(1,97)	1:A:98:ILE:HD13	1:A:99:SER:H	14	0.82
(1,877)	1:A:22:CYS:HA	1:A:44:CYS:H	16	0.82
(1,756)	1:A:57:GLN:HB2	1:A:57:GLN:HE21	20	0.82
(1,756)	1:A:57:GLN:HB2	1:A:57:GLN:HE21	20	0.82
(1,756)	1:A:57:GLN:HB3	1:A:57:GLN:HE21	20	0.82
(1,756)	1:A:57:GLN:HB3	1:A:57:GLN:HE21	20	0.82
(1,584)	1:A:27:ASP:HB2	1:A:27:ASP:H	18	0.82
(1,584)	1:A:27:ASP:HB3	1:A:27:ASP:H	18	0.82
(1,253)	1:A:83:ILE:HB	1:A:83:ILE:H	14	0.82
(1,191)	1:A:100:ARG:HA	1:A:101:ASN:H	19	0.82
(2,45)	1:A:21:LYS:HB2	1:A:22:CYS:H	3	0.81
(2,45)	1:A:21:LYS:HB3	1:A:22:CYS:H	3	0.81
(2,45)	1:A:42:ARG:HB2	1:A:22:CYS:H	3	0.81
(2,45)	1:A:42:ARG:HB3	1:A:22:CYS:H	3	0.81
(2,45)	1:A:21:LYS:HB2	1:A:22:CYS:H	14	0.81
(2,45)	1:A:21:LYS:HB3	1:A:22:CYS:H	14	0.81
(2,45)	1:A:42:ARG:HB2	1:A:22:CYS:H	14	0.81
(2,45)	1:A:42:ARG:HB3	1:A:22:CYS:H	14	0.81
(2,45)	1:A:21:LYS:HB2	1:A:22:CYS:H	15	0.81
(2,45)	1:A:21:LYS:HB3	1:A:22:CYS:H	15	0.81
(2,45)	1:A:42:ARG:HB2	1:A:22:CYS:H	15	0.81
(2,45)	1:A:42:ARG:HB3	1:A:22:CYS:H	15	0.81
(2,45)	1:A:21:LYS:HB2	1:A:22:CYS:H	19	0.81
(2,45)	1:A:21:LYS:HB3	1:A:22:CYS:H	19	0.81
(2,45)	1:A:42:ARG:HB2	1:A:22:CYS:H	19	0.81
(2,45)	1:A:42:ARG:HB3	1:A:22:CYS:H	19	0.81
(2,379)	1:A:12:ASN:HB2	1:A:12:ASN:HD21	17	0.81
(2,379)	1:A:12:ASN:HB3	1:A:12:ASN:HD21	17	0.81
(2,379)	1:A:13:GLY:HA2	1:A:12:ASN:HD21	17	0.81
(2,379)	1:A:13:GLY:HA3	1:A:12:ASN:HD21	17	0.81
(2,357)	1:A:69:ASN:HA	1:A:69:ASN:HD21	13	0.81
(2,357)	1:A:70:ASP:HA	1:A:69:ASN:HD21	13	0.81
(2,354)	1:A:51:CYS:HA	1:A:69:ASN:H	6	0.81
(2,354)	1:A:68:GLU:HA	1:A:69:ASN:H	6	0.81
(2,354)	1:A:51:CYS:HA	1:A:69:ASN:H	17	0.81
(2,354)	1:A:68:GLU:HA	1:A:69:ASN:H	17	0.81

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,239)	1:A:64:ARG:HB2	1:A:69:ASN:H	12	0.81
(2,239)	1:A:64:ARG:HB3	1:A:69:ASN:H	12	0.81
(2,239)	1:A:64:ARG:HG2	1:A:69:ASN:H	12	0.81
(2,239)	1:A:64:ARG:HG3	1:A:69:ASN:H	12	0.81
(2,239)	1:A:68:GLU:HB2	1:A:69:ASN:H	12	0.81
(2,239)	1:A:68:GLU:HB3	1:A:69:ASN:H	12	0.81
(2,215)	1:A:6:SER:H	1:A:5:GLU:H	10	0.81
(2,215)	1:A:7:ASP:H	1:A:5:GLU:H	10	0.81
(1,97)	1:A:98:ILE:HD11	1:A:99:SER:H	11	0.81
(1,97)	1:A:98:ILE:HD12	1:A:99:SER:H	11	0.81
(1,97)	1:A:98:ILE:HD13	1:A:99:SER:H	11	0.81
(1,766)	1:A:48:GLU:HB2	1:A:58:CYS:H	10	0.81
(1,766)	1:A:48:GLU:HB3	1:A:58:CYS:H	10	0.81
(1,746)	1:A:50:SER:H	1:A:49:ILE:HG12	9	0.81
(1,746)	1:A:50:SER:H	1:A:49:ILE:HG13	9	0.81
(1,746)	1:A:50:SER:H	1:A:49:ILE:HG12	13	0.81
(1,746)	1:A:50:SER:H	1:A:49:ILE:HG13	13	0.81
(1,584)	1:A:27:ASP:HB2	1:A:27:ASP:H	15	0.81
(1,584)	1:A:27:ASP:HB3	1:A:27:ASP:H	15	0.81
(1,447)	1:A:71:CYS:HA	1:A:74:GLY:H	18	0.81
(1,429)	1:A:69:ASN:HA	1:A:69:ASN:H	3	0.81
(1,429)	1:A:69:ASN:HA	1:A:69:ASN:H	10	0.81
(1,429)	1:A:69:ASN:HA	1:A:69:ASN:H	11	0.81
(1,150)	1:A:104:CYS:H	1:A:106:GLY:H	6	0.81
(1,150)	1:A:104:CYS:H	1:A:106:GLY:H	10	0.81
(2,45)	1:A:21:LYS:HB2	1:A:22:CYS:H	20	0.8
(2,45)	1:A:21:LYS:HB3	1:A:22:CYS:H	20	0.8
(2,45)	1:A:42:ARG:HB2	1:A:22:CYS:H	20	0.8
(2,45)	1:A:42:ARG:HB3	1:A:22:CYS:H	20	0.8
(2,379)	1:A:12:ASN:HB2	1:A:12:ASN:HD21	1	0.8
(2,379)	1:A:12:ASN:HB3	1:A:12:ASN:HD21	1	0.8
(2,379)	1:A:13:GLY:HA2	1:A:12:ASN:HD21	1	0.8
(2,379)	1:A:13:GLY:HA3	1:A:12:ASN:HD21	1	0.8
(2,379)	1:A:12:ASN:HB2	1:A:12:ASN:HD21	2	0.8
(2,379)	1:A:12:ASN:HB3	1:A:12:ASN:HD21	2	0.8
(2,379)	1:A:13:GLY:HA2	1:A:12:ASN:HD21	2	0.8
(2,379)	1:A:13:GLY:HA3	1:A:12:ASN:HD21	2	0.8
(2,379)	1:A:12:ASN:HB2	1:A:12:ASN:HD21	3	0.8
(2,379)	1:A:12:ASN:HB3	1:A:12:ASN:HD21	3	0.8
(2,379)	1:A:13:GLY:HA2	1:A:12:ASN:HD21	3	0.8
(2,379)	1:A:13:GLY:HA3	1:A:12:ASN:HD21	3	0.8
(2,379)	1:A:12:ASN:HB2	1:A:12:ASN:HD21	4	0.8

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,379)	1:A:12:ASN:HB3	1:A:12:ASN:HD21	4	0.8
(2,379)	1:A:13:GLY:HA2	1:A:12:ASN:HD21	4	0.8
(2,379)	1:A:13:GLY:HA3	1:A:12:ASN:HD21	4	0.8
(2,379)	1:A:12:ASN:HB2	1:A:12:ASN:HD21	5	0.8
(2,379)	1:A:12:ASN:HB3	1:A:12:ASN:HD21	5	0.8
(2,379)	1:A:13:GLY:HA2	1:A:12:ASN:HD21	5	0.8
(2,379)	1:A:13:GLY:HA3	1:A:12:ASN:HD21	5	0.8
(2,379)	1:A:12:ASN:HB2	1:A:12:ASN:HD21	6	0.8
(2,379)	1:A:12:ASN:HB3	1:A:12:ASN:HD21	6	0.8
(2,379)	1:A:13:GLY:HA2	1:A:12:ASN:HD21	6	0.8
(2,379)	1:A:13:GLY:HA3	1:A:12:ASN:HD21	6	0.8
(2,379)	1:A:12:ASN:HB2	1:A:12:ASN:HD21	7	0.8
(2,379)	1:A:12:ASN:HB3	1:A:12:ASN:HD21	7	0.8
(2,379)	1:A:13:GLY:HA2	1:A:12:ASN:HD21	7	0.8
(2,379)	1:A:13:GLY:HA3	1:A:12:ASN:HD21	7	0.8
(2,379)	1:A:12:ASN:HB2	1:A:12:ASN:HD21	8	0.8
(2,379)	1:A:12:ASN:HB3	1:A:12:ASN:HD21	8	0.8
(2,379)	1:A:13:GLY:HA2	1:A:12:ASN:HD21	8	0.8
(2,379)	1:A:13:GLY:HA3	1:A:12:ASN:HD21	8	0.8
(2,379)	1:A:12:ASN:HB2	1:A:12:ASN:HD21	10	0.8
(2,379)	1:A:12:ASN:HB3	1:A:12:ASN:HD21	10	0.8
(2,379)	1:A:13:GLY:HA2	1:A:12:ASN:HD21	10	0.8
(2,379)	1:A:13:GLY:HA3	1:A:12:ASN:HD21	10	0.8
(2,379)	1:A:12:ASN:HB2	1:A:12:ASN:HD21	11	0.8
(2,379)	1:A:12:ASN:HB3	1:A:12:ASN:HD21	11	0.8
(2,379)	1:A:13:GLY:HA2	1:A:12:ASN:HD21	11	0.8
(2,379)	1:A:13:GLY:HA3	1:A:12:ASN:HD21	11	0.8
(2,379)	1:A:12:ASN:HB2	1:A:12:ASN:HD21	12	0.8
(2,379)	1:A:12:ASN:HB3	1:A:12:ASN:HD21	12	0.8
(2,379)	1:A:13:GLY:HA2	1:A:12:ASN:HD21	12	0.8
(2,379)	1:A:13:GLY:HA3	1:A:12:ASN:HD21	12	0.8
(2,379)	1:A:12:ASN:HB2	1:A:12:ASN:HD21	13	0.8
(2,379)	1:A:12:ASN:HB3	1:A:12:ASN:HD21	13	0.8
(2,379)	1:A:13:GLY:HA2	1:A:12:ASN:HD21	13	0.8
(2,379)	1:A:13:GLY:HA3	1:A:12:ASN:HD21	13	0.8
(2,379)	1:A:12:ASN:HB2	1:A:12:ASN:HD21	14	0.8
(2,379)	1:A:12:ASN:HB3	1:A:12:ASN:HD21	14	0.8
(2,379)	1:A:13:GLY:HA2	1:A:12:ASN:HD21	14	0.8
(2,379)	1:A:13:GLY:HA3	1:A:12:ASN:HD21	14	0.8
(2,379)	1:A:12:ASN:HB2	1:A:12:ASN:HD21	15	0.8
(2,379)	1:A:12:ASN:HB3	1:A:12:ASN:HD21	15	0.8
(2,379)	1:A:13:GLY:HA2	1:A:12:ASN:HD21	15	0.8

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,379)	1:A:13:GLY:HA3	1:A:12:ASN:HD21	15	0.8
(2,379)	1:A:12:ASN:HB2	1:A:12:ASN:HD21	18	0.8
(2,379)	1:A:12:ASN:HB3	1:A:12:ASN:HD21	18	0.8
(2,379)	1:A:13:GLY:HA2	1:A:12:ASN:HD21	18	0.8
(2,379)	1:A:13:GLY:HA3	1:A:12:ASN:HD21	18	0.8
(2,379)	1:A:12:ASN:HB2	1:A:12:ASN:HD21	20	0.8
(2,379)	1:A:12:ASN:HB3	1:A:12:ASN:HD21	20	0.8
(2,379)	1:A:13:GLY:HA2	1:A:12:ASN:HD21	20	0.8
(2,379)	1:A:13:GLY:HA3	1:A:12:ASN:HD21	20	0.8
(2,357)	1:A:69:ASN:HA	1:A:69:ASN:HD21	2	0.8
(2,357)	1:A:70:ASP:HA	1:A:69:ASN:HD21	2	0.8
(2,357)	1:A:69:ASN:HA	1:A:69:ASN:HD21	5	0.8
(2,357)	1:A:70:ASP:HA	1:A:69:ASN:HD21	5	0.8
(2,354)	1:A:51:CYS:HA	1:A:69:ASN:H	11	0.8
(2,354)	1:A:68:GLU:HA	1:A:69:ASN:H	11	0.8
(2,354)	1:A:51:CYS:HA	1:A:69:ASN:H	12	0.8
(2,354)	1:A:68:GLU:HA	1:A:69:ASN:H	12	0.8
(2,354)	1:A:51:CYS:HA	1:A:69:ASN:H	13	0.8
(2,354)	1:A:68:GLU:HA	1:A:69:ASN:H	13	0.8
(2,354)	1:A:51:CYS:HA	1:A:69:ASN:H	19	0.8
(2,354)	1:A:68:GLU:HA	1:A:69:ASN:H	19	0.8
(2,215)	1:A:6:SER:H	1:A:5:GLU:H	4	0.8
(2,215)	1:A:7:ASP:H	1:A:5:GLU:H	4	0.8
(1,923)	1:A:8:PHE:HB2	1:A:16:VAL:HA	1	0.8
(1,923)	1:A:8:PHE:HB2	1:A:16:VAL:HA	2	0.8
(1,799)	1:A:85:CYS:HA	1:A:97:CYS:H	16	0.8
(1,692)	1:A:8:PHE:HB2	1:A:8:PHE:H	19	0.8
(1,692)	1:A:8:PHE:HB3	1:A:8:PHE:H	19	0.8
(1,686)	1:A:74:GLY:H	1:A:69:ASN:HD22	7	0.8
(1,584)	1:A:27:ASP:HB2	1:A:27:ASP:H	7	0.8
(1,584)	1:A:27:ASP:HB3	1:A:27:ASP:H	7	0.8
(1,429)	1:A:69:ASN:HA	1:A:69:ASN:H	1	0.8
(1,429)	1:A:69:ASN:HA	1:A:69:ASN:H	4	0.8
(1,429)	1:A:69:ASN:HA	1:A:69:ASN:H	7	0.8
(1,429)	1:A:69:ASN:HA	1:A:69:ASN:H	8	0.8
(1,429)	1:A:69:ASN:HA	1:A:69:ASN:H	9	0.8
(1,429)	1:A:69:ASN:HA	1:A:69:ASN:H	12	0.8
(1,429)	1:A:69:ASN:HA	1:A:69:ASN:H	13	0.8
(1,429)	1:A:69:ASN:HA	1:A:69:ASN:H	14	0.8
(1,429)	1:A:69:ASN:HA	1:A:69:ASN:H	16	0.8
(1,429)	1:A:69:ASN:HA	1:A:69:ASN:H	18	0.8
(1,429)	1:A:69:ASN:HA	1:A:69:ASN:H	19	0.8

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,429)	1:A:69:ASN:HA	1:A:69:ASN:H	20	0.8
(2,45)	1:A:21:LYS:HB2	1:A:22:CYS:H	18	0.79
(2,45)	1:A:21:LYS:HB3	1:A:22:CYS:H	18	0.79
(2,45)	1:A:42:ARG:HB2	1:A:22:CYS:H	18	0.79
(2,45)	1:A:42:ARG:HB3	1:A:22:CYS:H	18	0.79
(2,379)	1:A:12:ASN:HB2	1:A:12:ASN:HD21	9	0.79
(2,379)	1:A:12:ASN:HB3	1:A:12:ASN:HD21	9	0.79
(2,379)	1:A:13:GLY:HA2	1:A:12:ASN:HD21	9	0.79
(2,379)	1:A:13:GLY:HA3	1:A:12:ASN:HD21	9	0.79
(2,379)	1:A:12:ASN:HB2	1:A:12:ASN:HD21	16	0.79
(2,379)	1:A:12:ASN:HB3	1:A:12:ASN:HD21	16	0.79
(2,379)	1:A:13:GLY:HA2	1:A:12:ASN:HD21	16	0.79
(2,379)	1:A:13:GLY:HA3	1:A:12:ASN:HD21	16	0.79
(2,379)	1:A:12:ASN:HB2	1:A:12:ASN:HD21	19	0.79
(2,379)	1:A:12:ASN:HB3	1:A:12:ASN:HD21	19	0.79
(2,379)	1:A:13:GLY:HA2	1:A:12:ASN:HD21	19	0.79
(2,379)	1:A:13:GLY:HA3	1:A:12:ASN:HD21	19	0.79
(2,354)	1:A:51:CYS:HA	1:A:69:ASN:H	5	0.79
(2,354)	1:A:68:GLU:HA	1:A:69:ASN:H	5	0.79
(2,354)	1:A:51:CYS:HA	1:A:69:ASN:H	9	0.79
(2,354)	1:A:68:GLU:HA	1:A:69:ASN:H	9	0.79
(2,354)	1:A:51:CYS:HA	1:A:69:ASN:H	16	0.79
(2,354)	1:A:68:GLU:HA	1:A:69:ASN:H	16	0.79
(1,97)	1:A:98:ILE:HD11	1:A:99:SER:H	12	0.79
(1,97)	1:A:98:ILE:HD12	1:A:99:SER:H	12	0.79
(1,97)	1:A:98:ILE:HD13	1:A:99:SER:H	12	0.79
(1,923)	1:A:8:PHE:HB2	1:A:16:VAL:HA	13	0.79
(1,877)	1:A:22:CYS:HA	1:A:44:CYS:H	15	0.79
(1,824)	1:A:118:ASP:H	1:A:116:GLU:H	4	0.79
(1,770)	1:A:63:TRP:H	1:A:77:GLU:HG2	3	0.79
(1,770)	1:A:63:TRP:H	1:A:77:GLU:HG3	3	0.79
(1,746)	1:A:50:SER:H	1:A:49:ILE:HG12	7	0.79
(1,746)	1:A:50:SER:H	1:A:49:ILE:HG13	7	0.79
(1,746)	1:A:50:SER:H	1:A:49:ILE:HG12	19	0.79
(1,746)	1:A:50:SER:H	1:A:49:ILE:HG13	19	0.79
(1,687)	1:A:69:ASN:HD21	1:A:74:GLY:H	15	0.79
(1,584)	1:A:27:ASP:HB2	1:A:27:ASP:H	1	0.79
(1,584)	1:A:27:ASP:HB3	1:A:27:ASP:H	1	0.79
(1,584)	1:A:27:ASP:HB2	1:A:27:ASP:H	11	0.79
(1,584)	1:A:27:ASP:HB3	1:A:27:ASP:H	11	0.79
(1,584)	1:A:27:ASP:HB2	1:A:27:ASP:H	12	0.79
(1,584)	1:A:27:ASP:HB3	1:A:27:ASP:H	12	0.79

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,584)	1:A:27:ASP:HB2	1:A:27:ASP:H	14	0.79
(1,584)	1:A:27:ASP:HB3	1:A:27:ASP:H	14	0.79
(1,584)	1:A:27:ASP:HB2	1:A:27:ASP:H	20	0.79
(1,584)	1:A:27:ASP:HB3	1:A:27:ASP:H	20	0.79
(1,502)	1:A:34:GLU:HG2	1:A:34:GLU:H	7	0.79
(1,502)	1:A:34:GLU:HG3	1:A:34:GLU:H	7	0.79
(1,502)	1:A:34:GLU:HG2	1:A:34:GLU:H	16	0.79
(1,502)	1:A:34:GLU:HG3	1:A:34:GLU:H	16	0.79
(1,455)	1:A:76:ASP:HB2	1:A:76:ASP:H	5	0.79
(1,455)	1:A:76:ASP:HB2	1:A:76:ASP:H	5	0.79
(1,455)	1:A:76:ASP:HB3	1:A:76:ASP:H	5	0.79
(1,455)	1:A:76:ASP:HB3	1:A:76:ASP:H	5	0.79
(1,429)	1:A:69:ASN:HA	1:A:69:ASN:H	5	0.79
(1,429)	1:A:69:ASN:HA	1:A:69:ASN:H	6	0.79
(1,429)	1:A:69:ASN:HA	1:A:69:ASN:H	15	0.79
(1,150)	1:A:104:CYS:H	1:A:106:GLY:H	9	0.79
(2,45)	1:A:21:LYS:HB2	1:A:22:CYS:H	5	0.78
(2,45)	1:A:21:LYS:HB3	1:A:22:CYS:H	5	0.78
(2,45)	1:A:42:ARG:HB2	1:A:22:CYS:H	5	0.78
(2,45)	1:A:42:ARG:HB3	1:A:22:CYS:H	5	0.78
(2,45)	1:A:21:LYS:HB2	1:A:22:CYS:H	7	0.78
(2,45)	1:A:21:LYS:HB3	1:A:22:CYS:H	7	0.78
(2,45)	1:A:42:ARG:HB2	1:A:22:CYS:H	7	0.78
(2,45)	1:A:42:ARG:HB3	1:A:22:CYS:H	7	0.78
(2,45)	1:A:21:LYS:HB2	1:A:22:CYS:H	8	0.78
(2,45)	1:A:21:LYS:HB3	1:A:22:CYS:H	8	0.78
(2,45)	1:A:42:ARG:HB2	1:A:22:CYS:H	8	0.78
(2,45)	1:A:42:ARG:HB3	1:A:22:CYS:H	8	0.78
(2,357)	1:A:69:ASN:HA	1:A:69:ASN:HD21	11	0.78
(2,357)	1:A:70:ASP:HA	1:A:69:ASN:HD21	11	0.78
(2,354)	1:A:51:CYS:HA	1:A:69:ASN:H	1	0.78
(2,354)	1:A:68:GLU:HA	1:A:69:ASN:H	1	0.78
(1,97)	1:A:98:ILE:HD11	1:A:99:SER:H	18	0.78
(1,97)	1:A:98:ILE:HD12	1:A:99:SER:H	18	0.78
(1,97)	1:A:98:ILE:HD13	1:A:99:SER:H	18	0.78
(1,923)	1:A:8:PHE:HB2	1:A:16:VAL:HA	19	0.78
(1,824)	1:A:118:ASP:H	1:A:116:GLU:H	5	0.78
(1,824)	1:A:118:ASP:H	1:A:116:GLU:H	7	0.78
(1,824)	1:A:118:ASP:H	1:A:116:GLU:H	13	0.78
(1,770)	1:A:63:TRP:H	1:A:77:GLU:HG2	11	0.78
(1,770)	1:A:63:TRP:H	1:A:77:GLU:HG3	11	0.78
(1,746)	1:A:50:SER:H	1:A:49:ILE:HG12	5	0.78

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,746)	1:A:50:SER:H	1:A:49:ILE:HG13	5	0.78
(1,746)	1:A:50:SER:H	1:A:49:ILE:HG12	11	0.78
(1,746)	1:A:50:SER:H	1:A:49:ILE:HG13	11	0.78
(1,686)	1:A:74:GLY:H	1:A:69:ASN:HD22	3	0.78
(1,584)	1:A:27:ASP:HB2	1:A:27:ASP:H	5	0.78
(1,584)	1:A:27:ASP:HB3	1:A:27:ASP:H	5	0.78
(1,584)	1:A:27:ASP:HB2	1:A:27:ASP:H	6	0.78
(1,584)	1:A:27:ASP:HB3	1:A:27:ASP:H	6	0.78
(1,429)	1:A:69:ASN:HA	1:A:69:ASN:H	2	0.78
(1,150)	1:A:104:CYS:H	1:A:106:GLY:H	1	0.78
(1,150)	1:A:104:CYS:H	1:A:106:GLY:H	8	0.78
(1,150)	1:A:104:CYS:H	1:A:106:GLY:H	20	0.78
(2,72)	1:A:110:CYS:HB2	1:A:113:GLY:H	5	0.77
(2,72)	1:A:110:CYS:HB3	1:A:113:GLY:H	5	0.77
(2,72)	1:A:112:ASP:HB2	1:A:113:GLY:H	5	0.77
(2,72)	1:A:112:ASP:HB3	1:A:113:GLY:H	5	0.77
(2,45)	1:A:21:LYS:HB2	1:A:22:CYS:H	1	0.77
(2,45)	1:A:21:LYS:HB3	1:A:22:CYS:H	1	0.77
(2,45)	1:A:42:ARG:HB2	1:A:22:CYS:H	1	0.77
(2,45)	1:A:42:ARG:HB3	1:A:22:CYS:H	1	0.77
(2,357)	1:A:69:ASN:HA	1:A:69:ASN:HD21	3	0.77
(2,357)	1:A:70:ASP:HA	1:A:69:ASN:HD21	3	0.77
(2,354)	1:A:51:CYS:HA	1:A:69:ASN:H	8	0.77
(2,354)	1:A:68:GLU:HA	1:A:69:ASN:H	8	0.77
(2,215)	1:A:6:SER:H	1:A:5:GLU:H	14	0.77
(2,215)	1:A:7:ASP:H	1:A:5:GLU:H	14	0.77
(2,152)	1:A:52:GLY:H	1:A:53:ALA:H	8	0.77
(2,152)	1:A:54:HIS:H	1:A:53:ALA:H	8	0.77
(1,923)	1:A:8:PHE:HB2	1:A:16:VAL:HA	3	0.77
(1,877)	1:A:22:CYS:HA	1:A:44:CYS:H	1	0.77
(1,877)	1:A:22:CYS:HA	1:A:44:CYS:H	3	0.77
(1,799)	1:A:85:CYS:HA	1:A:97:CYS:H	20	0.77
(1,770)	1:A:63:TRP:H	1:A:77:GLU:HG2	20	0.77
(1,770)	1:A:63:TRP:H	1:A:77:GLU:HG3	20	0.77
(1,584)	1:A:27:ASP:HB2	1:A:27:ASP:H	13	0.77
(1,584)	1:A:27:ASP:HB3	1:A:27:ASP:H	13	0.77
(1,447)	1:A:71:CYS:HA	1:A:74:GLY:H	14	0.77
(1,429)	1:A:69:ASN:HA	1:A:69:ASN:H	17	0.77
(1,150)	1:A:104:CYS:H	1:A:106:GLY:H	11	0.77
(2,45)	1:A:21:LYS:HB2	1:A:22:CYS:H	9	0.76
(2,45)	1:A:21:LYS:HB3	1:A:22:CYS:H	9	0.76
(2,45)	1:A:42:ARG:HB2	1:A:22:CYS:H	9	0.76

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,45)	1:A:42:ARG:HB3	1:A:22:CYS:H	9	0.76
(2,45)	1:A:21:LYS:HB2	1:A:22:CYS:H	11	0.76
(2,45)	1:A:21:LYS:HB3	1:A:22:CYS:H	11	0.76
(2,45)	1:A:42:ARG:HB2	1:A:22:CYS:H	11	0.76
(2,45)	1:A:42:ARG:HB3	1:A:22:CYS:H	11	0.76
(2,45)	1:A:21:LYS:HB2	1:A:22:CYS:H	16	0.76
(2,45)	1:A:21:LYS:HB3	1:A:22:CYS:H	16	0.76
(2,45)	1:A:42:ARG:HB2	1:A:22:CYS:H	16	0.76
(2,45)	1:A:42:ARG:HB3	1:A:22:CYS:H	16	0.76
(2,354)	1:A:51:CYS:HA	1:A:69:ASN:H	2	0.76
(2,354)	1:A:68:GLU:HA	1:A:69:ASN:H	2	0.76
(2,222)	1:A:24:GLY:HA2	1:A:45:ARG:H	3	0.76
(2,222)	1:A:24:GLY:HA3	1:A:45:ARG:H	3	0.76
(2,222)	1:A:45:ARG:HA	1:A:45:ARG:H	3	0.76
(2,222)	1:A:24:GLY:HA2	1:A:45:ARG:H	8	0.76
(2,222)	1:A:24:GLY:HA3	1:A:45:ARG:H	8	0.76
(2,222)	1:A:45:ARG:HA	1:A:45:ARG:H	8	0.76
(1,923)	1:A:8:PHE:HB2	1:A:16:VAL:HA	18	0.76
(1,787)	1:A:73:SER:H	1:A:76:ASP:H	6	0.76
(1,770)	1:A:63:TRP:H	1:A:77:GLU:HG2	16	0.76
(1,770)	1:A:63:TRP:H	1:A:77:GLU:HG3	16	0.76
(1,692)	1:A:8:PHE:HB2	1:A:8:PHE:H	2	0.76
(1,692)	1:A:8:PHE:HB3	1:A:8:PHE:H	2	0.76
(1,692)	1:A:8:PHE:HB2	1:A:8:PHE:H	8	0.76
(1,692)	1:A:8:PHE:HB3	1:A:8:PHE:H	8	0.76
(1,692)	1:A:8:PHE:HB2	1:A:8:PHE:H	11	0.76
(1,692)	1:A:8:PHE:HB3	1:A:8:PHE:H	11	0.76
(1,463)	1:A:71:CYS:HB2	1:A:78:GLU:H	10	0.76
(1,463)	1:A:71:CYS:HB3	1:A:78:GLU:H	10	0.76
(1,455)	1:A:76:ASP:HB2	1:A:76:ASP:H	2	0.76
(1,455)	1:A:76:ASP:HB2	1:A:76:ASP:H	2	0.76
(1,455)	1:A:76:ASP:HB3	1:A:76:ASP:H	2	0.76
(1,455)	1:A:76:ASP:HB3	1:A:76:ASP:H	2	0.76
(1,150)	1:A:104:CYS:H	1:A:106:GLY:H	15	0.76
(2,45)	1:A:21:LYS:HB2	1:A:22:CYS:H	13	0.75
(2,45)	1:A:21:LYS:HB3	1:A:22:CYS:H	13	0.75
(2,45)	1:A:42:ARG:HB2	1:A:22:CYS:H	13	0.75
(2,45)	1:A:42:ARG:HB3	1:A:22:CYS:H	13	0.75
(2,363)	1:A:49:ILE:HB	1:A:49:ILE:H	14	0.75
(2,363)	1:A:59:ILE:HB	1:A:49:ILE:H	14	0.75
(2,357)	1:A:69:ASN:HA	1:A:69:ASN:HD21	16	0.75
(2,357)	1:A:70:ASP:HA	1:A:69:ASN:HD21	16	0.75

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,330)	1:A:92:CYS:HA	1:A:93:SER:H	6	0.75
(2,330)	1:A:111:SER:HG	1:A:93:SER:H	6	0.75
(2,330)	1:A:114:SER:HG	1:A:93:SER:H	6	0.75
(2,222)	1:A:24:GLY:HA2	1:A:45:ARG:H	7	0.75
(2,222)	1:A:24:GLY:HA3	1:A:45:ARG:H	7	0.75
(2,222)	1:A:45:ARG:HA	1:A:45:ARG:H	7	0.75
(2,222)	1:A:24:GLY:HA2	1:A:45:ARG:H	10	0.75
(2,222)	1:A:24:GLY:HA3	1:A:45:ARG:H	10	0.75
(2,222)	1:A:45:ARG:HA	1:A:45:ARG:H	10	0.75
(2,131)	1:A:25:ASP:HB2	1:A:27:ASP:H	8	0.75
(2,131)	1:A:25:ASP:HB3	1:A:27:ASP:H	8	0.75
(2,131)	1:A:33:ASP:HB2	1:A:27:ASP:H	8	0.75
(2,131)	1:A:34:GLU:HB3	1:A:27:ASP:H	8	0.75
(1,700)	1:A:69:ASN:HB2	1:A:69:ASN:H	14	0.75
(1,700)	1:A:69:ASN:HB3	1:A:69:ASN:H	14	0.75
(1,692)	1:A:8:PHE:HB2	1:A:8:PHE:H	13	0.75
(1,692)	1:A:8:PHE:HB3	1:A:8:PHE:H	13	0.75
(1,692)	1:A:8:PHE:HB2	1:A:8:PHE:H	17	0.75
(1,692)	1:A:8:PHE:HB3	1:A:8:PHE:H	17	0.75
(1,686)	1:A:74:GLY:H	1:A:69:ASN:HD22	1	0.75
(1,447)	1:A:71:CYS:HA	1:A:74:GLY:H	2	0.75
(1,150)	1:A:104:CYS:H	1:A:106:GLY:H	14	0.75
(2,72)	1:A:110:CYS:HB2	1:A:113:GLY:H	17	0.74
(2,72)	1:A:110:CYS:HB3	1:A:113:GLY:H	17	0.74
(2,72)	1:A:112:ASP:HB2	1:A:113:GLY:H	17	0.74
(2,72)	1:A:112:ASP:HB3	1:A:113:GLY:H	17	0.74
(2,363)	1:A:49:ILE:HB	1:A:49:ILE:H	20	0.74
(2,363)	1:A:59:ILE:HB	1:A:49:ILE:H	20	0.74
(2,354)	1:A:51:CYS:HA	1:A:69:ASN:H	10	0.74
(2,354)	1:A:68:GLU:HA	1:A:69:ASN:H	10	0.74
(2,321)	1:A:64:ARG:HB2	1:A:67:GLY:H	18	0.74
(2,321)	1:A:64:ARG:HB3	1:A:67:GLY:H	18	0.74
(2,321)	1:A:64:ARG:HG2	1:A:67:GLY:H	18	0.74
(2,321)	1:A:64:ARG:HG3	1:A:67:GLY:H	18	0.74
(2,321)	1:A:68:GLU:HB2	1:A:67:GLY:H	18	0.74
(2,321)	1:A:68:GLU:HB3	1:A:67:GLY:H	18	0.74
(2,275)	1:A:43:THR:HG1	1:A:44:CYS:H	10	0.74
(2,275)	1:A:43:THR:HG1	1:A:44:CYS:H	10	0.74
(2,275)	1:A:43:THR:HG21	1:A:44:CYS:H	10	0.74
(2,275)	1:A:43:THR:HG21	1:A:44:CYS:H	10	0.74
(2,275)	1:A:43:THR:HG22	1:A:44:CYS:H	10	0.74
(2,275)	1:A:43:THR:HG22	1:A:44:CYS:H	10	0.74

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,275)	1:A:43:THR:HG23	1:A:44:CYS:H	10	0.74
(2,275)	1:A:43:THR:HG23	1:A:44:CYS:H	10	0.74
(2,275)	1:A:56:THR:HG21	1:A:44:CYS:H	10	0.74
(2,275)	1:A:56:THR:HG22	1:A:44:CYS:H	10	0.74
(2,275)	1:A:56:THR:HG23	1:A:44:CYS:H	10	0.74
(1,898)	1:A:57:GLN:HE22	1:A:71:CYS:H	1	0.74
(1,849)	1:A:33:ASP:H	1:A:11:ASN:H	8	0.74
(1,824)	1:A:118:ASP:H	1:A:116:GLU:H	3	0.74
(1,824)	1:A:118:ASP:H	1:A:116:GLU:H	18	0.74
(1,824)	1:A:118:ASP:H	1:A:116:GLU:H	20	0.74
(1,799)	1:A:85:CYS:HA	1:A:97:CYS:H	8	0.74
(1,799)	1:A:85:CYS:HA	1:A:97:CYS:H	10	0.74
(1,447)	1:A:71:CYS:HA	1:A:74:GLY:H	13	0.74
(1,252)	1:A:82:ASN:HB2	1:A:83:ILE:H	1	0.74
(1,252)	1:A:82:ASN:HB2	1:A:83:ILE:H	1	0.74
(1,252)	1:A:82:ASN:HB3	1:A:83:ILE:H	1	0.74
(1,252)	1:A:82:ASN:HB3	1:A:83:ILE:H	1	0.74
(1,252)	1:A:82:ASN:HB2	1:A:83:ILE:H	12	0.74
(1,252)	1:A:82:ASN:HB2	1:A:83:ILE:H	12	0.74
(1,252)	1:A:82:ASN:HB3	1:A:83:ILE:H	12	0.74
(1,252)	1:A:82:ASN:HB3	1:A:83:ILE:H	12	0.74
(1,150)	1:A:104:CYS:H	1:A:106:GLY:H	13	0.74
(2,75)	1:A:107:GLN:HA	1:A:108:ASP:H	1	0.73
(2,75)	1:A:108:ASP:HA	1:A:108:ASP:H	1	0.73
(2,75)	1:A:109:ASP:HA	1:A:108:ASP:H	1	0.73
(2,75)	1:A:107:GLN:HA	1:A:108:ASP:H	9	0.73
(2,75)	1:A:108:ASP:HA	1:A:108:ASP:H	9	0.73
(2,75)	1:A:109:ASP:HA	1:A:108:ASP:H	9	0.73
(2,363)	1:A:49:ILE:HB	1:A:49:ILE:H	3	0.73
(2,363)	1:A:59:ILE:HB	1:A:49:ILE:H	3	0.73
(2,363)	1:A:49:ILE:HB	1:A:49:ILE:H	16	0.73
(2,363)	1:A:59:ILE:HB	1:A:49:ILE:H	16	0.73
(2,363)	1:A:49:ILE:HB	1:A:49:ILE:H	19	0.73
(2,363)	1:A:59:ILE:HB	1:A:49:ILE:H	19	0.73
(2,222)	1:A:24:GLY:HA2	1:A:45:ARG:H	2	0.73
(2,222)	1:A:24:GLY:HA3	1:A:45:ARG:H	2	0.73
(2,222)	1:A:45:ARG:HA	1:A:45:ARG:H	2	0.73
(2,222)	1:A:24:GLY:HA2	1:A:45:ARG:H	4	0.73
(2,222)	1:A:24:GLY:HA3	1:A:45:ARG:H	4	0.73
(2,222)	1:A:45:ARG:HA	1:A:45:ARG:H	4	0.73
(2,222)	1:A:24:GLY:HA2	1:A:45:ARG:H	13	0.73
(2,222)	1:A:24:GLY:HA3	1:A:45:ARG:H	13	0.73

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,222)	1:A:45:ARG:HA	1:A:45:ARG:H	13	0.73
(2,215)	1:A:6:SER:H	1:A:5:GLU:H	12	0.73
(2,215)	1:A:7:ASP:H	1:A:5:GLU:H	12	0.73
(2,207)	1:A:79:ASN:HB2	1:A:79:ASN:HD22	20	0.73
(2,207)	1:A:97:CYS:HB2	1:A:79:ASN:HD22	20	0.73
(2,131)	1:A:25:ASP:HB2	1:A:27:ASP:H	2	0.73
(2,131)	1:A:25:ASP:HB3	1:A:27:ASP:H	2	0.73
(2,131)	1:A:33:ASP:HB2	1:A:27:ASP:H	2	0.73
(2,131)	1:A:34:GLU:HB3	1:A:27:ASP:H	2	0.73
(2,131)	1:A:25:ASP:HB2	1:A:27:ASP:H	19	0.73
(2,131)	1:A:25:ASP:HB3	1:A:27:ASP:H	19	0.73
(2,131)	1:A:33:ASP:HB2	1:A:27:ASP:H	19	0.73
(2,131)	1:A:34:GLU:HB3	1:A:27:ASP:H	19	0.73
(1,923)	1:A:8:PHE:HB2	1:A:16:VAL:HA	8	0.73
(1,898)	1:A:57:GLN:HE22	1:A:71:CYS:H	9	0.73
(1,824)	1:A:118:ASP:H	1:A:116:GLU:H	11	0.73
(1,824)	1:A:118:ASP:H	1:A:116:GLU:H	14	0.73
(1,824)	1:A:118:ASP:H	1:A:116:GLU:H	16	0.73
(1,770)	1:A:63:TRP:H	1:A:77:GLU:HG2	5	0.73
(1,770)	1:A:63:TRP:H	1:A:77:GLU:HG3	5	0.73
(1,770)	1:A:63:TRP:H	1:A:77:GLU:HG2	9	0.73
(1,770)	1:A:63:TRP:H	1:A:77:GLU:HG3	9	0.73
(1,700)	1:A:69:ASN:HB2	1:A:69:ASN:H	18	0.73
(1,700)	1:A:69:ASN:HB3	1:A:69:ASN:H	18	0.73
(1,150)	1:A:104:CYS:H	1:A:106:GLY:H	19	0.73
(2,98)	1:A:28:CYS:HB2	1:A:11:ASN:H	6	0.72
(2,98)	1:A:28:CYS:HB3	1:A:11:ASN:H	6	0.72
(2,98)	1:A:32:SER:HB2	1:A:11:ASN:H	6	0.72
(2,98)	1:A:32:SER:HB3	1:A:11:ASN:H	6	0.72
(2,75)	1:A:107:GLN:HA	1:A:108:ASP:H	8	0.72
(2,75)	1:A:108:ASP:HA	1:A:108:ASP:H	8	0.72
(2,75)	1:A:109:ASP:HA	1:A:108:ASP:H	8	0.72
(2,75)	1:A:107:GLN:HA	1:A:108:ASP:H	14	0.72
(2,75)	1:A:108:ASP:HA	1:A:108:ASP:H	14	0.72
(2,75)	1:A:109:ASP:HA	1:A:108:ASP:H	14	0.72
(2,377)	1:A:33:ASP:HB2	1:A:33:ASP:H	5	0.72
(2,377)	1:A:33:ASP:HB3	1:A:33:ASP:H	5	0.72
(2,377)	1:A:34:GLU:HB2	1:A:33:ASP:H	5	0.72
(2,377)	1:A:34:GLU:HB3	1:A:33:ASP:H	5	0.72
(2,377)	1:A:33:ASP:HB2	1:A:33:ASP:H	6	0.72
(2,377)	1:A:33:ASP:HB3	1:A:33:ASP:H	6	0.72
(2,377)	1:A:34:GLU:HB2	1:A:33:ASP:H	6	0.72

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,377)	1:A:34:GLU:HB3	1:A:33:ASP:H	6	0.72
(2,357)	1:A:69:ASN:HA	1:A:69:ASN:HD21	17	0.72
(2,357)	1:A:70:ASP:HA	1:A:69:ASN:HD21	17	0.72
(2,354)	1:A:51:CYS:HA	1:A:69:ASN:H	15	0.72
(2,354)	1:A:68:GLU:HA	1:A:69:ASN:H	15	0.72
(2,321)	1:A:64:ARG:HB2	1:A:67:GLY:H	10	0.72
(2,321)	1:A:64:ARG:HB3	1:A:67:GLY:H	10	0.72
(2,321)	1:A:64:ARG:HG2	1:A:67:GLY:H	10	0.72
(2,321)	1:A:64:ARG:HG3	1:A:67:GLY:H	10	0.72
(2,321)	1:A:68:GLU:HB2	1:A:67:GLY:H	10	0.72
(2,321)	1:A:68:GLU:HB3	1:A:67:GLY:H	10	0.72
(2,321)	1:A:64:ARG:HB2	1:A:67:GLY:H	14	0.72
(2,321)	1:A:64:ARG:HB3	1:A:67:GLY:H	14	0.72
(2,321)	1:A:64:ARG:HG2	1:A:67:GLY:H	14	0.72
(2,321)	1:A:64:ARG:HG3	1:A:67:GLY:H	14	0.72
(2,321)	1:A:68:GLU:HB2	1:A:67:GLY:H	14	0.72
(2,321)	1:A:68:GLU:HB3	1:A:67:GLY:H	14	0.72
(2,152)	1:A:52:GLY:H	1:A:53:ALA:H	11	0.72
(2,152)	1:A:54:HIS:H	1:A:53:ALA:H	11	0.72
(2,136)	1:A:12:ASN:HB2	1:A:14:GLN:H	1	0.72
(2,136)	1:A:12:ASN:HB3	1:A:14:GLN:H	1	0.72
(2,136)	1:A:13:GLY:HA2	1:A:14:GLN:H	1	0.72
(2,136)	1:A:13:GLY:HA3	1:A:14:GLN:H	1	0.72
(2,136)	1:A:12:ASN:HB2	1:A:14:GLN:H	2	0.72
(2,136)	1:A:12:ASN:HB3	1:A:14:GLN:H	2	0.72
(2,136)	1:A:13:GLY:HA2	1:A:14:GLN:H	2	0.72
(2,136)	1:A:13:GLY:HA3	1:A:14:GLN:H	2	0.72
(2,136)	1:A:12:ASN:HB2	1:A:14:GLN:H	17	0.72
(2,136)	1:A:12:ASN:HB3	1:A:14:GLN:H	17	0.72
(2,136)	1:A:13:GLY:HA2	1:A:14:GLN:H	17	0.72
(2,136)	1:A:13:GLY:HA3	1:A:14:GLN:H	17	0.72
(2,136)	1:A:12:ASN:HB2	1:A:14:GLN:H	19	0.72
(2,136)	1:A:12:ASN:HB3	1:A:14:GLN:H	19	0.72
(2,136)	1:A:13:GLY:HA2	1:A:14:GLN:H	19	0.72
(2,136)	1:A:13:GLY:HA3	1:A:14:GLN:H	19	0.72
(2,131)	1:A:25:ASP:HB2	1:A:27:ASP:H	3	0.72
(2,131)	1:A:25:ASP:HB3	1:A:27:ASP:H	3	0.72
(2,131)	1:A:33:ASP:HB2	1:A:27:ASP:H	3	0.72
(2,131)	1:A:34:GLU:HB3	1:A:27:ASP:H	3	0.72
(1,740)	1:A:35:SER:H	1:A:56:THR:HG1	3	0.72
(1,740)	1:A:35:SER:H	1:A:56:THR:HG21	3	0.72
(1,740)	1:A:35:SER:H	1:A:56:THR:HG22	3	0.72

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,740)	1:A:35:SER:H	1:A:56:THR:HG23	3	0.72
(1,740)	1:A:35:SER:H	1:A:56:THR:HG1	17	0.72
(1,740)	1:A:35:SER:H	1:A:56:THR:HG21	17	0.72
(1,740)	1:A:35:SER:H	1:A:56:THR:HG22	17	0.72
(1,740)	1:A:35:SER:H	1:A:56:THR:HG23	17	0.72
(1,713)	1:A:14:GLN:HA	1:A:12:ASN:H	17	0.72
(1,696)	1:A:44:CYS:HB2	1:A:34:GLU:H	10	0.72
(1,696)	1:A:44:CYS:HB3	1:A:34:GLU:H	10	0.72
(1,692)	1:A:8:PHE:HB2	1:A:8:PHE:H	7	0.72
(1,692)	1:A:8:PHE:HB3	1:A:8:PHE:H	7	0.72
(1,692)	1:A:8:PHE:HB2	1:A:8:PHE:H	10	0.72
(1,692)	1:A:8:PHE:HB3	1:A:8:PHE:H	10	0.72
(1,541)	1:A:115:ASP:HB2	1:A:116:GLU:H	15	0.72
(1,541)	1:A:115:ASP:HB3	1:A:116:GLU:H	15	0.72
(1,502)	1:A:34:GLU:HG2	1:A:34:GLU:H	1	0.72
(1,502)	1:A:34:GLU:HG3	1:A:34:GLU:H	1	0.72
(1,502)	1:A:34:GLU:HG2	1:A:34:GLU:H	11	0.72
(1,502)	1:A:34:GLU:HG3	1:A:34:GLU:H	11	0.72
(1,455)	1:A:76:ASP:HB2	1:A:76:ASP:H	16	0.72
(1,455)	1:A:76:ASP:HB2	1:A:76:ASP:H	16	0.72
(1,455)	1:A:76:ASP:HB3	1:A:76:ASP:H	16	0.72
(1,455)	1:A:76:ASP:HB3	1:A:76:ASP:H	16	0.72
(1,252)	1:A:82:ASN:HB2	1:A:83:ILE:H	9	0.72
(1,252)	1:A:82:ASN:HB2	1:A:83:ILE:H	9	0.72
(1,252)	1:A:82:ASN:HB3	1:A:83:ILE:H	9	0.72
(1,252)	1:A:82:ASN:HB3	1:A:83:ILE:H	9	0.72
(1,252)	1:A:82:ASN:HB2	1:A:83:ILE:H	17	0.72
(1,252)	1:A:82:ASN:HB2	1:A:83:ILE:H	17	0.72
(1,252)	1:A:82:ASN:HB3	1:A:83:ILE:H	17	0.72
(1,252)	1:A:82:ASN:HB3	1:A:83:ILE:H	17	0.72
(1,150)	1:A:104:CYS:H	1:A:106:GLY:H	17	0.72
(2,75)	1:A:107:GLN:HA	1:A:108:ASP:H	12	0.71
(2,75)	1:A:108:ASP:HA	1:A:108:ASP:H	12	0.71
(2,75)	1:A:109:ASP:HA	1:A:108:ASP:H	12	0.71
(2,75)	1:A:107:GLN:HA	1:A:108:ASP:H	15	0.71
(2,75)	1:A:108:ASP:HA	1:A:108:ASP:H	15	0.71
(2,75)	1:A:109:ASP:HA	1:A:108:ASP:H	15	0.71
(2,75)	1:A:107:GLN:HA	1:A:108:ASP:H	18	0.71
(2,75)	1:A:108:ASP:HA	1:A:108:ASP:H	18	0.71
(2,75)	1:A:109:ASP:HA	1:A:108:ASP:H	18	0.71
(2,363)	1:A:49:ILE:HB	1:A:49:ILE:H	13	0.71
(2,363)	1:A:59:ILE:HB	1:A:49:ILE:H	13	0.71

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,357)	1:A:69:ASN:HA	1:A:69:ASN:HD21	1	0.71
(2,357)	1:A:70:ASP:HA	1:A:69:ASN:HD21	1	0.71
(2,207)	1:A:79:ASN:HB2	1:A:79:ASN:HD22	16	0.71
(2,207)	1:A:97:CYS:HB2	1:A:79:ASN:HD22	16	0.71
(2,152)	1:A:52:GLY:H	1:A:53:ALA:H	18	0.71
(2,152)	1:A:54:HIS:H	1:A:53:ALA:H	18	0.71
(2,136)	1:A:12:ASN:HB2	1:A:14:GLN:H	9	0.71
(2,136)	1:A:12:ASN:HB3	1:A:14:GLN:H	9	0.71
(2,136)	1:A:13:GLY:HA2	1:A:14:GLN:H	9	0.71
(2,136)	1:A:13:GLY:HA3	1:A:14:GLN:H	9	0.71
(2,131)	1:A:25:ASP:HB2	1:A:27:ASP:H	9	0.71
(2,131)	1:A:25:ASP:HB3	1:A:27:ASP:H	9	0.71
(2,131)	1:A:33:ASP:HB2	1:A:27:ASP:H	9	0.71
(2,131)	1:A:34:GLU:HB3	1:A:27:ASP:H	9	0.71
(1,923)	1:A:8:PHE:HB2	1:A:16:VAL:HA	17	0.71
(1,898)	1:A:57:GLN:HE22	1:A:71:CYS:H	6	0.71
(1,898)	1:A:57:GLN:HE22	1:A:71:CYS:H	16	0.71
(1,890)	1:A:81:GLY:HA2	1:A:63:TRP:HE1	8	0.71
(1,890)	1:A:81:GLY:HA2	1:A:63:TRP:HE1	8	0.71
(1,890)	1:A:81:GLY:HA3	1:A:63:TRP:HE1	8	0.71
(1,890)	1:A:81:GLY:HA3	1:A:63:TRP:HE1	8	0.71
(1,877)	1:A:22:CYS:HA	1:A:44:CYS:H	13	0.71
(1,784)	1:A:71:CYS:HB2	1:A:76:ASP:H	6	0.71
(1,784)	1:A:71:CYS:HB3	1:A:76:ASP:H	6	0.71
(1,708)	1:A:44:CYS:HB2	1:A:45:ARG:H	5	0.71
(1,708)	1:A:44:CYS:HB3	1:A:45:ARG:H	5	0.71
(1,700)	1:A:69:ASN:HB2	1:A:69:ASN:H	4	0.71
(1,700)	1:A:69:ASN:HB3	1:A:69:ASN:H	4	0.71
(1,700)	1:A:69:ASN:HB2	1:A:69:ASN:H	6	0.71
(1,700)	1:A:69:ASN:HB3	1:A:69:ASN:H	6	0.71
(1,692)	1:A:8:PHE:HB2	1:A:8:PHE:H	3	0.71
(1,692)	1:A:8:PHE:HB3	1:A:8:PHE:H	3	0.71
(1,692)	1:A:8:PHE:HB2	1:A:8:PHE:H	6	0.71
(1,692)	1:A:8:PHE:HB3	1:A:8:PHE:H	6	0.71
(1,692)	1:A:8:PHE:HB2	1:A:8:PHE:H	16	0.71
(1,692)	1:A:8:PHE:HB3	1:A:8:PHE:H	16	0.71
(1,502)	1:A:34:GLU:HG2	1:A:34:GLU:H	2	0.71
(1,502)	1:A:34:GLU:HG3	1:A:34:GLU:H	2	0.71
(1,492)	1:A:22:CYS:H	1:A:24:GLY:H	19	0.71
(1,491)	1:A:22:CYS:H	1:A:24:GLY:H	19	0.71
(1,459)	1:A:70:ASP:HA	1:A:76:ASP:H	6	0.71
(1,391)	1:A:54:HIS:HA	1:A:53:ALA:H	12	0.71

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,252)	1:A:82:ASN:HB2	1:A:83:ILE:H	5	0.71
(1,252)	1:A:82:ASN:HB2	1:A:83:ILE:H	5	0.71
(1,252)	1:A:82:ASN:HB3	1:A:83:ILE:H	5	0.71
(1,252)	1:A:82:ASN:HB3	1:A:83:ILE:H	5	0.71
(1,252)	1:A:82:ASN:HB2	1:A:83:ILE:H	7	0.71
(1,252)	1:A:82:ASN:HB2	1:A:83:ILE:H	7	0.71
(1,252)	1:A:82:ASN:HB3	1:A:83:ILE:H	7	0.71
(1,252)	1:A:82:ASN:HB3	1:A:83:ILE:H	7	0.71
(1,252)	1:A:82:ASN:HB2	1:A:83:ILE:H	19	0.71
(1,252)	1:A:82:ASN:HB2	1:A:83:ILE:H	19	0.71
(1,252)	1:A:82:ASN:HB3	1:A:83:ILE:H	19	0.71
(1,252)	1:A:82:ASN:HB3	1:A:83:ILE:H	19	0.71
(1,150)	1:A:104:CYS:H	1:A:106:GLY:H	12	0.71
(2,75)	1:A:107:GLN:HA	1:A:108:ASP:H	19	0.7
(2,75)	1:A:108:ASP:HA	1:A:108:ASP:H	19	0.7
(2,75)	1:A:109:ASP:HA	1:A:108:ASP:H	19	0.7
(2,64)	1:A:45:ARG:HB2	1:A:46:ILE:H	6	0.7
(2,64)	1:A:45:ARG:HB3	1:A:46:ILE:H	6	0.7
(2,64)	1:A:46:ILE:HG12	1:A:46:ILE:H	6	0.7
(2,64)	1:A:46:ILE:HG13	1:A:46:ILE:H	6	0.7
(2,64)	1:A:45:ARG:HB2	1:A:46:ILE:H	8	0.7
(2,64)	1:A:45:ARG:HB3	1:A:46:ILE:H	8	0.7
(2,64)	1:A:46:ILE:HG12	1:A:46:ILE:H	8	0.7
(2,64)	1:A:46:ILE:HG13	1:A:46:ILE:H	8	0.7
(2,45)	1:A:21:LYS:HB2	1:A:22:CYS:H	4	0.7
(2,45)	1:A:21:LYS:HB3	1:A:22:CYS:H	4	0.7
(2,45)	1:A:42:ARG:HB2	1:A:22:CYS:H	4	0.7
(2,45)	1:A:42:ARG:HB3	1:A:22:CYS:H	4	0.7
(2,45)	1:A:21:LYS:HB2	1:A:22:CYS:H	6	0.7
(2,45)	1:A:21:LYS:HB3	1:A:22:CYS:H	6	0.7
(2,45)	1:A:42:ARG:HB2	1:A:22:CYS:H	6	0.7
(2,45)	1:A:42:ARG:HB3	1:A:22:CYS:H	6	0.7
(2,45)	1:A:21:LYS:HB2	1:A:22:CYS:H	10	0.7
(2,45)	1:A:21:LYS:HB3	1:A:22:CYS:H	10	0.7
(2,45)	1:A:42:ARG:HB2	1:A:22:CYS:H	10	0.7
(2,45)	1:A:42:ARG:HB3	1:A:22:CYS:H	10	0.7
(2,363)	1:A:49:ILE:HB	1:A:49:ILE:H	7	0.7
(2,363)	1:A:59:ILE:HB	1:A:49:ILE:H	7	0.7
(2,363)	1:A:49:ILE:HB	1:A:49:ILE:H	9	0.7
(2,363)	1:A:59:ILE:HB	1:A:49:ILE:H	9	0.7
(2,330)	1:A:92:CYS:HA	1:A:93:SER:H	4	0.7
(2,330)	1:A:111:SER:HG	1:A:93:SER:H	4	0.7

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,330)	1:A:114:SER:HG	1:A:93:SER:H	4	0.7
(2,222)	1:A:24:GLY:HA2	1:A:45:ARG:H	14	0.7
(2,222)	1:A:24:GLY:HA3	1:A:45:ARG:H	14	0.7
(2,222)	1:A:45:ARG:HA	1:A:45:ARG:H	14	0.7
(2,215)	1:A:6:SER:H	1:A:5:GLU:H	15	0.7
(2,215)	1:A:7:ASP:H	1:A:5:GLU:H	15	0.7
(2,152)	1:A:52:GLY:H	1:A:53:ALA:H	10	0.7
(2,152)	1:A:54:HIS:H	1:A:53:ALA:H	10	0.7
(2,136)	1:A:12:ASN:HB2	1:A:14:GLN:H	3	0.7
(2,136)	1:A:12:ASN:HB3	1:A:14:GLN:H	3	0.7
(2,136)	1:A:13:GLY:HA2	1:A:14:GLN:H	3	0.7
(2,136)	1:A:13:GLY:HA3	1:A:14:GLN:H	3	0.7
(2,136)	1:A:12:ASN:HB2	1:A:14:GLN:H	6	0.7
(2,136)	1:A:12:ASN:HB3	1:A:14:GLN:H	6	0.7
(2,136)	1:A:13:GLY:HA2	1:A:14:GLN:H	6	0.7
(2,136)	1:A:13:GLY:HA3	1:A:14:GLN:H	6	0.7
(2,136)	1:A:12:ASN:HB2	1:A:14:GLN:H	7	0.7
(2,136)	1:A:12:ASN:HB3	1:A:14:GLN:H	7	0.7
(2,136)	1:A:13:GLY:HA2	1:A:14:GLN:H	7	0.7
(2,136)	1:A:13:GLY:HA3	1:A:14:GLN:H	7	0.7
(2,136)	1:A:12:ASN:HB2	1:A:14:GLN:H	10	0.7
(2,136)	1:A:12:ASN:HB3	1:A:14:GLN:H	10	0.7
(2,136)	1:A:13:GLY:HA2	1:A:14:GLN:H	10	0.7
(2,136)	1:A:13:GLY:HA3	1:A:14:GLN:H	10	0.7
(2,136)	1:A:12:ASN:HB2	1:A:14:GLN:H	16	0.7
(2,136)	1:A:12:ASN:HB3	1:A:14:GLN:H	16	0.7
(2,136)	1:A:13:GLY:HA2	1:A:14:GLN:H	16	0.7
(2,136)	1:A:13:GLY:HA3	1:A:14:GLN:H	16	0.7
(2,131)	1:A:25:ASP:HB2	1:A:27:ASP:H	17	0.7
(2,131)	1:A:25:ASP:HB3	1:A:27:ASP:H	17	0.7
(2,131)	1:A:33:ASP:HB2	1:A:27:ASP:H	17	0.7
(2,131)	1:A:34:GLU:HB3	1:A:27:ASP:H	17	0.7
(1,877)	1:A:22:CYS:HA	1:A:44:CYS:H	7	0.7
(1,824)	1:A:118:ASP:H	1:A:116:GLU:H	12	0.7
(1,721)	1:A:21:LYS:HG2	1:A:22:CYS:H	10	0.7
(1,721)	1:A:21:LYS:HG3	1:A:22:CYS:H	10	0.7
(1,721)	1:A:21:LYS:HG2	1:A:22:CYS:H	11	0.7
(1,721)	1:A:21:LYS:HG3	1:A:22:CYS:H	11	0.7
(1,700)	1:A:69:ASN:HB2	1:A:69:ASN:H	10	0.7
(1,700)	1:A:69:ASN:HB3	1:A:69:ASN:H	10	0.7
(1,700)	1:A:69:ASN:HB2	1:A:69:ASN:H	13	0.7
(1,700)	1:A:69:ASN:HB3	1:A:69:ASN:H	13	0.7

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,700)	1:A:69:ASN:HB2	1:A:69:ASN:H	20	0.7
(1,700)	1:A:69:ASN:HB3	1:A:69:ASN:H	20	0.7
(1,686)	1:A:74:GLY:H	1:A:69:ASN:HD22	4	0.7
(1,541)	1:A:115:ASP:HB2	1:A:116:GLU:H	14	0.7
(1,541)	1:A:115:ASP:HB3	1:A:116:GLU:H	14	0.7
(1,492)	1:A:22:CYS:H	1:A:24:GLY:H	9	0.7
(1,491)	1:A:22:CYS:H	1:A:24:GLY:H	9	0.7
(1,436)	1:A:73:SER:H	1:A:72:ASP:H	8	0.7
(1,391)	1:A:54:HIS:HA	1:A:53:ALA:H	14	0.7
(1,252)	1:A:82:ASN:HB2	1:A:83:ILE:H	13	0.7
(1,252)	1:A:82:ASN:HB2	1:A:83:ILE:H	13	0.7
(1,252)	1:A:82:ASN:HB3	1:A:83:ILE:H	13	0.7
(1,252)	1:A:82:ASN:HB3	1:A:83:ILE:H	13	0.7
(1,150)	1:A:104:CYS:H	1:A:106:GLY:H	2	0.7
(1,150)	1:A:104:CYS:H	1:A:106:GLY:H	16	0.7
(4,8)	1:A:8:PHE:O	1:A:16:VAL:H	16	0.69
(2,75)	1:A:107:GLN:HA	1:A:108:ASP:H	10	0.69
(2,75)	1:A:108:ASP:HA	1:A:108:ASP:H	10	0.69
(2,75)	1:A:109:ASP:HA	1:A:108:ASP:H	10	0.69
(2,75)	1:A:107:GLN:HA	1:A:108:ASP:H	11	0.69
(2,75)	1:A:108:ASP:HA	1:A:108:ASP:H	11	0.69
(2,75)	1:A:109:ASP:HA	1:A:108:ASP:H	11	0.69
(2,75)	1:A:107:GLN:HA	1:A:108:ASP:H	13	0.69
(2,75)	1:A:108:ASP:HA	1:A:108:ASP:H	13	0.69
(2,75)	1:A:109:ASP:HA	1:A:108:ASP:H	13	0.69
(2,45)	1:A:21:LYS:HB2	1:A:22:CYS:H	12	0.69
(2,45)	1:A:21:LYS:HB3	1:A:22:CYS:H	12	0.69
(2,45)	1:A:42:ARG:HB2	1:A:22:CYS:H	12	0.69
(2,45)	1:A:42:ARG:HB3	1:A:22:CYS:H	12	0.69
(2,136)	1:A:12:ASN:HB2	1:A:14:GLN:H	5	0.69
(2,136)	1:A:12:ASN:HB3	1:A:14:GLN:H	5	0.69
(2,136)	1:A:13:GLY:HA2	1:A:14:GLN:H	5	0.69
(2,136)	1:A:13:GLY:HA3	1:A:14:GLN:H	5	0.69
(2,136)	1:A:12:ASN:HB2	1:A:14:GLN:H	8	0.69
(2,136)	1:A:12:ASN:HB3	1:A:14:GLN:H	8	0.69
(2,136)	1:A:13:GLY:HA2	1:A:14:GLN:H	8	0.69
(2,136)	1:A:13:GLY:HA3	1:A:14:GLN:H	8	0.69
(2,136)	1:A:12:ASN:HB2	1:A:14:GLN:H	13	0.69
(2,136)	1:A:12:ASN:HB3	1:A:14:GLN:H	13	0.69
(2,136)	1:A:13:GLY:HA2	1:A:14:GLN:H	13	0.69
(2,136)	1:A:13:GLY:HA3	1:A:14:GLN:H	13	0.69
(2,136)	1:A:12:ASN:HB2	1:A:14:GLN:H	18	0.69

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,136)	1:A:12:ASN:HB3	1:A:14:GLN:H	18	0.69
(2,136)	1:A:13:GLY:HA2	1:A:14:GLN:H	18	0.69
(2,136)	1:A:13:GLY:HA3	1:A:14:GLN:H	18	0.69
(2,131)	1:A:25:ASP:HB2	1:A:27:ASP:H	4	0.69
(2,131)	1:A:25:ASP:HB3	1:A:27:ASP:H	4	0.69
(2,131)	1:A:33:ASP:HB2	1:A:27:ASP:H	4	0.69
(2,131)	1:A:34:GLU:HB3	1:A:27:ASP:H	4	0.69
(2,131)	1:A:25:ASP:HB2	1:A:27:ASP:H	18	0.69
(2,131)	1:A:25:ASP:HB3	1:A:27:ASP:H	18	0.69
(2,131)	1:A:33:ASP:HB2	1:A:27:ASP:H	18	0.69
(2,131)	1:A:34:GLU:HB3	1:A:27:ASP:H	18	0.69
(1,923)	1:A:8:PHE:HB2	1:A:16:VAL:HA	10	0.69
(1,877)	1:A:22:CYS:HA	1:A:44:CYS:H	4	0.69
(1,770)	1:A:63:TRP:H	1:A:77:GLU:HG2	19	0.69
(1,770)	1:A:63:TRP:H	1:A:77:GLU:HG3	19	0.69
(1,700)	1:A:69:ASN:HB2	1:A:69:ASN:H	3	0.69
(1,700)	1:A:69:ASN:HB3	1:A:69:ASN:H	3	0.69
(1,700)	1:A:69:ASN:HB2	1:A:69:ASN:H	12	0.69
(1,700)	1:A:69:ASN:HB3	1:A:69:ASN:H	12	0.69
(1,692)	1:A:8:PHE:HB2	1:A:8:PHE:H	18	0.69
(1,692)	1:A:8:PHE:HB3	1:A:8:PHE:H	18	0.69
(1,692)	1:A:8:PHE:HB2	1:A:8:PHE:H	20	0.69
(1,692)	1:A:8:PHE:HB3	1:A:8:PHE:H	20	0.69
(1,686)	1:A:74:GLY:H	1:A:69:ASN:HD22	16	0.69
(1,541)	1:A:115:ASP:HB2	1:A:116:GLU:H	13	0.69
(1,541)	1:A:115:ASP:HB3	1:A:116:GLU:H	13	0.69
(1,502)	1:A:34:GLU:HG2	1:A:34:GLU:H	13	0.69
(1,502)	1:A:34:GLU:HG3	1:A:34:GLU:H	13	0.69
(1,502)	1:A:34:GLU:HG2	1:A:34:GLU:H	19	0.69
(1,502)	1:A:34:GLU:HG3	1:A:34:GLU:H	19	0.69
(1,492)	1:A:22:CYS:H	1:A:24:GLY:H	7	0.69
(1,491)	1:A:22:CYS:H	1:A:24:GLY:H	7	0.69
(1,252)	1:A:82:ASN:HB2	1:A:83:ILE:H	14	0.69
(1,252)	1:A:82:ASN:HB2	1:A:83:ILE:H	14	0.69
(1,252)	1:A:82:ASN:HB3	1:A:83:ILE:H	14	0.69
(1,252)	1:A:82:ASN:HB3	1:A:83:ILE:H	14	0.69
(1,212)	1:A:96:ARG:H	1:A:92:CYS:HA	1	0.69
(1,150)	1:A:104:CYS:H	1:A:106:GLY:H	18	0.69
(2,75)	1:A:107:GLN:HA	1:A:108:ASP:H	5	0.68
(2,75)	1:A:108:ASP:HA	1:A:108:ASP:H	5	0.68
(2,75)	1:A:109:ASP:HA	1:A:108:ASP:H	5	0.68
(2,75)	1:A:107:GLN:HA	1:A:108:ASP:H	20	0.68

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,75)	1:A:108:ASP:HA	1:A:108:ASP:H	20	0.68
(2,75)	1:A:109:ASP:HA	1:A:108:ASP:H	20	0.68
(2,62)	1:A:56:THR:HG1	1:A:56:THR:H	10	0.68
(2,62)	1:A:56:THR:HG1	1:A:56:THR:H	10	0.68
(2,62)	1:A:56:THR:HG21	1:A:56:THR:H	10	0.68
(2,62)	1:A:56:THR:HG21	1:A:56:THR:H	10	0.68
(2,62)	1:A:56:THR:HG22	1:A:56:THR:H	10	0.68
(2,62)	1:A:56:THR:HG22	1:A:56:THR:H	10	0.68
(2,62)	1:A:56:THR:HG23	1:A:56:THR:H	10	0.68
(2,62)	1:A:56:THR:HG23	1:A:56:THR:H	10	0.68
(2,152)	1:A:52:GLY:H	1:A:53:ALA:H	15	0.68
(2,152)	1:A:54:HIS:H	1:A:53:ALA:H	15	0.68
(2,152)	1:A:52:GLY:H	1:A:53:ALA:H	16	0.68
(2,152)	1:A:54:HIS:H	1:A:53:ALA:H	16	0.68
(2,136)	1:A:12:ASN:HB2	1:A:14:GLN:H	4	0.68
(2,136)	1:A:12:ASN:HB3	1:A:14:GLN:H	4	0.68
(2,136)	1:A:13:GLY:HA2	1:A:14:GLN:H	4	0.68
(2,136)	1:A:13:GLY:HA3	1:A:14:GLN:H	4	0.68
(2,136)	1:A:12:ASN:HB2	1:A:14:GLN:H	11	0.68
(2,136)	1:A:12:ASN:HB3	1:A:14:GLN:H	11	0.68
(2,136)	1:A:13:GLY:HA2	1:A:14:GLN:H	11	0.68
(2,136)	1:A:13:GLY:HA3	1:A:14:GLN:H	11	0.68
(2,131)	1:A:25:ASP:HB2	1:A:27:ASP:H	14	0.68
(2,131)	1:A:25:ASP:HB3	1:A:27:ASP:H	14	0.68
(2,131)	1:A:33:ASP:HB2	1:A:27:ASP:H	14	0.68
(2,131)	1:A:34:GLU:HB3	1:A:27:ASP:H	14	0.68
(1,911)	1:A:57:GLN:HE21	1:A:71:CYS:H	20	0.68
(1,898)	1:A:57:GLN:HE22	1:A:71:CYS:H	5	0.68
(1,898)	1:A:57:GLN:HE22	1:A:71:CYS:H	19	0.68
(1,877)	1:A:22:CYS:HA	1:A:44:CYS:H	2	0.68
(1,824)	1:A:118:ASP:H	1:A:116:GLU:H	15	0.68
(1,770)	1:A:63:TRP:H	1:A:77:GLU:HG2	7	0.68
(1,770)	1:A:63:TRP:H	1:A:77:GLU:HG3	7	0.68
(1,756)	1:A:57:GLN:HB2	1:A:57:GLN:HE21	17	0.68
(1,756)	1:A:57:GLN:HB2	1:A:57:GLN:HE21	17	0.68
(1,756)	1:A:57:GLN:HB3	1:A:57:GLN:HE21	17	0.68
(1,756)	1:A:57:GLN:HB3	1:A:57:GLN:HE21	17	0.68
(1,721)	1:A:21:LYS:HG2	1:A:22:CYS:H	13	0.68
(1,721)	1:A:21:LYS:HG3	1:A:22:CYS:H	13	0.68
(1,708)	1:A:44:CYS:HB2	1:A:45:ARG:H	1	0.68
(1,708)	1:A:44:CYS:HB3	1:A:45:ARG:H	1	0.68
(1,700)	1:A:69:ASN:HB2	1:A:69:ASN:H	8	0.68

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,700)	1:A:69:ASN:HB3	1:A:69:ASN:H	8	0.68
(1,700)	1:A:69:ASN:HB2	1:A:69:ASN:H	11	0.68
(1,700)	1:A:69:ASN:HB3	1:A:69:ASN:H	11	0.68
(1,700)	1:A:69:ASN:HB2	1:A:69:ASN:H	16	0.68
(1,700)	1:A:69:ASN:HB3	1:A:69:ASN:H	16	0.68
(1,692)	1:A:8:PHE:HB2	1:A:8:PHE:H	1	0.68
(1,692)	1:A:8:PHE:HB3	1:A:8:PHE:H	1	0.68
(1,692)	1:A:8:PHE:HB2	1:A:8:PHE:H	9	0.68
(1,692)	1:A:8:PHE:HB3	1:A:8:PHE:H	9	0.68
(1,686)	1:A:74:GLY:H	1:A:69:ASN:HD22	11	0.68
(1,492)	1:A:22:CYS:H	1:A:24:GLY:H	2	0.68
(1,492)	1:A:22:CYS:H	1:A:24:GLY:H	17	0.68
(1,491)	1:A:22:CYS:H	1:A:24:GLY:H	2	0.68
(1,491)	1:A:22:CYS:H	1:A:24:GLY:H	17	0.68
(1,459)	1:A:70:ASP:HA	1:A:76:ASP:H	12	0.68
(1,391)	1:A:54:HIS:HA	1:A:53:ALA:H	4	0.68
(1,391)	1:A:54:HIS:HA	1:A:53:ALA:H	15	0.68
(1,391)	1:A:54:HIS:HA	1:A:53:ALA:H	19	0.68
(1,252)	1:A:82:ASN:HB2	1:A:83:ILE:H	6	0.68
(1,252)	1:A:82:ASN:HB2	1:A:83:ILE:H	6	0.68
(1,252)	1:A:82:ASN:HB3	1:A:83:ILE:H	6	0.68
(1,252)	1:A:82:ASN:HB3	1:A:83:ILE:H	6	0.68
(1,252)	1:A:82:ASN:HB2	1:A:83:ILE:H	11	0.68
(1,252)	1:A:82:ASN:HB2	1:A:83:ILE:H	11	0.68
(1,252)	1:A:82:ASN:HB3	1:A:83:ILE:H	11	0.68
(1,252)	1:A:82:ASN:HB3	1:A:83:ILE:H	11	0.68
(1,212)	1:A:96:ARG:H	1:A:92:CYS:HA	6	0.68
(2,75)	1:A:107:GLN:HA	1:A:108:ASP:H	3	0.67
(2,75)	1:A:108:ASP:HA	1:A:108:ASP:H	3	0.67
(2,75)	1:A:109:ASP:HA	1:A:108:ASP:H	3	0.67
(2,75)	1:A:107:GLN:HA	1:A:108:ASP:H	6	0.67
(2,75)	1:A:108:ASP:HA	1:A:108:ASP:H	6	0.67
(2,75)	1:A:109:ASP:HA	1:A:108:ASP:H	6	0.67
(2,72)	1:A:110:CYS:HB2	1:A:113:GLY:H	1	0.67
(2,72)	1:A:110:CYS:HB3	1:A:113:GLY:H	1	0.67
(2,72)	1:A:112:ASP:HB2	1:A:113:GLY:H	1	0.67
(2,72)	1:A:112:ASP:HB3	1:A:113:GLY:H	1	0.67
(2,363)	1:A:49:ILE:HB	1:A:49:ILE:H	2	0.67
(2,363)	1:A:59:ILE:HB	1:A:49:ILE:H	2	0.67
(2,363)	1:A:49:ILE:HB	1:A:49:ILE:H	5	0.67
(2,363)	1:A:59:ILE:HB	1:A:49:ILE:H	5	0.67
(2,330)	1:A:92:CYS:HA	1:A:93:SER:H	3	0.67

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,330)	1:A:111:SER:HG	1:A:93:SER:H	3	0.67
(2,330)	1:A:114:SER:HG	1:A:93:SER:H	3	0.67
(2,321)	1:A:64:ARG:HB2	1:A:67:GLY:H	4	0.67
(2,321)	1:A:64:ARG:HB3	1:A:67:GLY:H	4	0.67
(2,321)	1:A:64:ARG:HG2	1:A:67:GLY:H	4	0.67
(2,321)	1:A:64:ARG:HG3	1:A:67:GLY:H	4	0.67
(2,321)	1:A:68:GLU:HB2	1:A:67:GLY:H	4	0.67
(2,321)	1:A:68:GLU:HB3	1:A:67:GLY:H	4	0.67
(2,281)	1:A:10:CYS:HA	1:A:11:ASN:HD22	3	0.67
(2,281)	1:A:11:ASN:HA	1:A:11:ASN:HD22	3	0.67
(2,281)	1:A:10:CYS:HA	1:A:11:ASN:HD22	18	0.67
(2,281)	1:A:11:ASN:HA	1:A:11:ASN:HD22	18	0.67
(2,222)	1:A:24:GLY:HA2	1:A:45:ARG:H	12	0.67
(2,222)	1:A:24:GLY:HA3	1:A:45:ARG:H	12	0.67
(2,222)	1:A:45:ARG:HA	1:A:45:ARG:H	12	0.67
(2,152)	1:A:52:GLY:H	1:A:53:ALA:H	9	0.67
(2,152)	1:A:54:HIS:H	1:A:53:ALA:H	9	0.67
(2,136)	1:A:12:ASN:HB2	1:A:14:GLN:H	14	0.67
(2,136)	1:A:12:ASN:HB3	1:A:14:GLN:H	14	0.67
(2,136)	1:A:13:GLY:HA2	1:A:14:GLN:H	14	0.67
(2,136)	1:A:13:GLY:HA3	1:A:14:GLN:H	14	0.67
(2,136)	1:A:12:ASN:HB2	1:A:14:GLN:H	15	0.67
(2,136)	1:A:12:ASN:HB3	1:A:14:GLN:H	15	0.67
(2,136)	1:A:13:GLY:HA2	1:A:14:GLN:H	15	0.67
(2,136)	1:A:13:GLY:HA3	1:A:14:GLN:H	15	0.67
(2,136)	1:A:12:ASN:HB2	1:A:14:GLN:H	20	0.67
(2,136)	1:A:12:ASN:HB3	1:A:14:GLN:H	20	0.67
(2,136)	1:A:13:GLY:HA2	1:A:14:GLN:H	20	0.67
(2,136)	1:A:13:GLY:HA3	1:A:14:GLN:H	20	0.67
(2,131)	1:A:25:ASP:HB2	1:A:27:ASP:H	10	0.67
(2,131)	1:A:25:ASP:HB3	1:A:27:ASP:H	10	0.67
(2,131)	1:A:33:ASP:HB2	1:A:27:ASP:H	10	0.67
(2,131)	1:A:34:GLU:HB3	1:A:27:ASP:H	10	0.67
(1,898)	1:A:57:GLN:HE22	1:A:71:CYS:H	11	0.67
(1,803)	1:A:101:ASN:HD21	1:A:99:SER:H	2	0.67
(1,700)	1:A:69:ASN:HB2	1:A:69:ASN:H	5	0.67
(1,700)	1:A:69:ASN:HB3	1:A:69:ASN:H	5	0.67
(1,700)	1:A:69:ASN:HB2	1:A:69:ASN:H	15	0.67
(1,700)	1:A:69:ASN:HB3	1:A:69:ASN:H	15	0.67
(1,692)	1:A:8:PHE:HB2	1:A:8:PHE:H	5	0.67
(1,692)	1:A:8:PHE:HB3	1:A:8:PHE:H	5	0.67
(1,692)	1:A:8:PHE:HB2	1:A:8:PHE:H	12	0.67

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,692)	1:A:8:PHE:HB3	1:A:8:PHE:H	12	0.67
(1,692)	1:A:8:PHE:HB2	1:A:8:PHE:H	14	0.67
(1,692)	1:A:8:PHE:HB3	1:A:8:PHE:H	14	0.67
(1,687)	1:A:69:ASN:HD21	1:A:74:GLY:H	2	0.67
(1,686)	1:A:74:GLY:H	1:A:69:ASN:HD22	10	0.67
(1,686)	1:A:74:GLY:H	1:A:69:ASN:HD22	18	0.67
(1,502)	1:A:34:GLU:HG2	1:A:34:GLU:H	6	0.67
(1,502)	1:A:34:GLU:HG3	1:A:34:GLU:H	6	0.67
(1,492)	1:A:22:CYS:H	1:A:24:GLY:H	6	0.67
(1,492)	1:A:22:CYS:H	1:A:24:GLY:H	16	0.67
(1,491)	1:A:22:CYS:H	1:A:24:GLY:H	6	0.67
(1,491)	1:A:22:CYS:H	1:A:24:GLY:H	16	0.67
(1,436)	1:A:73:SER:H	1:A:72:ASP:H	10	0.67
(1,391)	1:A:54:HIS:HA	1:A:53:ALA:H	3	0.67
(1,391)	1:A:54:HIS:HA	1:A:53:ALA:H	10	0.67
(1,252)	1:A:82:ASN:HB2	1:A:83:ILE:H	15	0.67
(1,252)	1:A:82:ASN:HB2	1:A:83:ILE:H	15	0.67
(1,252)	1:A:82:ASN:HB3	1:A:83:ILE:H	15	0.67
(1,252)	1:A:82:ASN:HB3	1:A:83:ILE:H	15	0.67
(1,212)	1:A:96:ARG:H	1:A:92:CYS:HA	8	0.67
(2,62)	1:A:56:THR:HG1	1:A:56:THR:H	18	0.66
(2,62)	1:A:56:THR:HG1	1:A:56:THR:H	18	0.66
(2,62)	1:A:56:THR:HG21	1:A:56:THR:H	18	0.66
(2,62)	1:A:56:THR:HG21	1:A:56:THR:H	18	0.66
(2,62)	1:A:56:THR:HG22	1:A:56:THR:H	18	0.66
(2,62)	1:A:56:THR:HG22	1:A:56:THR:H	18	0.66
(2,62)	1:A:56:THR:HG23	1:A:56:THR:H	18	0.66
(2,62)	1:A:56:THR:HG23	1:A:56:THR:H	18	0.66
(2,363)	1:A:49:ILE:HB	1:A:49:ILE:H	6	0.66
(2,363)	1:A:59:ILE:HB	1:A:49:ILE:H	6	0.66
(2,363)	1:A:49:ILE:HB	1:A:49:ILE:H	11	0.66
(2,363)	1:A:59:ILE:HB	1:A:49:ILE:H	11	0.66
(2,330)	1:A:92:CYS:HA	1:A:93:SER:H	7	0.66
(2,330)	1:A:111:SER:HG	1:A:93:SER:H	7	0.66
(2,330)	1:A:114:SER:HG	1:A:93:SER:H	7	0.66
(2,239)	1:A:64:ARG:HB2	1:A:69:ASN:H	19	0.66
(2,239)	1:A:64:ARG:HB3	1:A:69:ASN:H	19	0.66
(2,239)	1:A:64:ARG:HG2	1:A:69:ASN:H	19	0.66
(2,239)	1:A:64:ARG:HG3	1:A:69:ASN:H	19	0.66
(2,239)	1:A:68:GLU:HB2	1:A:69:ASN:H	19	0.66
(2,239)	1:A:68:GLU:HB3	1:A:69:ASN:H	19	0.66
(2,222)	1:A:24:GLY:HA2	1:A:45:ARG:H	1	0.66

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,222)	1:A:24:GLY:HA3	1:A:45:ARG:H	1	0.66
(2,222)	1:A:45:ARG:HA	1:A:45:ARG:H	1	0.66
(2,152)	1:A:52:GLY:H	1:A:53:ALA:H	1	0.66
(2,152)	1:A:54:HIS:H	1:A:53:ALA:H	1	0.66
(2,152)	1:A:52:GLY:H	1:A:53:ALA:H	3	0.66
(2,152)	1:A:54:HIS:H	1:A:53:ALA:H	3	0.66
(2,152)	1:A:52:GLY:H	1:A:53:ALA:H	4	0.66
(2,152)	1:A:54:HIS:H	1:A:53:ALA:H	4	0.66
(2,136)	1:A:12:ASN:HB2	1:A:14:GLN:H	12	0.66
(2,136)	1:A:12:ASN:HB3	1:A:14:GLN:H	12	0.66
(2,136)	1:A:13:GLY:HA2	1:A:14:GLN:H	12	0.66
(2,136)	1:A:13:GLY:HA3	1:A:14:GLN:H	12	0.66
(2,131)	1:A:25:ASP:HB2	1:A:27:ASP:H	16	0.66
(2,131)	1:A:25:ASP:HB3	1:A:27:ASP:H	16	0.66
(2,131)	1:A:33:ASP:HB2	1:A:27:ASP:H	16	0.66
(2,131)	1:A:34:GLU:HB3	1:A:27:ASP:H	16	0.66
(1,923)	1:A:8:PHE:HB2	1:A:16:VAL:HA	6	0.66
(1,923)	1:A:8:PHE:HB2	1:A:16:VAL:HA	7	0.66
(1,923)	1:A:8:PHE:HB2	1:A:16:VAL:HA	9	0.66
(1,890)	1:A:81:GLY:HA2	1:A:63:TRP:HE1	10	0.66
(1,890)	1:A:81:GLY:HA2	1:A:63:TRP:HE1	10	0.66
(1,890)	1:A:81:GLY:HA3	1:A:63:TRP:HE1	10	0.66
(1,890)	1:A:81:GLY:HA3	1:A:63:TRP:HE1	10	0.66
(1,700)	1:A:69:ASN:HB2	1:A:69:ASN:H	9	0.66
(1,700)	1:A:69:ASN:HB3	1:A:69:ASN:H	9	0.66
(1,692)	1:A:8:PHE:HB2	1:A:8:PHE:H	15	0.66
(1,692)	1:A:8:PHE:HB3	1:A:8:PHE:H	15	0.66
(1,502)	1:A:34:GLU:HG2	1:A:34:GLU:H	8	0.66
(1,502)	1:A:34:GLU:HG3	1:A:34:GLU:H	8	0.66
(1,502)	1:A:34:GLU:HG2	1:A:34:GLU:H	9	0.66
(1,502)	1:A:34:GLU:HG3	1:A:34:GLU:H	9	0.66
(1,492)	1:A:22:CYS:H	1:A:24:GLY:H	5	0.66
(1,492)	1:A:22:CYS:H	1:A:24:GLY:H	20	0.66
(1,491)	1:A:22:CYS:H	1:A:24:GLY:H	5	0.66
(1,491)	1:A:22:CYS:H	1:A:24:GLY:H	20	0.66
(1,480)	1:A:10:CYS:HB2	1:A:10:CYS:H	17	0.66
(1,480)	1:A:10:CYS:HB3	1:A:10:CYS:H	17	0.66
(1,447)	1:A:71:CYS:HA	1:A:74:GLY:H	19	0.66
(1,391)	1:A:54:HIS:HA	1:A:53:ALA:H	18	0.66
(1,252)	1:A:82:ASN:HB2	1:A:83:ILE:H	2	0.66
(1,252)	1:A:82:ASN:HB2	1:A:83:ILE:H	2	0.66
(1,252)	1:A:82:ASN:HB3	1:A:83:ILE:H	2	0.66

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,252)	1:A:82:ASN:HB3	1:A:83:ILE:H	2	0.66
(1,252)	1:A:82:ASN:HB2	1:A:83:ILE:H	3	0.66
(1,252)	1:A:82:ASN:HB2	1:A:83:ILE:H	3	0.66
(1,252)	1:A:82:ASN:HB3	1:A:83:ILE:H	3	0.66
(1,252)	1:A:82:ASN:HB3	1:A:83:ILE:H	3	0.66
(1,150)	1:A:104:CYS:H	1:A:106:GLY:H	5	0.66
(2,281)	1:A:10:CYS:HA	1:A:11:ASN:HD22	5	0.65
(2,281)	1:A:11:ASN:HA	1:A:11:ASN:HD22	5	0.65
(2,239)	1:A:64:ARG:HB2	1:A:69:ASN:H	15	0.65
(2,239)	1:A:64:ARG:HB3	1:A:69:ASN:H	15	0.65
(2,239)	1:A:64:ARG:HG2	1:A:69:ASN:H	15	0.65
(2,239)	1:A:64:ARG:HG3	1:A:69:ASN:H	15	0.65
(2,239)	1:A:68:GLU:HB2	1:A:69:ASN:H	15	0.65
(2,239)	1:A:68:GLU:HB3	1:A:69:ASN:H	15	0.65
(2,239)	1:A:64:ARG:HB2	1:A:69:ASN:H	20	0.65
(2,239)	1:A:64:ARG:HB3	1:A:69:ASN:H	20	0.65
(2,239)	1:A:64:ARG:HG2	1:A:69:ASN:H	20	0.65
(2,239)	1:A:64:ARG:HG3	1:A:69:ASN:H	20	0.65
(2,239)	1:A:68:GLU:HB2	1:A:69:ASN:H	20	0.65
(2,239)	1:A:68:GLU:HB3	1:A:69:ASN:H	20	0.65
(2,184)	1:A:16:VAL:HG11	1:A:15:CYS:H	4	0.65
(2,184)	1:A:16:VAL:HG11	1:A:15:CYS:H	4	0.65
(2,184)	1:A:16:VAL:HG11	1:A:15:CYS:H	4	0.65
(2,184)	1:A:16:VAL:HG12	1:A:15:CYS:H	4	0.65
(2,184)	1:A:16:VAL:HG12	1:A:15:CYS:H	4	0.65
(2,184)	1:A:16:VAL:HG12	1:A:15:CYS:H	4	0.65
(2,184)	1:A:16:VAL:HG13	1:A:15:CYS:H	4	0.65
(2,184)	1:A:16:VAL:HG13	1:A:15:CYS:H	4	0.65
(2,184)	1:A:16:VAL:HG13	1:A:15:CYS:H	4	0.65
(2,184)	1:A:16:VAL:HG21	1:A:15:CYS:H	4	0.65
(2,184)	1:A:16:VAL:HG21	1:A:15:CYS:H	4	0.65
(2,184)	1:A:16:VAL:HG21	1:A:15:CYS:H	4	0.65
(2,184)	1:A:16:VAL:HG22	1:A:15:CYS:H	4	0.65
(2,184)	1:A:16:VAL:HG22	1:A:15:CYS:H	4	0.65
(2,184)	1:A:16:VAL:HG22	1:A:15:CYS:H	4	0.65
(2,184)	1:A:16:VAL:HG23	1:A:15:CYS:H	4	0.65
(2,184)	1:A:16:VAL:HG23	1:A:15:CYS:H	4	0.65
(2,184)	1:A:16:VAL:HG23	1:A:15:CYS:H	4	0.65
(2,152)	1:A:52:GLY:H	1:A:53:ALA:H	14	0.65
(2,152)	1:A:54:HIS:H	1:A:53:ALA:H	14	0.65
(2,131)	1:A:25:ASP:HB2	1:A:27:ASP:H	6	0.65
(2,131)	1:A:25:ASP:HB3	1:A:27:ASP:H	6	0.65

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,131)	1:A:33:ASP:HB2	1:A:27:ASP:H	6	0.65
(2,131)	1:A:34:GLU:HB3	1:A:27:ASP:H	6	0.65
(2,131)	1:A:25:ASP:HB2	1:A:27:ASP:H	7	0.65
(2,131)	1:A:25:ASP:HB3	1:A:27:ASP:H	7	0.65
(2,131)	1:A:33:ASP:HB2	1:A:27:ASP:H	7	0.65
(2,131)	1:A:34:GLU:HB3	1:A:27:ASP:H	7	0.65
(1,898)	1:A:57:GLN:HE22	1:A:71:CYS:H	3	0.65
(1,813)	1:A:107:GLN:HE21	1:A:108:ASP:HA	10	0.65
(1,721)	1:A:21:LYS:HG2	1:A:22:CYS:H	1	0.65
(1,721)	1:A:21:LYS:HG3	1:A:22:CYS:H	1	0.65
(1,708)	1:A:44:CYS:HB2	1:A:45:ARG:H	17	0.65
(1,708)	1:A:44:CYS:HB3	1:A:45:ARG:H	17	0.65
(1,700)	1:A:69:ASN:HB2	1:A:69:ASN:H	1	0.65
(1,700)	1:A:69:ASN:HB3	1:A:69:ASN:H	1	0.65
(1,686)	1:A:74:GLY:H	1:A:69:ASN:HD22	13	0.65
(1,634)	1:A:79:ASN:HD22	1:A:79:ASN:HA	8	0.65
(1,634)	1:A:79:ASN:HD22	1:A:79:ASN:HA	20	0.65
(1,517)	1:A:59:ILE:HG12	1:A:59:ILE:H	2	0.65
(1,517)	1:A:59:ILE:HG12	1:A:59:ILE:H	2	0.65
(1,517)	1:A:59:ILE:HG13	1:A:59:ILE:H	2	0.65
(1,517)	1:A:59:ILE:HG13	1:A:59:ILE:H	2	0.65
(1,502)	1:A:34:GLU:HG2	1:A:34:GLU:H	17	0.65
(1,502)	1:A:34:GLU:HG3	1:A:34:GLU:H	17	0.65
(1,492)	1:A:22:CYS:H	1:A:24:GLY:H	1	0.65
(1,492)	1:A:22:CYS:H	1:A:24:GLY:H	8	0.65
(1,492)	1:A:22:CYS:H	1:A:24:GLY:H	11	0.65
(1,492)	1:A:22:CYS:H	1:A:24:GLY:H	13	0.65
(1,491)	1:A:22:CYS:H	1:A:24:GLY:H	1	0.65
(1,491)	1:A:22:CYS:H	1:A:24:GLY:H	8	0.65
(1,491)	1:A:22:CYS:H	1:A:24:GLY:H	11	0.65
(1,491)	1:A:22:CYS:H	1:A:24:GLY:H	13	0.65
(1,430)	1:A:69:ASN:HB2	1:A:69:ASN:H	14	0.65
(1,430)	1:A:69:ASN:HB3	1:A:69:ASN:H	14	0.65
(1,391)	1:A:54:HIS:HA	1:A:53:ALA:H	16	0.65
(1,391)	1:A:54:HIS:HA	1:A:53:ALA:H	20	0.65
(1,212)	1:A:96:ARG:H	1:A:92:CYS:HA	2	0.65
(1,212)	1:A:96:ARG:H	1:A:92:CYS:HA	16	0.65
(1,2)	1:A:112:ASP:H	1:A:113:GLY:H	5	0.65
(2,80)	1:A:41:MET:HA	1:A:56:THR:H	15	0.64
(2,80)	1:A:42:ARG:HA	1:A:56:THR:H	15	0.64
(2,80)	1:A:56:THR:HB	1:A:56:THR:H	15	0.64
(2,75)	1:A:107:GLN:HA	1:A:108:ASP:H	16	0.64

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,75)	1:A:108:ASP:HA	1:A:108:ASP:H	16	0.64
(2,75)	1:A:109:ASP:HA	1:A:108:ASP:H	16	0.64
(2,62)	1:A:56:THR:HG1	1:A:56:THR:H	9	0.64
(2,62)	1:A:56:THR:HG1	1:A:56:THR:H	9	0.64
(2,62)	1:A:56:THR:HG21	1:A:56:THR:H	9	0.64
(2,62)	1:A:56:THR:HG21	1:A:56:THR:H	9	0.64
(2,62)	1:A:56:THR:HG22	1:A:56:THR:H	9	0.64
(2,62)	1:A:56:THR:HG22	1:A:56:THR:H	9	0.64
(2,62)	1:A:56:THR:HG23	1:A:56:THR:H	9	0.64
(2,62)	1:A:56:THR:HG23	1:A:56:THR:H	9	0.64
(2,390)	1:A:17:PRO:HB2	1:A:19:ARG:H	4	0.64
(2,390)	1:A:17:PRO:HB3	1:A:19:ARG:H	4	0.64
(2,390)	1:A:17:PRO:HG2	1:A:19:ARG:H	4	0.64
(2,390)	1:A:17:PRO:HG3	1:A:19:ARG:H	4	0.64
(2,363)	1:A:49:ILE:HB	1:A:49:ILE:H	17	0.64
(2,363)	1:A:59:ILE:HB	1:A:49:ILE:H	17	0.64
(2,357)	1:A:69:ASN:HA	1:A:69:ASN:HD21	12	0.64
(2,357)	1:A:70:ASP:HA	1:A:69:ASN:HD21	12	0.64
(2,357)	1:A:69:ASN:HA	1:A:69:ASN:HD21	19	0.64
(2,357)	1:A:70:ASP:HA	1:A:69:ASN:HD21	19	0.64
(2,330)	1:A:92:CYS:HA	1:A:93:SER:H	18	0.64
(2,330)	1:A:111:SER:HG	1:A:93:SER:H	18	0.64
(2,330)	1:A:114:SER:HG	1:A:93:SER:H	18	0.64
(2,184)	1:A:16:VAL:HG11	1:A:15:CYS:H	17	0.64
(2,184)	1:A:16:VAL:HG11	1:A:15:CYS:H	17	0.64
(2,184)	1:A:16:VAL:HG11	1:A:15:CYS:H	17	0.64
(2,184)	1:A:16:VAL:HG12	1:A:15:CYS:H	17	0.64
(2,184)	1:A:16:VAL:HG12	1:A:15:CYS:H	17	0.64
(2,184)	1:A:16:VAL:HG12	1:A:15:CYS:H	17	0.64
(2,184)	1:A:16:VAL:HG13	1:A:15:CYS:H	17	0.64
(2,184)	1:A:16:VAL:HG13	1:A:15:CYS:H	17	0.64
(2,184)	1:A:16:VAL:HG13	1:A:15:CYS:H	17	0.64
(2,184)	1:A:16:VAL:HG21	1:A:15:CYS:H	17	0.64
(2,184)	1:A:16:VAL:HG21	1:A:15:CYS:H	17	0.64
(2,184)	1:A:16:VAL:HG21	1:A:15:CYS:H	17	0.64
(2,184)	1:A:16:VAL:HG22	1:A:15:CYS:H	17	0.64
(2,184)	1:A:16:VAL:HG22	1:A:15:CYS:H	17	0.64
(2,184)	1:A:16:VAL:HG22	1:A:15:CYS:H	17	0.64
(2,184)	1:A:16:VAL:HG23	1:A:15:CYS:H	17	0.64
(2,184)	1:A:16:VAL:HG23	1:A:15:CYS:H	17	0.64
(2,184)	1:A:16:VAL:HG23	1:A:15:CYS:H	17	0.64
(2,152)	1:A:52:GLY:H	1:A:53:ALA:H	5	0.64

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,152)	1:A:54:HIS:H	1:A:53:ALA:H	5	0.64
(2,152)	1:A:52:GLY:H	1:A:53:ALA:H	12	0.64
(2,152)	1:A:54:HIS:H	1:A:53:ALA:H	12	0.64
(2,144)	1:A:21:LYS:HB2	1:A:22:CYS:H	2	0.64
(2,144)	1:A:21:LYS:HB3	1:A:22:CYS:H	2	0.64
(2,144)	1:A:21:LYS:HD2	1:A:22:CYS:H	2	0.64
(2,144)	1:A:21:LYS:HD3	1:A:22:CYS:H	2	0.64
(2,144)	1:A:34:GLU:HB2	1:A:22:CYS:H	2	0.64
(2,144)	1:A:21:LYS:HB2	1:A:22:CYS:H	17	0.64
(2,144)	1:A:21:LYS:HB3	1:A:22:CYS:H	17	0.64
(2,144)	1:A:21:LYS:HD2	1:A:22:CYS:H	17	0.64
(2,144)	1:A:21:LYS:HD3	1:A:22:CYS:H	17	0.64
(2,144)	1:A:34:GLU:HB2	1:A:22:CYS:H	17	0.64
(1,923)	1:A:8:PHE:HB2	1:A:16:VAL:HA	11	0.64
(1,700)	1:A:69:ASN:HB2	1:A:69:ASN:H	7	0.64
(1,700)	1:A:69:ASN:HB3	1:A:69:ASN:H	7	0.64
(1,692)	1:A:8:PHE:HB2	1:A:8:PHE:H	4	0.64
(1,692)	1:A:8:PHE:HB3	1:A:8:PHE:H	4	0.64
(1,687)	1:A:69:ASN:HD21	1:A:74:GLY:H	1	0.64
(1,687)	1:A:69:ASN:HD21	1:A:74:GLY:H	7	0.64
(1,687)	1:A:69:ASN:HD21	1:A:74:GLY:H	13	0.64
(1,686)	1:A:74:GLY:H	1:A:69:ASN:HD22	14	0.64
(1,670)	1:A:107:GLN:HB2	1:A:105:ASN:HD22	9	0.64
(1,670)	1:A:107:GLN:HB2	1:A:105:ASN:HD22	9	0.64
(1,670)	1:A:107:GLN:HB3	1:A:105:ASN:HD22	9	0.64
(1,670)	1:A:107:GLN:HB3	1:A:105:ASN:HD22	9	0.64
(1,634)	1:A:79:ASN:HD22	1:A:79:ASN:HA	16	0.64
(1,584)	1:A:27:ASP:HB2	1:A:27:ASP:H	8	0.64
(1,584)	1:A:27:ASP:HB3	1:A:27:ASP:H	8	0.64
(1,584)	1:A:27:ASP:HB2	1:A:27:ASP:H	17	0.64
(1,584)	1:A:27:ASP:HB3	1:A:27:ASP:H	17	0.64
(1,583)	1:A:40:HIS:HA	1:A:38:GLN:H	15	0.64
(1,541)	1:A:115:ASP:HB2	1:A:116:GLU:H	20	0.64
(1,541)	1:A:115:ASP:HB3	1:A:116:GLU:H	20	0.64
(1,531)	1:A:71:CYS:HB2	1:A:71:CYS:H	17	0.64
(1,531)	1:A:71:CYS:HB3	1:A:71:CYS:H	17	0.64
(1,502)	1:A:34:GLU:HG2	1:A:34:GLU:H	12	0.64
(1,502)	1:A:34:GLU:HG3	1:A:34:GLU:H	12	0.64
(1,502)	1:A:34:GLU:HG2	1:A:34:GLU:H	20	0.64
(1,502)	1:A:34:GLU:HG3	1:A:34:GLU:H	20	0.64
(1,492)	1:A:22:CYS:H	1:A:24:GLY:H	18	0.64
(1,491)	1:A:22:CYS:H	1:A:24:GLY:H	18	0.64

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,463)	1:A:71:CYS:HB2	1:A:78:GLU:H	12	0.64
(1,463)	1:A:71:CYS:HB3	1:A:78:GLU:H	12	0.64
(1,391)	1:A:54:HIS:HA	1:A:53:ALA:H	1	0.64
(1,391)	1:A:54:HIS:HA	1:A:53:ALA:H	9	0.64
(1,391)	1:A:54:HIS:HA	1:A:53:ALA:H	11	0.64
(1,27)	1:A:118:ASP:H	1:A:117:LEU:H	19	0.64
(1,252)	1:A:82:ASN:HB2	1:A:83:ILE:H	16	0.64
(1,252)	1:A:82:ASN:HB2	1:A:83:ILE:H	16	0.64
(1,252)	1:A:82:ASN:HB3	1:A:83:ILE:H	16	0.64
(1,252)	1:A:82:ASN:HB3	1:A:83:ILE:H	16	0.64
(1,212)	1:A:96:ARG:H	1:A:92:CYS:HA	3	0.64
(1,2)	1:A:112:ASP:H	1:A:113:GLY:H	19	0.64
(4,8)	1:A:8:PHE:O	1:A:16:VAL:H	7	0.63
(2,98)	1:A:28:CYS:HB2	1:A:11:ASN:H	9	0.63
(2,98)	1:A:28:CYS:HB3	1:A:11:ASN:H	9	0.63
(2,98)	1:A:32:SER:HB2	1:A:11:ASN:H	9	0.63
(2,98)	1:A:32:SER:HB3	1:A:11:ASN:H	9	0.63
(2,80)	1:A:41:MET:HA	1:A:56:THR:H	4	0.63
(2,80)	1:A:42:ARG:HA	1:A:56:THR:H	4	0.63
(2,80)	1:A:56:THR:HB	1:A:56:THR:H	4	0.63
(2,62)	1:A:56:THR:HG1	1:A:56:THR:H	14	0.63
(2,62)	1:A:56:THR:HG1	1:A:56:THR:H	14	0.63
(2,62)	1:A:56:THR:HG21	1:A:56:THR:H	14	0.63
(2,62)	1:A:56:THR:HG21	1:A:56:THR:H	14	0.63
(2,62)	1:A:56:THR:HG22	1:A:56:THR:H	14	0.63
(2,62)	1:A:56:THR:HG22	1:A:56:THR:H	14	0.63
(2,62)	1:A:56:THR:HG23	1:A:56:THR:H	14	0.63
(2,62)	1:A:56:THR:HG23	1:A:56:THR:H	14	0.63
(2,62)	1:A:56:THR:HG1	1:A:56:THR:H	16	0.63
(2,62)	1:A:56:THR:HG1	1:A:56:THR:H	16	0.63
(2,62)	1:A:56:THR:HG21	1:A:56:THR:H	16	0.63
(2,62)	1:A:56:THR:HG21	1:A:56:THR:H	16	0.63
(2,62)	1:A:56:THR:HG22	1:A:56:THR:H	16	0.63
(2,62)	1:A:56:THR:HG22	1:A:56:THR:H	16	0.63
(2,62)	1:A:56:THR:HG23	1:A:56:THR:H	16	0.63
(2,62)	1:A:56:THR:HG23	1:A:56:THR:H	16	0.63
(2,341)	1:A:78:GLU:HG2	1:A:78:GLU:H	10	0.63
(2,341)	1:A:78:GLU:HG3	1:A:78:GLU:H	10	0.63
(2,341)	1:A:87:PRO:HB2	1:A:78:GLU:H	10	0.63
(2,341)	1:A:87:PRO:HB3	1:A:78:GLU:H	10	0.63
(2,24)	1:A:11:ASN:HB2	1:A:11:ASN:H	3	0.63
(2,24)	1:A:11:ASN:HB3	1:A:11:ASN:H	3	0.63

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,24)	1:A:12:ASN:HB2	1:A:11:ASN:H	3	0.63
(2,24)	1:A:11:ASN:HB2	1:A:11:ASN:H	18	0.63
(2,24)	1:A:11:ASN:HB3	1:A:11:ASN:H	18	0.63
(2,24)	1:A:12:ASN:HB2	1:A:11:ASN:H	18	0.63
(2,222)	1:A:24:GLY:HA2	1:A:45:ARG:H	15	0.63
(2,222)	1:A:24:GLY:HA3	1:A:45:ARG:H	15	0.63
(2,222)	1:A:45:ARG:HA	1:A:45:ARG:H	15	0.63
(2,186)	1:A:64:ARG:HD2	1:A:67:GLY:H	6	0.63
(2,186)	1:A:64:ARG:HD3	1:A:67:GLY:H	6	0.63
(2,186)	1:A:67:GLY:HA2	1:A:67:GLY:H	6	0.63
(2,186)	1:A:67:GLY:HA3	1:A:67:GLY:H	6	0.63
(2,152)	1:A:52:GLY:H	1:A:53:ALA:H	20	0.63
(2,152)	1:A:54:HIS:H	1:A:53:ALA:H	20	0.63
(1,923)	1:A:8:PHE:HB2	1:A:16:VAL:HA	15	0.63
(1,877)	1:A:22:CYS:HA	1:A:44:CYS:H	6	0.63
(1,723)	1:A:23:ASP:H	1:A:21:LYS:HA	4	0.63
(1,723)	1:A:23:ASP:H	1:A:21:LYS:HA	12	0.63
(1,723)	1:A:23:ASP:H	1:A:21:LYS:HA	16	0.63
(1,708)	1:A:44:CYS:HB2	1:A:45:ARG:H	7	0.63
(1,708)	1:A:44:CYS:HB3	1:A:45:ARG:H	7	0.63
(1,700)	1:A:69:ASN:HB2	1:A:69:ASN:H	2	0.63
(1,700)	1:A:69:ASN:HB3	1:A:69:ASN:H	2	0.63
(1,687)	1:A:69:ASN:HD21	1:A:74:GLY:H	9	0.63
(1,492)	1:A:22:CYS:H	1:A:24:GLY:H	10	0.63
(1,491)	1:A:22:CYS:H	1:A:24:GLY:H	10	0.63
(1,459)	1:A:70:ASP:HA	1:A:76:ASP:H	10	0.63
(1,431)	1:A:72:ASP:H	1:A:70:ASP:H	14	0.63
(1,430)	1:A:69:ASN:HB2	1:A:69:ASN:H	18	0.63
(1,430)	1:A:69:ASN:HB3	1:A:69:ASN:H	18	0.63
(1,347)	1:A:31:GLY:H	1:A:28:CYS:H	19	0.63
(1,2)	1:A:112:ASP:H	1:A:113:GLY:H	17	0.63
(2,72)	1:A:110:CYS:HB2	1:A:113:GLY:H	10	0.62
(2,72)	1:A:110:CYS:HB3	1:A:113:GLY:H	10	0.62
(2,72)	1:A:112:ASP:HB2	1:A:113:GLY:H	10	0.62
(2,72)	1:A:112:ASP:HB3	1:A:113:GLY:H	10	0.62
(2,330)	1:A:92:CYS:HA	1:A:93:SER:H	14	0.62
(2,330)	1:A:111:SER:HG	1:A:93:SER:H	14	0.62
(2,330)	1:A:114:SER:HG	1:A:93:SER:H	14	0.62
(2,321)	1:A:64:ARG:HB2	1:A:67:GLY:H	8	0.62
(2,321)	1:A:64:ARG:HB3	1:A:67:GLY:H	8	0.62
(2,321)	1:A:64:ARG:HG2	1:A:67:GLY:H	8	0.62
(2,321)	1:A:64:ARG:HG3	1:A:67:GLY:H	8	0.62

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,321)	1:A:68:GLU:HB2	1:A:67:GLY:H	8	0.62
(2,321)	1:A:68:GLU:HB3	1:A:67:GLY:H	8	0.62
(2,275)	1:A:43:THR:HG1	1:A:44:CYS:H	18	0.62
(2,275)	1:A:43:THR:HG1	1:A:44:CYS:H	18	0.62
(2,275)	1:A:43:THR:HG21	1:A:44:CYS:H	18	0.62
(2,275)	1:A:43:THR:HG21	1:A:44:CYS:H	18	0.62
(2,275)	1:A:43:THR:HG22	1:A:44:CYS:H	18	0.62
(2,275)	1:A:43:THR:HG22	1:A:44:CYS:H	18	0.62
(2,275)	1:A:43:THR:HG23	1:A:44:CYS:H	18	0.62
(2,275)	1:A:43:THR:HG23	1:A:44:CYS:H	18	0.62
(2,275)	1:A:56:THR:HG21	1:A:44:CYS:H	18	0.62
(2,275)	1:A:56:THR:HG22	1:A:44:CYS:H	18	0.62
(2,275)	1:A:56:THR:HG23	1:A:44:CYS:H	18	0.62
(2,275)	1:A:43:THR:HG1	1:A:44:CYS:H	19	0.62
(2,275)	1:A:43:THR:HG1	1:A:44:CYS:H	19	0.62
(2,275)	1:A:43:THR:HG21	1:A:44:CYS:H	19	0.62
(2,275)	1:A:43:THR:HG21	1:A:44:CYS:H	19	0.62
(2,275)	1:A:43:THR:HG22	1:A:44:CYS:H	19	0.62
(2,275)	1:A:43:THR:HG22	1:A:44:CYS:H	19	0.62
(2,275)	1:A:43:THR:HG23	1:A:44:CYS:H	19	0.62
(2,275)	1:A:43:THR:HG23	1:A:44:CYS:H	19	0.62
(2,275)	1:A:56:THR:HG21	1:A:44:CYS:H	19	0.62
(2,275)	1:A:56:THR:HG22	1:A:44:CYS:H	19	0.62
(2,275)	1:A:56:THR:HG23	1:A:44:CYS:H	19	0.62
(2,212)	1:A:88:ASP:H	1:A:86:SER:H	17	0.62
(2,207)	1:A:79:ASN:HB2	1:A:79:ASN:HD22	8	0.62
(2,207)	1:A:97:CYS:HB2	1:A:79:ASN:HD22	8	0.62
(2,184)	1:A:16:VAL:HG11	1:A:15:CYS:H	12	0.62
(2,184)	1:A:16:VAL:HG11	1:A:15:CYS:H	12	0.62
(2,184)	1:A:16:VAL:HG11	1:A:15:CYS:H	12	0.62
(2,184)	1:A:16:VAL:HG12	1:A:15:CYS:H	12	0.62
(2,184)	1:A:16:VAL:HG12	1:A:15:CYS:H	12	0.62
(2,184)	1:A:16:VAL:HG12	1:A:15:CYS:H	12	0.62
(2,184)	1:A:16:VAL:HG13	1:A:15:CYS:H	12	0.62
(2,184)	1:A:16:VAL:HG13	1:A:15:CYS:H	12	0.62
(2,184)	1:A:16:VAL:HG13	1:A:15:CYS:H	12	0.62
(2,184)	1:A:16:VAL:HG21	1:A:15:CYS:H	12	0.62
(2,184)	1:A:16:VAL:HG21	1:A:15:CYS:H	12	0.62
(2,184)	1:A:16:VAL:HG21	1:A:15:CYS:H	12	0.62
(2,184)	1:A:16:VAL:HG22	1:A:15:CYS:H	12	0.62
(2,184)	1:A:16:VAL:HG22	1:A:15:CYS:H	12	0.62
(2,184)	1:A:16:VAL:HG22	1:A:15:CYS:H	12	0.62

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,184)	1:A:16:VAL:HG23	1:A:15:CYS:H	12	0.62
(2,184)	1:A:16:VAL:HG23	1:A:15:CYS:H	12	0.62
(2,184)	1:A:16:VAL:HG23	1:A:15:CYS:H	12	0.62
(2,184)	1:A:16:VAL:HG11	1:A:15:CYS:H	14	0.62
(2,184)	1:A:16:VAL:HG11	1:A:15:CYS:H	14	0.62
(2,184)	1:A:16:VAL:HG11	1:A:15:CYS:H	14	0.62
(2,184)	1:A:16:VAL:HG12	1:A:15:CYS:H	14	0.62
(2,184)	1:A:16:VAL:HG12	1:A:15:CYS:H	14	0.62
(2,184)	1:A:16:VAL:HG12	1:A:15:CYS:H	14	0.62
(2,184)	1:A:16:VAL:HG13	1:A:15:CYS:H	14	0.62
(2,184)	1:A:16:VAL:HG13	1:A:15:CYS:H	14	0.62
(2,184)	1:A:16:VAL:HG13	1:A:15:CYS:H	14	0.62
(2,184)	1:A:16:VAL:HG21	1:A:15:CYS:H	14	0.62
(2,184)	1:A:16:VAL:HG21	1:A:15:CYS:H	14	0.62
(2,184)	1:A:16:VAL:HG21	1:A:15:CYS:H	14	0.62
(2,184)	1:A:16:VAL:HG22	1:A:15:CYS:H	14	0.62
(2,184)	1:A:16:VAL:HG22	1:A:15:CYS:H	14	0.62
(2,184)	1:A:16:VAL:HG22	1:A:15:CYS:H	14	0.62
(2,184)	1:A:16:VAL:HG23	1:A:15:CYS:H	14	0.62
(2,184)	1:A:16:VAL:HG23	1:A:15:CYS:H	14	0.62
(2,184)	1:A:16:VAL:HG23	1:A:15:CYS:H	14	0.62
(2,144)	1:A:21:LYS:HB2	1:A:22:CYS:H	3	0.62
(2,144)	1:A:21:LYS:HB3	1:A:22:CYS:H	3	0.62
(2,144)	1:A:21:LYS:HD2	1:A:22:CYS:H	3	0.62
(2,144)	1:A:21:LYS:HD3	1:A:22:CYS:H	3	0.62
(2,144)	1:A:34:GLU:HB2	1:A:22:CYS:H	3	0.62
(2,144)	1:A:21:LYS:HB2	1:A:22:CYS:H	19	0.62
(2,144)	1:A:21:LYS:HB3	1:A:22:CYS:H	19	0.62
(2,144)	1:A:21:LYS:HD2	1:A:22:CYS:H	19	0.62
(2,144)	1:A:21:LYS:HD3	1:A:22:CYS:H	19	0.62
(2,144)	1:A:34:GLU:HB2	1:A:22:CYS:H	19	0.62
(1,824)	1:A:118:ASP:H	1:A:116:GLU:H	9	0.62
(1,813)	1:A:107:GLN:HE21	1:A:108:ASP:HA	17	0.62
(1,756)	1:A:57:GLN:HB2	1:A:57:GLN:HE21	14	0.62
(1,756)	1:A:57:GLN:HB2	1:A:57:GLN:HE21	14	0.62
(1,756)	1:A:57:GLN:HB3	1:A:57:GLN:HE21	14	0.62
(1,756)	1:A:57:GLN:HB3	1:A:57:GLN:HE21	14	0.62
(1,740)	1:A:35:SER:H	1:A:56:THR:HG1	9	0.62
(1,740)	1:A:35:SER:H	1:A:56:THR:HG21	9	0.62
(1,740)	1:A:35:SER:H	1:A:56:THR:HG22	9	0.62
(1,740)	1:A:35:SER:H	1:A:56:THR:HG23	9	0.62
(1,723)	1:A:23:ASP:H	1:A:21:LYS:HA	6	0.62

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,723)	1:A:23:ASP:H	1:A:21:LYS:HA	10	0.62
(1,686)	1:A:74:GLY:H	1:A:69:ASN:HD22	9	0.62
(1,642)	1:A:82:ASN:HA	1:A:82:ASN:HD22	4	0.62
(1,628)	1:A:71:CYS:HB2	1:A:57:GLN:HE22	6	0.62
(1,628)	1:A:71:CYS:HB3	1:A:57:GLN:HE22	6	0.62
(1,622)	1:A:12:ASN:HB2	1:A:12:ASN:HD21	1	0.62
(1,622)	1:A:12:ASN:HB3	1:A:12:ASN:HD21	1	0.62
(1,622)	1:A:12:ASN:HB2	1:A:12:ASN:HD21	2	0.62
(1,622)	1:A:12:ASN:HB3	1:A:12:ASN:HD21	2	0.62
(1,622)	1:A:12:ASN:HB2	1:A:12:ASN:HD21	3	0.62
(1,622)	1:A:12:ASN:HB3	1:A:12:ASN:HD21	3	0.62
(1,622)	1:A:12:ASN:HB2	1:A:12:ASN:HD21	4	0.62
(1,622)	1:A:12:ASN:HB3	1:A:12:ASN:HD21	4	0.62
(1,622)	1:A:12:ASN:HB2	1:A:12:ASN:HD21	5	0.62
(1,622)	1:A:12:ASN:HB3	1:A:12:ASN:HD21	5	0.62
(1,622)	1:A:12:ASN:HB2	1:A:12:ASN:HD21	6	0.62
(1,622)	1:A:12:ASN:HB3	1:A:12:ASN:HD21	6	0.62
(1,622)	1:A:12:ASN:HB2	1:A:12:ASN:HD21	8	0.62
(1,622)	1:A:12:ASN:HB3	1:A:12:ASN:HD21	8	0.62
(1,622)	1:A:12:ASN:HB2	1:A:12:ASN:HD21	10	0.62
(1,622)	1:A:12:ASN:HB3	1:A:12:ASN:HD21	10	0.62
(1,622)	1:A:12:ASN:HB2	1:A:12:ASN:HD21	11	0.62
(1,622)	1:A:12:ASN:HB3	1:A:12:ASN:HD21	11	0.62
(1,622)	1:A:12:ASN:HB2	1:A:12:ASN:HD21	12	0.62
(1,622)	1:A:12:ASN:HB3	1:A:12:ASN:HD21	12	0.62
(1,622)	1:A:12:ASN:HB2	1:A:12:ASN:HD21	13	0.62
(1,622)	1:A:12:ASN:HB3	1:A:12:ASN:HD21	13	0.62
(1,622)	1:A:12:ASN:HB2	1:A:12:ASN:HD21	14	0.62
(1,622)	1:A:12:ASN:HB3	1:A:12:ASN:HD21	14	0.62
(1,622)	1:A:12:ASN:HB2	1:A:12:ASN:HD21	15	0.62
(1,622)	1:A:12:ASN:HB3	1:A:12:ASN:HD21	15	0.62
(1,622)	1:A:12:ASN:HB2	1:A:12:ASN:HD21	16	0.62
(1,622)	1:A:12:ASN:HB3	1:A:12:ASN:HD21	16	0.62
(1,622)	1:A:12:ASN:HB2	1:A:12:ASN:HD21	17	0.62
(1,622)	1:A:12:ASN:HB3	1:A:12:ASN:HD21	17	0.62
(1,622)	1:A:12:ASN:HB2	1:A:12:ASN:HD21	18	0.62
(1,622)	1:A:12:ASN:HB3	1:A:12:ASN:HD21	18	0.62
(1,622)	1:A:12:ASN:HB2	1:A:12:ASN:HD21	20	0.62
(1,622)	1:A:12:ASN:HB3	1:A:12:ASN:HD21	20	0.62
(1,502)	1:A:34:GLU:HG2	1:A:34:GLU:H	14	0.62
(1,502)	1:A:34:GLU:HG3	1:A:34:GLU:H	14	0.62
(1,499)	1:A:33:ASP:HB2	1:A:33:ASP:H	5	0.62

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,499)	1:A:33:ASP:HB3	1:A:33:ASP:H	5	0.62
(1,499)	1:A:33:ASP:HB2	1:A:33:ASP:H	6	0.62
(1,499)	1:A:33:ASP:HB3	1:A:33:ASP:H	6	0.62
(1,492)	1:A:22:CYS:H	1:A:24:GLY:H	3	0.62
(1,491)	1:A:22:CYS:H	1:A:24:GLY:H	3	0.62
(1,391)	1:A:54:HIS:HA	1:A:53:ALA:H	5	0.62
(1,391)	1:A:54:HIS:HA	1:A:53:ALA:H	8	0.62
(1,27)	1:A:118:ASP:H	1:A:117:LEU:H	1	0.62
(1,252)	1:A:82:ASN:HB2	1:A:83:ILE:H	18	0.62
(1,252)	1:A:82:ASN:HB2	1:A:83:ILE:H	18	0.62
(1,252)	1:A:82:ASN:HB3	1:A:83:ILE:H	18	0.62
(1,252)	1:A:82:ASN:HB3	1:A:83:ILE:H	18	0.62
(1,2)	1:A:112:ASP:H	1:A:113:GLY:H	14	0.62
(1,137)	1:A:109:ASP:H	1:A:113:GLY:HA2	6	0.62
(1,137)	1:A:109:ASP:H	1:A:113:GLY:HA3	6	0.62
(2,75)	1:A:107:GLN:HA	1:A:108:ASP:H	7	0.61
(2,75)	1:A:108:ASP:HA	1:A:108:ASP:H	7	0.61
(2,75)	1:A:109:ASP:HA	1:A:108:ASP:H	7	0.61
(2,363)	1:A:49:ILE:HB	1:A:49:ILE:H	1	0.61
(2,363)	1:A:59:ILE:HB	1:A:49:ILE:H	1	0.61
(2,264)	1:A:42:ARG:HB2	1:A:50:SER:H	5	0.61
(2,264)	1:A:42:ARG:HB3	1:A:50:SER:H	5	0.61
(2,264)	1:A:49:ILE:HB	1:A:50:SER:H	5	0.61
(2,264)	1:A:42:ARG:HB2	1:A:50:SER:H	11	0.61
(2,264)	1:A:42:ARG:HB3	1:A:50:SER:H	11	0.61
(2,264)	1:A:49:ILE:HB	1:A:50:SER:H	11	0.61
(2,212)	1:A:88:ASP:H	1:A:86:SER:H	3	0.61
(2,212)	1:A:88:ASP:H	1:A:86:SER:H	9	0.61
(2,212)	1:A:88:ASP:H	1:A:86:SER:H	15	0.61
(2,186)	1:A:64:ARG:HD2	1:A:67:GLY:H	2	0.61
(2,186)	1:A:64:ARG:HD3	1:A:67:GLY:H	2	0.61
(2,186)	1:A:67:GLY:HA2	1:A:67:GLY:H	2	0.61
(2,186)	1:A:67:GLY:HA3	1:A:67:GLY:H	2	0.61
(2,186)	1:A:64:ARG:HD2	1:A:67:GLY:H	3	0.61
(2,186)	1:A:64:ARG:HD3	1:A:67:GLY:H	3	0.61
(2,186)	1:A:67:GLY:HA2	1:A:67:GLY:H	3	0.61
(2,186)	1:A:67:GLY:HA3	1:A:67:GLY:H	3	0.61
(2,186)	1:A:64:ARG:HD2	1:A:67:GLY:H	10	0.61
(2,186)	1:A:64:ARG:HD3	1:A:67:GLY:H	10	0.61
(2,186)	1:A:67:GLY:HA2	1:A:67:GLY:H	10	0.61
(2,186)	1:A:67:GLY:HA3	1:A:67:GLY:H	10	0.61
(2,186)	1:A:64:ARG:HD2	1:A:67:GLY:H	13	0.61

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,186)	1:A:64:ARG:HD3	1:A:67:GLY:H	13	0.61
(2,186)	1:A:67:GLY:HA2	1:A:67:GLY:H	13	0.61
(2,186)	1:A:67:GLY:HA3	1:A:67:GLY:H	13	0.61
(2,186)	1:A:64:ARG:HD2	1:A:67:GLY:H	17	0.61
(2,186)	1:A:64:ARG:HD3	1:A:67:GLY:H	17	0.61
(2,186)	1:A:67:GLY:HA2	1:A:67:GLY:H	17	0.61
(2,186)	1:A:67:GLY:HA3	1:A:67:GLY:H	17	0.61
(2,186)	1:A:64:ARG:HD2	1:A:67:GLY:H	20	0.61
(2,186)	1:A:64:ARG:HD3	1:A:67:GLY:H	20	0.61
(2,186)	1:A:67:GLY:HA2	1:A:67:GLY:H	20	0.61
(2,186)	1:A:67:GLY:HA3	1:A:67:GLY:H	20	0.61
(2,144)	1:A:21:LYS:HB2	1:A:22:CYS:H	14	0.61
(2,144)	1:A:21:LYS:HB3	1:A:22:CYS:H	14	0.61
(2,144)	1:A:21:LYS:HD2	1:A:22:CYS:H	14	0.61
(2,144)	1:A:21:LYS:HD3	1:A:22:CYS:H	14	0.61
(2,144)	1:A:34:GLU:HB2	1:A:22:CYS:H	14	0.61
(2,144)	1:A:21:LYS:HB2	1:A:22:CYS:H	20	0.61
(2,144)	1:A:21:LYS:HB3	1:A:22:CYS:H	20	0.61
(2,144)	1:A:21:LYS:HD2	1:A:22:CYS:H	20	0.61
(2,144)	1:A:21:LYS:HD3	1:A:22:CYS:H	20	0.61
(2,144)	1:A:34:GLU:HB2	1:A:22:CYS:H	20	0.61
(1,824)	1:A:118:ASP:H	1:A:116:GLU:H	10	0.61
(1,813)	1:A:107:GLN:HE21	1:A:108:ASP:HA	2	0.61
(1,80)	1:A:44:CYS:HB2	1:A:45:ARG:H	5	0.61
(1,80)	1:A:44:CYS:HB3	1:A:45:ARG:H	5	0.61
(1,721)	1:A:21:LYS:HG2	1:A:22:CYS:H	8	0.61
(1,721)	1:A:21:LYS:HG3	1:A:22:CYS:H	8	0.61
(1,708)	1:A:44:CYS:HB2	1:A:45:ARG:H	13	0.61
(1,708)	1:A:44:CYS:HB3	1:A:45:ARG:H	13	0.61
(1,700)	1:A:69:ASN:HB2	1:A:69:ASN:H	17	0.61
(1,700)	1:A:69:ASN:HB3	1:A:69:ASN:H	17	0.61
(1,700)	1:A:69:ASN:HB2	1:A:69:ASN:H	19	0.61
(1,700)	1:A:69:ASN:HB3	1:A:69:ASN:H	19	0.61
(1,687)	1:A:69:ASN:HD21	1:A:74:GLY:H	3	0.61
(1,622)	1:A:12:ASN:HB2	1:A:12:ASN:HD21	7	0.61
(1,622)	1:A:12:ASN:HB3	1:A:12:ASN:HD21	7	0.61
(1,622)	1:A:12:ASN:HB2	1:A:12:ASN:HD21	9	0.61
(1,622)	1:A:12:ASN:HB3	1:A:12:ASN:HD21	9	0.61
(1,622)	1:A:12:ASN:HB2	1:A:12:ASN:HD21	19	0.61
(1,622)	1:A:12:ASN:HB3	1:A:12:ASN:HD21	19	0.61
(1,584)	1:A:27:ASP:HB2	1:A:27:ASP:H	16	0.61
(1,584)	1:A:27:ASP:HB3	1:A:27:ASP:H	16	0.61

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,555)	1:A:103:VAL:HG11	1:A:104:CYS:H	14	0.61
(1,555)	1:A:103:VAL:HG12	1:A:104:CYS:H	14	0.61
(1,555)	1:A:103:VAL:HG13	1:A:104:CYS:H	14	0.61
(1,555)	1:A:103:VAL:HG21	1:A:104:CYS:H	14	0.61
(1,555)	1:A:103:VAL:HG22	1:A:104:CYS:H	14	0.61
(1,555)	1:A:103:VAL:HG23	1:A:104:CYS:H	14	0.61
(1,555)	1:A:103:VAL:HG11	1:A:104:CYS:H	18	0.61
(1,555)	1:A:103:VAL:HG12	1:A:104:CYS:H	18	0.61
(1,555)	1:A:103:VAL:HG13	1:A:104:CYS:H	18	0.61
(1,555)	1:A:103:VAL:HG21	1:A:104:CYS:H	18	0.61
(1,555)	1:A:103:VAL:HG22	1:A:104:CYS:H	18	0.61
(1,555)	1:A:103:VAL:HG23	1:A:104:CYS:H	18	0.61
(1,492)	1:A:22:CYS:H	1:A:24:GLY:H	4	0.61
(1,491)	1:A:22:CYS:H	1:A:24:GLY:H	4	0.61
(1,431)	1:A:72:ASP:H	1:A:70:ASP:H	18	0.61
(1,430)	1:A:69:ASN:HB2	1:A:69:ASN:H	4	0.61
(1,430)	1:A:69:ASN:HB3	1:A:69:ASN:H	4	0.61
(1,430)	1:A:69:ASN:HB2	1:A:69:ASN:H	6	0.61
(1,430)	1:A:69:ASN:HB3	1:A:69:ASN:H	6	0.61
(1,391)	1:A:54:HIS:HA	1:A:53:ALA:H	13	0.61
(1,346)	1:A:32:SER:H	1:A:31:GLY:H	19	0.61
(1,27)	1:A:118:ASP:H	1:A:117:LEU:H	2	0.61
(1,27)	1:A:118:ASP:H	1:A:117:LEU:H	8	0.61
(1,27)	1:A:118:ASP:H	1:A:117:LEU:H	10	0.61
(1,252)	1:A:82:ASN:HB2	1:A:83:ILE:H	8	0.61
(1,252)	1:A:82:ASN:HB2	1:A:83:ILE:H	8	0.61
(1,252)	1:A:82:ASN:HB3	1:A:83:ILE:H	8	0.61
(1,252)	1:A:82:ASN:HB3	1:A:83:ILE:H	8	0.61
(2,80)	1:A:41:MET:HA	1:A:56:THR:H	18	0.6
(2,80)	1:A:42:ARG:HA	1:A:56:THR:H	18	0.6
(2,80)	1:A:56:THR:HB	1:A:56:THR:H	18	0.6
(2,75)	1:A:107:GLN:HA	1:A:108:ASP:H	4	0.6
(2,75)	1:A:108:ASP:HA	1:A:108:ASP:H	4	0.6
(2,75)	1:A:109:ASP:HA	1:A:108:ASP:H	4	0.6
(2,390)	1:A:17:PRO:HB2	1:A:19:ARG:H	14	0.6
(2,390)	1:A:17:PRO:HB3	1:A:19:ARG:H	14	0.6
(2,390)	1:A:17:PRO:HG2	1:A:19:ARG:H	14	0.6
(2,390)	1:A:17:PRO:HG3	1:A:19:ARG:H	14	0.6
(2,330)	1:A:92:CYS:HA	1:A:93:SER:H	20	0.6
(2,330)	1:A:111:SER:HG	1:A:93:SER:H	20	0.6
(2,330)	1:A:114:SER:HG	1:A:93:SER:H	20	0.6
(2,281)	1:A:10:CYS:HA	1:A:11:ASN:HD22	10	0.6

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,281)	1:A:11:ASN:HA	1:A:11:ASN:HD22	10	0.6
(2,275)	1:A:43:THR:HG1	1:A:44:CYS:H	3	0.6
(2,275)	1:A:43:THR:HG1	1:A:44:CYS:H	3	0.6
(2,275)	1:A:43:THR:HG21	1:A:44:CYS:H	3	0.6
(2,275)	1:A:43:THR:HG21	1:A:44:CYS:H	3	0.6
(2,275)	1:A:43:THR:HG22	1:A:44:CYS:H	3	0.6
(2,275)	1:A:43:THR:HG22	1:A:44:CYS:H	3	0.6
(2,275)	1:A:43:THR:HG23	1:A:44:CYS:H	3	0.6
(2,275)	1:A:43:THR:HG23	1:A:44:CYS:H	3	0.6
(2,275)	1:A:56:THR:HG21	1:A:44:CYS:H	3	0.6
(2,275)	1:A:56:THR:HG22	1:A:44:CYS:H	3	0.6
(2,275)	1:A:56:THR:HG23	1:A:44:CYS:H	3	0.6
(2,222)	1:A:24:GLY:HA2	1:A:45:ARG:H	17	0.6
(2,222)	1:A:24:GLY:HA3	1:A:45:ARG:H	17	0.6
(2,222)	1:A:45:ARG:HA	1:A:45:ARG:H	17	0.6
(2,208)	1:A:43:THR:HG1	1:A:52:GLY:H	2	0.6
(2,208)	1:A:43:THR:HG1	1:A:52:GLY:H	2	0.6
(2,208)	1:A:43:THR:HG21	1:A:52:GLY:H	2	0.6
(2,208)	1:A:43:THR:HG21	1:A:52:GLY:H	2	0.6
(2,208)	1:A:43:THR:HG22	1:A:52:GLY:H	2	0.6
(2,208)	1:A:43:THR:HG22	1:A:52:GLY:H	2	0.6
(2,208)	1:A:43:THR:HG23	1:A:52:GLY:H	2	0.6
(2,208)	1:A:43:THR:HG23	1:A:52:GLY:H	2	0.6
(2,208)	1:A:53:ALA:HB1	1:A:52:GLY:H	2	0.6
(2,208)	1:A:53:ALA:HB2	1:A:52:GLY:H	2	0.6
(2,208)	1:A:53:ALA:HB3	1:A:52:GLY:H	2	0.6
(2,208)	1:A:56:THR:HG21	1:A:52:GLY:H	2	0.6
(2,208)	1:A:56:THR:HG22	1:A:52:GLY:H	2	0.6
(2,208)	1:A:56:THR:HG23	1:A:52:GLY:H	2	0.6
(2,186)	1:A:64:ARG:HD2	1:A:67:GLY:H	5	0.6
(2,186)	1:A:64:ARG:HD3	1:A:67:GLY:H	5	0.6
(2,186)	1:A:67:GLY:HA2	1:A:67:GLY:H	5	0.6
(2,186)	1:A:67:GLY:HA3	1:A:67:GLY:H	5	0.6
(2,186)	1:A:64:ARG:HD2	1:A:67:GLY:H	7	0.6
(2,186)	1:A:64:ARG:HD3	1:A:67:GLY:H	7	0.6
(2,186)	1:A:67:GLY:HA2	1:A:67:GLY:H	7	0.6
(2,186)	1:A:67:GLY:HA3	1:A:67:GLY:H	7	0.6
(2,186)	1:A:64:ARG:HD2	1:A:67:GLY:H	8	0.6
(2,186)	1:A:64:ARG:HD3	1:A:67:GLY:H	8	0.6
(2,186)	1:A:67:GLY:HA2	1:A:67:GLY:H	8	0.6
(2,186)	1:A:67:GLY:HA3	1:A:67:GLY:H	8	0.6
(2,186)	1:A:64:ARG:HD2	1:A:67:GLY:H	11	0.6

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,186)	1:A:64:ARG:HD3	1:A:67:GLY:H	11	0.6
(2,186)	1:A:67:GLY:HA2	1:A:67:GLY:H	11	0.6
(2,186)	1:A:67:GLY:HA3	1:A:67:GLY:H	11	0.6
(2,186)	1:A:64:ARG:HD2	1:A:67:GLY:H	15	0.6
(2,186)	1:A:64:ARG:HD3	1:A:67:GLY:H	15	0.6
(2,186)	1:A:67:GLY:HA2	1:A:67:GLY:H	15	0.6
(2,186)	1:A:67:GLY:HA3	1:A:67:GLY:H	15	0.6
(2,186)	1:A:64:ARG:HD2	1:A:67:GLY:H	16	0.6
(2,186)	1:A:64:ARG:HD3	1:A:67:GLY:H	16	0.6
(2,186)	1:A:67:GLY:HA2	1:A:67:GLY:H	16	0.6
(2,186)	1:A:67:GLY:HA3	1:A:67:GLY:H	16	0.6
(2,152)	1:A:52:GLY:H	1:A:53:ALA:H	19	0.6
(2,152)	1:A:54:HIS:H	1:A:53:ALA:H	19	0.6
(2,144)	1:A:21:LYS:HB2	1:A:22:CYS:H	15	0.6
(2,144)	1:A:21:LYS:HB3	1:A:22:CYS:H	15	0.6
(2,144)	1:A:21:LYS:HD2	1:A:22:CYS:H	15	0.6
(2,144)	1:A:21:LYS:HD3	1:A:22:CYS:H	15	0.6
(2,144)	1:A:34:GLU:HB2	1:A:22:CYS:H	15	0.6
(1,898)	1:A:57:GLN:HE22	1:A:71:CYS:H	12	0.6
(1,849)	1:A:33:ASP:H	1:A:11:ASN:H	15	0.6
(1,824)	1:A:118:ASP:H	1:A:116:GLU:H	8	0.6
(1,746)	1:A:50:SER:H	1:A:49:ILE:HG12	14	0.6
(1,746)	1:A:50:SER:H	1:A:49:ILE:HG13	14	0.6
(1,723)	1:A:23:ASP:H	1:A:21:LYS:HA	7	0.6
(1,723)	1:A:23:ASP:H	1:A:21:LYS:HA	18	0.6
(1,686)	1:A:74:GLY:H	1:A:69:ASN:HD22	5	0.6
(1,634)	1:A:79:ASN:HD22	1:A:79:ASN:HA	7	0.6
(1,555)	1:A:103:VAL:HG11	1:A:104:CYS:H	11	0.6
(1,555)	1:A:103:VAL:HG12	1:A:104:CYS:H	11	0.6
(1,555)	1:A:103:VAL:HG13	1:A:104:CYS:H	11	0.6
(1,555)	1:A:103:VAL:HG21	1:A:104:CYS:H	11	0.6
(1,555)	1:A:103:VAL:HG22	1:A:104:CYS:H	11	0.6
(1,555)	1:A:103:VAL:HG23	1:A:104:CYS:H	11	0.6
(1,531)	1:A:71:CYS:HB2	1:A:71:CYS:H	20	0.6
(1,531)	1:A:71:CYS:HB3	1:A:71:CYS:H	20	0.6
(1,502)	1:A:34:GLU:HG2	1:A:34:GLU:H	10	0.6
(1,502)	1:A:34:GLU:HG3	1:A:34:GLU:H	10	0.6
(1,502)	1:A:34:GLU:HG2	1:A:34:GLU:H	18	0.6
(1,502)	1:A:34:GLU:HG3	1:A:34:GLU:H	18	0.6
(1,492)	1:A:22:CYS:H	1:A:24:GLY:H	12	0.6
(1,491)	1:A:22:CYS:H	1:A:24:GLY:H	12	0.6
(1,463)	1:A:71:CYS:HB2	1:A:78:GLU:H	15	0.6

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,463)	1:A:71:CYS:HB3	1:A:78:GLU:H	15	0.6
(1,431)	1:A:72:ASP:H	1:A:70:ASP:H	4	0.6
(1,430)	1:A:69:ASN:HB2	1:A:69:ASN:H	10	0.6
(1,430)	1:A:69:ASN:HB3	1:A:69:ASN:H	10	0.6
(1,430)	1:A:69:ASN:HB2	1:A:69:ASN:H	13	0.6
(1,430)	1:A:69:ASN:HB3	1:A:69:ASN:H	13	0.6
(1,430)	1:A:69:ASN:HB2	1:A:69:ASN:H	20	0.6
(1,430)	1:A:69:ASN:HB3	1:A:69:ASN:H	20	0.6
(1,391)	1:A:54:HIS:HA	1:A:53:ALA:H	6	0.6
(1,391)	1:A:54:HIS:HA	1:A:53:ALA:H	7	0.6
(1,27)	1:A:118:ASP:H	1:A:117:LEU:H	3	0.6
(1,27)	1:A:118:ASP:H	1:A:117:LEU:H	16	0.6
(1,212)	1:A:96:ARG:H	1:A:92:CYS:HA	19	0.6
(1,137)	1:A:109:ASP:H	1:A:113:GLY:HA2	3	0.6
(1,137)	1:A:109:ASP:H	1:A:113:GLY:HA3	3	0.6
(1,118)	1:A:115:ASP:H	1:A:113:GLY:H	10	0.6
(2,80)	1:A:41:MET:HA	1:A:56:THR:H	11	0.59
(2,80)	1:A:42:ARG:HA	1:A:56:THR:H	11	0.59
(2,80)	1:A:56:THR:HB	1:A:56:THR:H	11	0.59
(2,390)	1:A:17:PRO:HB2	1:A:19:ARG:H	12	0.59
(2,390)	1:A:17:PRO:HB3	1:A:19:ARG:H	12	0.59
(2,390)	1:A:17:PRO:HG2	1:A:19:ARG:H	12	0.59
(2,390)	1:A:17:PRO:HG3	1:A:19:ARG:H	12	0.59
(2,357)	1:A:69:ASN:HA	1:A:69:ASN:HD21	15	0.59
(2,357)	1:A:70:ASP:HA	1:A:69:ASN:HD21	15	0.59
(2,239)	1:A:64:ARG:HB2	1:A:69:ASN:H	8	0.59
(2,239)	1:A:64:ARG:HB3	1:A:69:ASN:H	8	0.59
(2,239)	1:A:64:ARG:HG2	1:A:69:ASN:H	8	0.59
(2,239)	1:A:64:ARG:HG3	1:A:69:ASN:H	8	0.59
(2,239)	1:A:68:GLU:HB2	1:A:69:ASN:H	8	0.59
(2,239)	1:A:68:GLU:HB3	1:A:69:ASN:H	8	0.59
(2,222)	1:A:24:GLY:HA2	1:A:45:ARG:H	19	0.59
(2,222)	1:A:24:GLY:HA3	1:A:45:ARG:H	19	0.59
(2,222)	1:A:45:ARG:HA	1:A:45:ARG:H	19	0.59
(2,186)	1:A:64:ARG:HD2	1:A:67:GLY:H	4	0.59
(2,186)	1:A:64:ARG:HD3	1:A:67:GLY:H	4	0.59
(2,186)	1:A:67:GLY:HA2	1:A:67:GLY:H	4	0.59
(2,186)	1:A:67:GLY:HA3	1:A:67:GLY:H	4	0.59
(2,186)	1:A:64:ARG:HD2	1:A:67:GLY:H	9	0.59
(2,186)	1:A:64:ARG:HD3	1:A:67:GLY:H	9	0.59
(2,186)	1:A:67:GLY:HA2	1:A:67:GLY:H	9	0.59
(2,186)	1:A:67:GLY:HA3	1:A:67:GLY:H	9	0.59

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,186)	1:A:64:ARG:HD2	1:A:67:GLY:H	12	0.59
(2,186)	1:A:64:ARG:HD3	1:A:67:GLY:H	12	0.59
(2,186)	1:A:67:GLY:HA2	1:A:67:GLY:H	12	0.59
(2,186)	1:A:67:GLY:HA3	1:A:67:GLY:H	12	0.59
(2,186)	1:A:64:ARG:HD2	1:A:67:GLY:H	19	0.59
(2,186)	1:A:64:ARG:HD3	1:A:67:GLY:H	19	0.59
(2,186)	1:A:67:GLY:HA2	1:A:67:GLY:H	19	0.59
(2,186)	1:A:67:GLY:HA3	1:A:67:GLY:H	19	0.59
(2,184)	1:A:16:VAL:HG11	1:A:15:CYS:H	15	0.59
(2,184)	1:A:16:VAL:HG11	1:A:15:CYS:H	15	0.59
(2,184)	1:A:16:VAL:HG11	1:A:15:CYS:H	15	0.59
(2,184)	1:A:16:VAL:HG12	1:A:15:CYS:H	15	0.59
(2,184)	1:A:16:VAL:HG12	1:A:15:CYS:H	15	0.59
(2,184)	1:A:16:VAL:HG12	1:A:15:CYS:H	15	0.59
(2,184)	1:A:16:VAL:HG12	1:A:15:CYS:H	15	0.59
(2,184)	1:A:16:VAL:HG13	1:A:15:CYS:H	15	0.59
(2,184)	1:A:16:VAL:HG13	1:A:15:CYS:H	15	0.59
(2,184)	1:A:16:VAL:HG13	1:A:15:CYS:H	15	0.59
(2,184)	1:A:16:VAL:HG21	1:A:15:CYS:H	15	0.59
(2,184)	1:A:16:VAL:HG21	1:A:15:CYS:H	15	0.59
(2,184)	1:A:16:VAL:HG21	1:A:15:CYS:H	15	0.59
(2,184)	1:A:16:VAL:HG21	1:A:15:CYS:H	15	0.59
(2,184)	1:A:16:VAL:HG22	1:A:15:CYS:H	15	0.59
(2,184)	1:A:16:VAL:HG22	1:A:15:CYS:H	15	0.59
(2,184)	1:A:16:VAL:HG22	1:A:15:CYS:H	15	0.59
(2,184)	1:A:16:VAL:HG22	1:A:15:CYS:H	15	0.59
(2,184)	1:A:16:VAL:HG23	1:A:15:CYS:H	15	0.59
(2,184)	1:A:16:VAL:HG23	1:A:15:CYS:H	15	0.59
(2,184)	1:A:16:VAL:HG23	1:A:15:CYS:H	15	0.59
(2,184)	1:A:16:VAL:HG23	1:A:15:CYS:H	15	0.59
(2,184)	1:A:16:VAL:HG11	1:A:15:CYS:H	20	0.59
(2,184)	1:A:16:VAL:HG11	1:A:15:CYS:H	20	0.59
(2,184)	1:A:16:VAL:HG11	1:A:15:CYS:H	20	0.59
(2,184)	1:A:16:VAL:HG12	1:A:15:CYS:H	20	0.59
(2,184)	1:A:16:VAL:HG12	1:A:15:CYS:H	20	0.59
(2,184)	1:A:16:VAL:HG12	1:A:15:CYS:H	20	0.59
(2,184)	1:A:16:VAL:HG12	1:A:15:CYS:H	20	0.59
(2,184)	1:A:16:VAL:HG13	1:A:15:CYS:H	20	0.59
(2,184)	1:A:16:VAL:HG13	1:A:15:CYS:H	20	0.59
(2,184)	1:A:16:VAL:HG13	1:A:15:CYS:H	20	0.59
(2,184)	1:A:16:VAL:HG21	1:A:15:CYS:H	20	0.59
(2,184)	1:A:16:VAL:HG21	1:A:15:CYS:H	20	0.59
(2,184)	1:A:16:VAL:HG21	1:A:15:CYS:H	20	0.59
(2,184)	1:A:16:VAL:HG21	1:A:15:CYS:H	20	0.59
(2,184)	1:A:16:VAL:HG22	1:A:15:CYS:H	20	0.59
(2,184)	1:A:16:VAL:HG22	1:A:15:CYS:H	20	0.59
(2,184)	1:A:16:VAL:HG22	1:A:15:CYS:H	20	0.59
(2,184)	1:A:16:VAL:HG22	1:A:15:CYS:H	20	0.59
(2,184)	1:A:16:VAL:HG23	1:A:15:CYS:H	20	0.59

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,184)	1:A:16:VAL:HG23	1:A:15:CYS:H	20	0.59
(2,184)	1:A:16:VAL:HG23	1:A:15:CYS:H	20	0.59
(2,152)	1:A:52:GLY:H	1:A:53:ALA:H	13	0.59
(2,152)	1:A:54:HIS:H	1:A:53:ALA:H	13	0.59
(2,144)	1:A:21:LYS:HB2	1:A:22:CYS:H	5	0.59
(2,144)	1:A:21:LYS:HB3	1:A:22:CYS:H	5	0.59
(2,144)	1:A:21:LYS:HD2	1:A:22:CYS:H	5	0.59
(2,144)	1:A:21:LYS:HD3	1:A:22:CYS:H	5	0.59
(2,144)	1:A:34:GLU:HB2	1:A:22:CYS:H	5	0.59
(2,144)	1:A:21:LYS:HB2	1:A:22:CYS:H	7	0.59
(2,144)	1:A:21:LYS:HB3	1:A:22:CYS:H	7	0.59
(2,144)	1:A:21:LYS:HD2	1:A:22:CYS:H	7	0.59
(2,144)	1:A:21:LYS:HD3	1:A:22:CYS:H	7	0.59
(2,144)	1:A:34:GLU:HB2	1:A:22:CYS:H	7	0.59
(2,144)	1:A:21:LYS:HB2	1:A:22:CYS:H	8	0.59
(2,144)	1:A:21:LYS:HB3	1:A:22:CYS:H	8	0.59
(2,144)	1:A:21:LYS:HD2	1:A:22:CYS:H	8	0.59
(2,144)	1:A:21:LYS:HD3	1:A:22:CYS:H	8	0.59
(2,144)	1:A:34:GLU:HB2	1:A:22:CYS:H	8	0.59
(2,144)	1:A:21:LYS:HB2	1:A:22:CYS:H	18	0.59
(2,144)	1:A:21:LYS:HB3	1:A:22:CYS:H	18	0.59
(2,144)	1:A:21:LYS:HD2	1:A:22:CYS:H	18	0.59
(2,144)	1:A:21:LYS:HD3	1:A:22:CYS:H	18	0.59
(2,144)	1:A:34:GLU:HB2	1:A:22:CYS:H	18	0.59
(2,124)	1:A:43:THR:HG1	1:A:57:GLN:H	4	0.59
(2,124)	1:A:43:THR:HG1	1:A:57:GLN:H	4	0.59
(2,124)	1:A:43:THR:HG21	1:A:57:GLN:H	4	0.59
(2,124)	1:A:43:THR:HG21	1:A:57:GLN:H	4	0.59
(2,124)	1:A:43:THR:HG22	1:A:57:GLN:H	4	0.59
(2,124)	1:A:43:THR:HG22	1:A:57:GLN:H	4	0.59
(2,124)	1:A:43:THR:HG23	1:A:57:GLN:H	4	0.59
(2,124)	1:A:43:THR:HG23	1:A:57:GLN:H	4	0.59
(2,124)	1:A:56:THR:HG1	1:A:57:GLN:H	4	0.59
(2,124)	1:A:56:THR:HG21	1:A:57:GLN:H	4	0.59
(2,124)	1:A:56:THR:HG21	1:A:57:GLN:H	4	0.59
(2,124)	1:A:56:THR:HG22	1:A:57:GLN:H	4	0.59
(2,124)	1:A:56:THR:HG22	1:A:57:GLN:H	4	0.59
(2,124)	1:A:56:THR:HG23	1:A:57:GLN:H	4	0.59
(2,124)	1:A:56:THR:HG23	1:A:57:GLN:H	4	0.59
(1,824)	1:A:118:ASP:H	1:A:116:GLU:H	1	0.59
(1,803)	1:A:101:ASN:HD21	1:A:99:SER:H	5	0.59
(1,803)	1:A:101:ASN:HD21	1:A:99:SER:H	19	0.59

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,772)	1:A:68:GLU:H	1:A:64:ARG:H	8	0.59
(1,740)	1:A:35:SER:H	1:A:56:THR:HG1	1	0.59
(1,740)	1:A:35:SER:H	1:A:56:THR:HG21	1	0.59
(1,740)	1:A:35:SER:H	1:A:56:THR:HG22	1	0.59
(1,740)	1:A:35:SER:H	1:A:56:THR:HG23	1	0.59
(1,710)	1:A:8:PHE:H	1:A:21:LYS:HD2	3	0.59
(1,710)	1:A:8:PHE:H	1:A:21:LYS:HD3	3	0.59
(1,688)	1:A:69:ASN:H	1:A:69:ASN:HD22	6	0.59
(1,687)	1:A:69:ASN:HD21	1:A:74:GLY:H	16	0.59
(1,634)	1:A:79:ASN:HD22	1:A:79:ASN:HA	19	0.59
(1,583)	1:A:40:HIS:HA	1:A:38:GLN:H	18	0.59
(1,58)	1:A:66:ASP:H	1:A:65:CYS:H	12	0.59
(1,555)	1:A:103:VAL:HG11	1:A:104:CYS:H	12	0.59
(1,555)	1:A:103:VAL:HG12	1:A:104:CYS:H	12	0.59
(1,555)	1:A:103:VAL:HG13	1:A:104:CYS:H	12	0.59
(1,555)	1:A:103:VAL:HG21	1:A:104:CYS:H	12	0.59
(1,555)	1:A:103:VAL:HG22	1:A:104:CYS:H	12	0.59
(1,555)	1:A:103:VAL:HG23	1:A:104:CYS:H	12	0.59
(1,502)	1:A:34:GLU:HG2	1:A:34:GLU:H	4	0.59
(1,502)	1:A:34:GLU:HG3	1:A:34:GLU:H	4	0.59
(1,502)	1:A:34:GLU:HG2	1:A:34:GLU:H	15	0.59
(1,502)	1:A:34:GLU:HG3	1:A:34:GLU:H	15	0.59
(1,459)	1:A:70:ASP:HA	1:A:76:ASP:H	13	0.59
(1,430)	1:A:69:ASN:HB2	1:A:69:ASN:H	3	0.59
(1,430)	1:A:69:ASN:HB3	1:A:69:ASN:H	3	0.59
(1,430)	1:A:69:ASN:HB2	1:A:69:ASN:H	12	0.59
(1,430)	1:A:69:ASN:HB3	1:A:69:ASN:H	12	0.59
(1,27)	1:A:118:ASP:H	1:A:117:LEU:H	13	0.59
(1,252)	1:A:82:ASN:HB2	1:A:83:ILE:H	20	0.59
(1,252)	1:A:82:ASN:HB2	1:A:83:ILE:H	20	0.59
(1,252)	1:A:82:ASN:HB3	1:A:83:ILE:H	20	0.59
(1,252)	1:A:82:ASN:HB3	1:A:83:ILE:H	20	0.59
(1,212)	1:A:96:ARG:H	1:A:92:CYS:HA	5	0.59
(1,212)	1:A:96:ARG:H	1:A:92:CYS:HA	9	0.59
(1,118)	1:A:115:ASP:H	1:A:113:GLY:H	1	0.59
(2,64)	1:A:45:ARG:HB2	1:A:46:ILE:H	2	0.58
(2,64)	1:A:45:ARG:HB3	1:A:46:ILE:H	2	0.58
(2,64)	1:A:46:ILE:HG12	1:A:46:ILE:H	2	0.58
(2,64)	1:A:46:ILE:HG13	1:A:46:ILE:H	2	0.58
(2,321)	1:A:64:ARG:HB2	1:A:67:GLY:H	12	0.58
(2,321)	1:A:64:ARG:HB3	1:A:67:GLY:H	12	0.58
(2,321)	1:A:64:ARG:HG2	1:A:67:GLY:H	12	0.58

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,321)	1:A:64:ARG:HG3	1:A:67:GLY:H	12	0.58
(2,321)	1:A:68:GLU:HB2	1:A:67:GLY:H	12	0.58
(2,321)	1:A:68:GLU:HB3	1:A:67:GLY:H	12	0.58
(2,321)	1:A:64:ARG:HB2	1:A:67:GLY:H	19	0.58
(2,321)	1:A:64:ARG:HB3	1:A:67:GLY:H	19	0.58
(2,321)	1:A:64:ARG:HG2	1:A:67:GLY:H	19	0.58
(2,321)	1:A:64:ARG:HG3	1:A:67:GLY:H	19	0.58
(2,321)	1:A:68:GLU:HB2	1:A:67:GLY:H	19	0.58
(2,321)	1:A:68:GLU:HB3	1:A:67:GLY:H	19	0.58
(2,281)	1:A:10:CYS:HA	1:A:11:ASN:HD22	14	0.58
(2,281)	1:A:11:ASN:HA	1:A:11:ASN:HD22	14	0.58
(2,281)	1:A:10:CYS:HA	1:A:11:ASN:HD22	15	0.58
(2,281)	1:A:11:ASN:HA	1:A:11:ASN:HD22	15	0.58
(2,264)	1:A:42:ARG:HB2	1:A:50:SER:H	6	0.58
(2,264)	1:A:42:ARG:HB3	1:A:50:SER:H	6	0.58
(2,264)	1:A:49:ILE:HB	1:A:50:SER:H	6	0.58
(2,264)	1:A:42:ARG:HB2	1:A:50:SER:H	13	0.58
(2,264)	1:A:42:ARG:HB3	1:A:50:SER:H	13	0.58
(2,264)	1:A:49:ILE:HB	1:A:50:SER:H	13	0.58
(2,25)	1:A:79:ASN:HD22	1:A:80:CYS:HA	16	0.58
(2,25)	1:A:86:SER:HA	1:A:80:CYS:HA	16	0.58
(2,208)	1:A:43:THR:HG1	1:A:52:GLY:H	11	0.58
(2,208)	1:A:43:THR:HG1	1:A:52:GLY:H	11	0.58
(2,208)	1:A:43:THR:HG21	1:A:52:GLY:H	11	0.58
(2,208)	1:A:43:THR:HG21	1:A:52:GLY:H	11	0.58
(2,208)	1:A:43:THR:HG22	1:A:52:GLY:H	11	0.58
(2,208)	1:A:43:THR:HG22	1:A:52:GLY:H	11	0.58
(2,208)	1:A:43:THR:HG23	1:A:52:GLY:H	11	0.58
(2,208)	1:A:43:THR:HG23	1:A:52:GLY:H	11	0.58
(2,208)	1:A:53:ALA:HB1	1:A:52:GLY:H	11	0.58
(2,208)	1:A:53:ALA:HB2	1:A:52:GLY:H	11	0.58
(2,208)	1:A:53:ALA:HB3	1:A:52:GLY:H	11	0.58
(2,208)	1:A:56:THR:HG21	1:A:52:GLY:H	11	0.58
(2,208)	1:A:56:THR:HG22	1:A:52:GLY:H	11	0.58
(2,208)	1:A:56:THR:HG23	1:A:52:GLY:H	11	0.58
(2,186)	1:A:64:ARG:HD2	1:A:67:GLY:H	1	0.58
(2,186)	1:A:64:ARG:HD3	1:A:67:GLY:H	1	0.58
(2,186)	1:A:67:GLY:HA2	1:A:67:GLY:H	1	0.58
(2,186)	1:A:67:GLY:HA3	1:A:67:GLY:H	1	0.58
(2,186)	1:A:64:ARG:HD2	1:A:67:GLY:H	14	0.58
(2,186)	1:A:64:ARG:HD3	1:A:67:GLY:H	14	0.58
(2,186)	1:A:67:GLY:HA2	1:A:67:GLY:H	14	0.58

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,186)	1:A:67:GLY:HA3	1:A:67:GLY:H	14	0.58
(2,144)	1:A:21:LYS:HB2	1:A:22:CYS:H	1	0.58
(2,144)	1:A:21:LYS:HB3	1:A:22:CYS:H	1	0.58
(2,144)	1:A:21:LYS:HD2	1:A:22:CYS:H	1	0.58
(2,144)	1:A:21:LYS:HD3	1:A:22:CYS:H	1	0.58
(2,144)	1:A:34:GLU:HB2	1:A:22:CYS:H	1	0.58
(1,80)	1:A:44:CYS:HB2	1:A:45:ARG:H	1	0.58
(1,80)	1:A:44:CYS:HB3	1:A:45:ARG:H	1	0.58
(1,783)	1:A:71:CYS:HB2	1:A:74:GLY:H	7	0.58
(1,783)	1:A:71:CYS:HB3	1:A:74:GLY:H	7	0.58
(1,746)	1:A:50:SER:H	1:A:49:ILE:HG12	16	0.58
(1,746)	1:A:50:SER:H	1:A:49:ILE:HG13	16	0.58
(1,723)	1:A:23:ASP:H	1:A:21:LYS:HA	13	0.58
(1,723)	1:A:23:ASP:H	1:A:21:LYS:HA	19	0.58
(1,721)	1:A:21:LYS:HG2	1:A:22:CYS:H	5	0.58
(1,721)	1:A:21:LYS:HG3	1:A:22:CYS:H	5	0.58
(1,693)	1:A:21:LYS:HD2	1:A:21:LYS:H	5	0.58
(1,693)	1:A:21:LYS:HD3	1:A:21:LYS:H	5	0.58
(1,687)	1:A:69:ASN:HD21	1:A:74:GLY:H	11	0.58
(1,634)	1:A:79:ASN:HD22	1:A:79:ASN:HA	3	0.58
(1,587)	1:A:14:GLN:H	1:A:12:ASN:H	15	0.58
(1,58)	1:A:66:ASP:H	1:A:65:CYS:H	19	0.58
(1,543)	1:A:112:ASP:HB2	1:A:114:SER:H	8	0.58
(1,543)	1:A:112:ASP:HB3	1:A:114:SER:H	8	0.58
(1,492)	1:A:22:CYS:H	1:A:24:GLY:H	14	0.58
(1,492)	1:A:22:CYS:H	1:A:24:GLY:H	15	0.58
(1,491)	1:A:22:CYS:H	1:A:24:GLY:H	14	0.58
(1,491)	1:A:22:CYS:H	1:A:24:GLY:H	15	0.58
(1,430)	1:A:69:ASN:HB2	1:A:69:ASN:H	8	0.58
(1,430)	1:A:69:ASN:HB3	1:A:69:ASN:H	8	0.58
(1,430)	1:A:69:ASN:HB2	1:A:69:ASN:H	11	0.58
(1,430)	1:A:69:ASN:HB3	1:A:69:ASN:H	11	0.58
(1,430)	1:A:69:ASN:HB2	1:A:69:ASN:H	16	0.58
(1,430)	1:A:69:ASN:HB3	1:A:69:ASN:H	16	0.58
(1,391)	1:A:54:HIS:HA	1:A:53:ALA:H	17	0.58
(1,371)	1:A:44:CYS:HA	1:A:45:ARG:H	9	0.58
(1,27)	1:A:118:ASP:H	1:A:117:LEU:H	7	0.58
(2,72)	1:A:110:CYS:HB2	1:A:113:GLY:H	8	0.57
(2,72)	1:A:110:CYS:HB3	1:A:113:GLY:H	8	0.57
(2,72)	1:A:112:ASP:HB2	1:A:113:GLY:H	8	0.57
(2,72)	1:A:112:ASP:HB3	1:A:113:GLY:H	8	0.57
(2,62)	1:A:56:THR:HG1	1:A:56:THR:H	8	0.57

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,62)	1:A:56:THR:HG1	1:A:56:THR:H	8	0.57
(2,62)	1:A:56:THR:HG21	1:A:56:THR:H	8	0.57
(2,62)	1:A:56:THR:HG21	1:A:56:THR:H	8	0.57
(2,62)	1:A:56:THR:HG22	1:A:56:THR:H	8	0.57
(2,62)	1:A:56:THR:HG22	1:A:56:THR:H	8	0.57
(2,62)	1:A:56:THR:HG23	1:A:56:THR:H	8	0.57
(2,62)	1:A:56:THR:HG23	1:A:56:THR:H	8	0.57
(2,62)	1:A:56:THR:HG1	1:A:56:THR:H	12	0.57
(2,62)	1:A:56:THR:HG1	1:A:56:THR:H	12	0.57
(2,62)	1:A:56:THR:HG21	1:A:56:THR:H	12	0.57
(2,62)	1:A:56:THR:HG21	1:A:56:THR:H	12	0.57
(2,62)	1:A:56:THR:HG22	1:A:56:THR:H	12	0.57
(2,62)	1:A:56:THR:HG22	1:A:56:THR:H	12	0.57
(2,62)	1:A:56:THR:HG23	1:A:56:THR:H	12	0.57
(2,62)	1:A:56:THR:HG23	1:A:56:THR:H	12	0.57
(2,321)	1:A:64:ARG:HB2	1:A:67:GLY:H	1	0.57
(2,321)	1:A:64:ARG:HB3	1:A:67:GLY:H	1	0.57
(2,321)	1:A:64:ARG:HG2	1:A:67:GLY:H	1	0.57
(2,321)	1:A:64:ARG:HG3	1:A:67:GLY:H	1	0.57
(2,321)	1:A:68:GLU:HB2	1:A:67:GLY:H	1	0.57
(2,321)	1:A:68:GLU:HB3	1:A:67:GLY:H	1	0.57
(2,285)	1:A:109:ASP:HB2	1:A:112:ASP:H	6	0.57
(2,285)	1:A:109:ASP:HB3	1:A:112:ASP:H	6	0.57
(2,285)	1:A:112:ASP:HB2	1:A:112:ASP:H	6	0.57
(2,285)	1:A:112:ASP:HB3	1:A:112:ASP:H	6	0.57
(2,264)	1:A:42:ARG:HB2	1:A:50:SER:H	2	0.57
(2,264)	1:A:42:ARG:HB3	1:A:50:SER:H	2	0.57
(2,264)	1:A:49:ILE:HB	1:A:50:SER:H	2	0.57
(2,264)	1:A:42:ARG:HB2	1:A:50:SER:H	7	0.57
(2,264)	1:A:42:ARG:HB3	1:A:50:SER:H	7	0.57
(2,264)	1:A:49:ILE:HB	1:A:50:SER:H	7	0.57
(2,222)	1:A:24:GLY:HA2	1:A:45:ARG:H	16	0.57
(2,222)	1:A:24:GLY:HA3	1:A:45:ARG:H	16	0.57
(2,222)	1:A:45:ARG:HA	1:A:45:ARG:H	16	0.57
(2,212)	1:A:88:ASP:H	1:A:86:SER:H	1	0.57
(2,212)	1:A:88:ASP:H	1:A:86:SER:H	5	0.57
(2,186)	1:A:64:ARG:HD2	1:A:67:GLY:H	18	0.57
(2,186)	1:A:64:ARG:HD3	1:A:67:GLY:H	18	0.57
(2,186)	1:A:67:GLY:HA2	1:A:67:GLY:H	18	0.57
(2,186)	1:A:67:GLY:HA3	1:A:67:GLY:H	18	0.57
(2,184)	1:A:16:VAL:HG11	1:A:15:CYS:H	1	0.57
(2,184)	1:A:16:VAL:HG11	1:A:15:CYS:H	1	0.57

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,184)	1:A:16:VAL:HG11	1:A:15:CYS:H	1	0.57
(2,184)	1:A:16:VAL:HG12	1:A:15:CYS:H	1	0.57
(2,184)	1:A:16:VAL:HG12	1:A:15:CYS:H	1	0.57
(2,184)	1:A:16:VAL:HG12	1:A:15:CYS:H	1	0.57
(2,184)	1:A:16:VAL:HG13	1:A:15:CYS:H	1	0.57
(2,184)	1:A:16:VAL:HG13	1:A:15:CYS:H	1	0.57
(2,184)	1:A:16:VAL:HG13	1:A:15:CYS:H	1	0.57
(2,184)	1:A:16:VAL:HG21	1:A:15:CYS:H	1	0.57
(2,184)	1:A:16:VAL:HG21	1:A:15:CYS:H	1	0.57
(2,184)	1:A:16:VAL:HG21	1:A:15:CYS:H	1	0.57
(2,184)	1:A:16:VAL:HG22	1:A:15:CYS:H	1	0.57
(2,184)	1:A:16:VAL:HG22	1:A:15:CYS:H	1	0.57
(2,184)	1:A:16:VAL:HG22	1:A:15:CYS:H	1	0.57
(2,184)	1:A:16:VAL:HG23	1:A:15:CYS:H	1	0.57
(2,184)	1:A:16:VAL:HG23	1:A:15:CYS:H	1	0.57
(2,184)	1:A:16:VAL:HG23	1:A:15:CYS:H	1	0.57
(2,177)	1:A:22:CYS:HB2	1:A:44:CYS:H	19	0.57
(2,177)	1:A:22:CYS:HB3	1:A:44:CYS:H	19	0.57
(2,177)	1:A:44:CYS:HB2	1:A:44:CYS:H	19	0.57
(2,177)	1:A:44:CYS:HB3	1:A:44:CYS:H	19	0.57
(2,152)	1:A:52:GLY:H	1:A:53:ALA:H	7	0.57
(2,152)	1:A:54:HIS:H	1:A:53:ALA:H	7	0.57
(2,144)	1:A:21:LYS:HB2	1:A:22:CYS:H	9	0.57
(2,144)	1:A:21:LYS:HB3	1:A:22:CYS:H	9	0.57
(2,144)	1:A:21:LYS:HD2	1:A:22:CYS:H	9	0.57
(2,144)	1:A:21:LYS:HD3	1:A:22:CYS:H	9	0.57
(2,144)	1:A:34:GLU:HB2	1:A:22:CYS:H	9	0.57
(2,144)	1:A:21:LYS:HB2	1:A:22:CYS:H	11	0.57
(2,144)	1:A:21:LYS:HB3	1:A:22:CYS:H	11	0.57
(2,144)	1:A:21:LYS:HD2	1:A:22:CYS:H	11	0.57
(2,144)	1:A:21:LYS:HD3	1:A:22:CYS:H	11	0.57
(2,144)	1:A:34:GLU:HB2	1:A:22:CYS:H	11	0.57
(2,144)	1:A:21:LYS:HB2	1:A:22:CYS:H	16	0.57
(2,144)	1:A:21:LYS:HB3	1:A:22:CYS:H	16	0.57
(2,144)	1:A:21:LYS:HD2	1:A:22:CYS:H	16	0.57
(2,144)	1:A:21:LYS:HD3	1:A:22:CYS:H	16	0.57
(2,144)	1:A:34:GLU:HB2	1:A:22:CYS:H	16	0.57
(1,807)	1:A:98:ILE:HG12	1:A:103:VAL:H	12	0.57
(1,807)	1:A:98:ILE:HG13	1:A:103:VAL:H	12	0.57
(1,772)	1:A:68:GLU:H	1:A:64:ARG:H	12	0.57
(1,772)	1:A:68:GLU:H	1:A:64:ARG:H	15	0.57
(1,750)	1:A:57:GLN:HB2	1:A:52:GLY:H	20	0.57

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,750)	1:A:57:GLN:HB2	1:A:52:GLY:H	20	0.57
(1,750)	1:A:57:GLN:HB3	1:A:52:GLY:H	20	0.57
(1,750)	1:A:57:GLN:HB3	1:A:52:GLY:H	20	0.57
(1,723)	1:A:23:ASP:H	1:A:21:LYS:HA	11	0.57
(1,723)	1:A:23:ASP:H	1:A:21:LYS:HA	14	0.57
(1,723)	1:A:23:ASP:H	1:A:21:LYS:HA	15	0.57
(1,708)	1:A:44:CYS:HB2	1:A:45:ARG:H	2	0.57
(1,708)	1:A:44:CYS:HB3	1:A:45:ARG:H	2	0.57
(1,687)	1:A:69:ASN:HD21	1:A:74:GLY:H	14	0.57
(1,634)	1:A:79:ASN:HD22	1:A:79:ASN:HA	1	0.57
(1,587)	1:A:14:GLN:H	1:A:12:ASN:H	14	0.57
(1,583)	1:A:40:HIS:HA	1:A:38:GLN:H	2	0.57
(1,583)	1:A:40:HIS:HA	1:A:38:GLN:H	14	0.57
(1,517)	1:A:59:ILE:HG12	1:A:59:ILE:H	6	0.57
(1,517)	1:A:59:ILE:HG12	1:A:59:ILE:H	6	0.57
(1,517)	1:A:59:ILE:HG13	1:A:59:ILE:H	6	0.57
(1,517)	1:A:59:ILE:HG13	1:A:59:ILE:H	6	0.57
(1,517)	1:A:59:ILE:HG12	1:A:59:ILE:H	17	0.57
(1,517)	1:A:59:ILE:HG12	1:A:59:ILE:H	17	0.57
(1,517)	1:A:59:ILE:HG13	1:A:59:ILE:H	17	0.57
(1,517)	1:A:59:ILE:HG13	1:A:59:ILE:H	17	0.57
(1,502)	1:A:34:GLU:HG2	1:A:34:GLU:H	3	0.57
(1,502)	1:A:34:GLU:HG3	1:A:34:GLU:H	3	0.57
(1,430)	1:A:69:ASN:HB2	1:A:69:ASN:H	5	0.57
(1,430)	1:A:69:ASN:HB3	1:A:69:ASN:H	5	0.57
(1,430)	1:A:69:ASN:HB2	1:A:69:ASN:H	15	0.57
(1,430)	1:A:69:ASN:HB3	1:A:69:ASN:H	15	0.57
(1,391)	1:A:54:HIS:HA	1:A:53:ALA:H	2	0.57
(1,298)	1:A:14:GLN:H	1:A:11:ASN:H	9	0.57
(1,27)	1:A:118:ASP:H	1:A:117:LEU:H	4	0.57
(1,212)	1:A:96:ARG:H	1:A:92:CYS:HA	11	0.57
(1,2)	1:A:112:ASP:H	1:A:113:GLY:H	13	0.57
(2,390)	1:A:17:PRO:HB2	1:A:19:ARG:H	15	0.56
(2,390)	1:A:17:PRO:HB3	1:A:19:ARG:H	15	0.56
(2,390)	1:A:17:PRO:HG2	1:A:19:ARG:H	15	0.56
(2,390)	1:A:17:PRO:HG3	1:A:19:ARG:H	15	0.56
(2,285)	1:A:109:ASP:HB2	1:A:112:ASP:H	7	0.56
(2,285)	1:A:109:ASP:HB3	1:A:112:ASP:H	7	0.56
(2,285)	1:A:112:ASP:HB2	1:A:112:ASP:H	7	0.56
(2,285)	1:A:112:ASP:HB3	1:A:112:ASP:H	7	0.56
(2,275)	1:A:43:THR:HG1	1:A:44:CYS:H	15	0.56
(2,275)	1:A:43:THR:HG1	1:A:44:CYS:H	15	0.56

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,275)	1:A:43:THR:HG21	1:A:44:CYS:H	15	0.56
(2,275)	1:A:43:THR:HG21	1:A:44:CYS:H	15	0.56
(2,275)	1:A:43:THR:HG22	1:A:44:CYS:H	15	0.56
(2,275)	1:A:43:THR:HG22	1:A:44:CYS:H	15	0.56
(2,275)	1:A:43:THR:HG23	1:A:44:CYS:H	15	0.56
(2,275)	1:A:43:THR:HG23	1:A:44:CYS:H	15	0.56
(2,275)	1:A:56:THR:HG21	1:A:44:CYS:H	15	0.56
(2,275)	1:A:56:THR:HG22	1:A:44:CYS:H	15	0.56
(2,275)	1:A:56:THR:HG23	1:A:44:CYS:H	15	0.56
(2,275)	1:A:43:THR:HG1	1:A:44:CYS:H	17	0.56
(2,275)	1:A:43:THR:HG1	1:A:44:CYS:H	17	0.56
(2,275)	1:A:43:THR:HG21	1:A:44:CYS:H	17	0.56
(2,275)	1:A:43:THR:HG21	1:A:44:CYS:H	17	0.56
(2,275)	1:A:43:THR:HG22	1:A:44:CYS:H	17	0.56
(2,275)	1:A:43:THR:HG22	1:A:44:CYS:H	17	0.56
(2,275)	1:A:43:THR:HG23	1:A:44:CYS:H	17	0.56
(2,275)	1:A:43:THR:HG23	1:A:44:CYS:H	17	0.56
(2,275)	1:A:56:THR:HG21	1:A:44:CYS:H	17	0.56
(2,275)	1:A:56:THR:HG22	1:A:44:CYS:H	17	0.56
(2,275)	1:A:56:THR:HG23	1:A:44:CYS:H	17	0.56
(2,264)	1:A:42:ARG:HB2	1:A:50:SER:H	9	0.56
(2,264)	1:A:42:ARG:HB3	1:A:50:SER:H	9	0.56
(2,264)	1:A:49:ILE:HB	1:A:50:SER:H	9	0.56
(2,241)	1:A:12:ASN:HD22	1:A:12:ASN:HD21	1	0.56
(2,241)	1:A:14:GLN:HE21	1:A:12:ASN:HD21	1	0.56
(2,241)	1:A:12:ASN:HD22	1:A:12:ASN:HD21	2	0.56
(2,241)	1:A:14:GLN:HE21	1:A:12:ASN:HD21	2	0.56
(2,241)	1:A:12:ASN:HD22	1:A:12:ASN:HD21	3	0.56
(2,241)	1:A:14:GLN:HE21	1:A:12:ASN:HD21	3	0.56
(2,241)	1:A:12:ASN:HD22	1:A:12:ASN:HD21	4	0.56
(2,241)	1:A:14:GLN:HE21	1:A:12:ASN:HD21	4	0.56
(2,241)	1:A:12:ASN:HD22	1:A:12:ASN:HD21	5	0.56
(2,241)	1:A:14:GLN:HE21	1:A:12:ASN:HD21	5	0.56
(2,241)	1:A:12:ASN:HD22	1:A:12:ASN:HD21	6	0.56
(2,241)	1:A:14:GLN:HE21	1:A:12:ASN:HD21	6	0.56
(2,241)	1:A:12:ASN:HD22	1:A:12:ASN:HD21	7	0.56
(2,241)	1:A:14:GLN:HE21	1:A:12:ASN:HD21	7	0.56
(2,241)	1:A:12:ASN:HD22	1:A:12:ASN:HD21	8	0.56
(2,241)	1:A:14:GLN:HE21	1:A:12:ASN:HD21	8	0.56
(2,241)	1:A:12:ASN:HD22	1:A:12:ASN:HD21	9	0.56
(2,241)	1:A:14:GLN:HE21	1:A:12:ASN:HD21	9	0.56
(2,241)	1:A:12:ASN:HD22	1:A:12:ASN:HD21	10	0.56

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,241)	1:A:14:GLN:HE21	1:A:12:ASN:HD21	10	0.56
(2,241)	1:A:12:ASN:HD22	1:A:12:ASN:HD21	11	0.56
(2,241)	1:A:14:GLN:HE21	1:A:12:ASN:HD21	11	0.56
(2,241)	1:A:12:ASN:HD22	1:A:12:ASN:HD21	12	0.56
(2,241)	1:A:14:GLN:HE21	1:A:12:ASN:HD21	12	0.56
(2,241)	1:A:12:ASN:HD22	1:A:12:ASN:HD21	13	0.56
(2,241)	1:A:14:GLN:HE21	1:A:12:ASN:HD21	13	0.56
(2,241)	1:A:12:ASN:HD22	1:A:12:ASN:HD21	14	0.56
(2,241)	1:A:14:GLN:HE21	1:A:12:ASN:HD21	14	0.56
(2,241)	1:A:12:ASN:HD22	1:A:12:ASN:HD21	15	0.56
(2,241)	1:A:14:GLN:HE21	1:A:12:ASN:HD21	15	0.56
(2,241)	1:A:12:ASN:HD22	1:A:12:ASN:HD21	16	0.56
(2,241)	1:A:14:GLN:HE21	1:A:12:ASN:HD21	16	0.56
(2,241)	1:A:12:ASN:HD22	1:A:12:ASN:HD21	17	0.56
(2,241)	1:A:14:GLN:HE21	1:A:12:ASN:HD21	17	0.56
(2,241)	1:A:12:ASN:HD22	1:A:12:ASN:HD21	18	0.56
(2,241)	1:A:14:GLN:HE21	1:A:12:ASN:HD21	18	0.56
(2,241)	1:A:12:ASN:HD22	1:A:12:ASN:HD21	20	0.56
(2,241)	1:A:14:GLN:HE21	1:A:12:ASN:HD21	20	0.56
(2,239)	1:A:64:ARG:HB2	1:A:69:ASN:H	7	0.56
(2,239)	1:A:64:ARG:HB3	1:A:69:ASN:H	7	0.56
(2,239)	1:A:64:ARG:HG2	1:A:69:ASN:H	7	0.56
(2,239)	1:A:64:ARG:HG3	1:A:69:ASN:H	7	0.56
(2,239)	1:A:68:GLU:HB2	1:A:69:ASN:H	7	0.56
(2,239)	1:A:68:GLU:HB3	1:A:69:ASN:H	7	0.56
(2,222)	1:A:24:GLY:HA2	1:A:45:ARG:H	20	0.56
(2,222)	1:A:24:GLY:HA3	1:A:45:ARG:H	20	0.56
(2,222)	1:A:45:ARG:HA	1:A:45:ARG:H	20	0.56
(2,207)	1:A:79:ASN:HB2	1:A:79:ASN:HD22	15	0.56
(2,207)	1:A:97:CYS:HB2	1:A:79:ASN:HD22	15	0.56
(2,152)	1:A:52:GLY:H	1:A:53:ALA:H	17	0.56
(2,152)	1:A:54:HIS:H	1:A:53:ALA:H	17	0.56
(2,144)	1:A:21:LYS:HB2	1:A:22:CYS:H	13	0.56
(2,144)	1:A:21:LYS:HB3	1:A:22:CYS:H	13	0.56
(2,144)	1:A:21:LYS:HD2	1:A:22:CYS:H	13	0.56
(2,144)	1:A:21:LYS:HD3	1:A:22:CYS:H	13	0.56
(2,144)	1:A:34:GLU:HB2	1:A:22:CYS:H	13	0.56
(2,11)	1:A:108:ASP:HA	1:A:113:GLY:H	14	0.56
(2,11)	1:A:109:ASP:HA	1:A:113:GLY:H	14	0.56
(2,11)	1:A:110:CYS:HA	1:A:113:GLY:H	14	0.56
(2,11)	1:A:114:SER:HG	1:A:113:GLY:H	14	0.56
(1,898)	1:A:57:GLN:HE22	1:A:71:CYS:H	15	0.56

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,881)	1:A:48:GLU:H	1:A:45:ARG:H	4	0.56
(1,879)	1:A:48:GLU:H	1:A:45:ARG:H	4	0.56
(1,850)	1:A:12:ASN:H	1:A:11:ASN:HD22	2	0.56
(1,740)	1:A:35:SER:H	1:A:56:THR:HG1	12	0.56
(1,740)	1:A:35:SER:H	1:A:56:THR:HG21	12	0.56
(1,740)	1:A:35:SER:H	1:A:56:THR:HG22	12	0.56
(1,740)	1:A:35:SER:H	1:A:56:THR:HG23	12	0.56
(1,723)	1:A:23:ASP:H	1:A:21:LYS:HA	3	0.56
(1,723)	1:A:23:ASP:H	1:A:21:LYS:HA	8	0.56
(1,723)	1:A:23:ASP:H	1:A:21:LYS:HA	9	0.56
(1,710)	1:A:8:PHE:H	1:A:21:LYS:HD2	20	0.56
(1,710)	1:A:8:PHE:H	1:A:21:LYS:HD3	20	0.56
(1,698)	1:A:64:ARG:H	1:A:64:ARG:HG2	15	0.56
(1,698)	1:A:64:ARG:H	1:A:64:ARG:HG3	15	0.56
(1,687)	1:A:69:ASN:HD21	1:A:74:GLY:H	18	0.56
(1,686)	1:A:74:GLY:H	1:A:69:ASN:HD22	15	0.56
(1,58)	1:A:66:ASP:H	1:A:65:CYS:H	3	0.56
(1,58)	1:A:66:ASP:H	1:A:65:CYS:H	4	0.56
(1,58)	1:A:66:ASP:H	1:A:65:CYS:H	16	0.56
(1,58)	1:A:66:ASP:H	1:A:65:CYS:H	20	0.56
(1,555)	1:A:103:VAL:HG11	1:A:104:CYS:H	13	0.56
(1,555)	1:A:103:VAL:HG12	1:A:104:CYS:H	13	0.56
(1,555)	1:A:103:VAL:HG13	1:A:104:CYS:H	13	0.56
(1,555)	1:A:103:VAL:HG21	1:A:104:CYS:H	13	0.56
(1,555)	1:A:103:VAL:HG22	1:A:104:CYS:H	13	0.56
(1,555)	1:A:103:VAL:HG23	1:A:104:CYS:H	13	0.56
(1,555)	1:A:103:VAL:HG11	1:A:104:CYS:H	15	0.56
(1,555)	1:A:103:VAL:HG12	1:A:104:CYS:H	15	0.56
(1,555)	1:A:103:VAL:HG13	1:A:104:CYS:H	15	0.56
(1,555)	1:A:103:VAL:HG21	1:A:104:CYS:H	15	0.56
(1,555)	1:A:103:VAL:HG22	1:A:104:CYS:H	15	0.56
(1,555)	1:A:103:VAL:HG23	1:A:104:CYS:H	15	0.56
(1,555)	1:A:103:VAL:HG11	1:A:104:CYS:H	16	0.56
(1,555)	1:A:103:VAL:HG12	1:A:104:CYS:H	16	0.56
(1,555)	1:A:103:VAL:HG13	1:A:104:CYS:H	16	0.56
(1,555)	1:A:103:VAL:HG21	1:A:104:CYS:H	16	0.56
(1,555)	1:A:103:VAL:HG22	1:A:104:CYS:H	16	0.56
(1,555)	1:A:103:VAL:HG23	1:A:104:CYS:H	16	0.56
(1,543)	1:A:112:ASP:HB2	1:A:114:SER:H	15	0.56
(1,543)	1:A:112:ASP:HB3	1:A:114:SER:H	15	0.56
(1,531)	1:A:71:CYS:HB2	1:A:71:CYS:H	5	0.56
(1,531)	1:A:71:CYS:HB3	1:A:71:CYS:H	5	0.56

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,531)	1:A:71:CYS:HB2	1:A:71:CYS:H	11	0.56
(1,531)	1:A:71:CYS:HB3	1:A:71:CYS:H	11	0.56
(1,502)	1:A:34:GLU:HG2	1:A:34:GLU:H	5	0.56
(1,502)	1:A:34:GLU:HG3	1:A:34:GLU:H	5	0.56
(1,447)	1:A:71:CYS:HA	1:A:74:GLY:H	7	0.56
(1,430)	1:A:69:ASN:HB2	1:A:69:ASN:H	9	0.56
(1,430)	1:A:69:ASN:HB3	1:A:69:ASN:H	9	0.56
(1,371)	1:A:44:CYS:HA	1:A:45:ARG:H	6	0.56
(1,323)	1:A:64:ARG:H	1:A:80:CYS:HB2	1	0.56
(1,323)	1:A:64:ARG:H	1:A:80:CYS:HB3	1	0.56
(1,289)	1:A:8:PHE:HA	1:A:8:PHE:H	11	0.56
(1,289)	1:A:8:PHE:HA	1:A:8:PHE:H	16	0.56
(1,212)	1:A:96:ARG:H	1:A:92:CYS:HA	10	0.56
(1,2)	1:A:112:ASP:H	1:A:113:GLY:H	2	0.56
(4,8)	1:A:8:PHE:O	1:A:16:VAL:H	10	0.55
(2,62)	1:A:56:THR:HG1	1:A:56:THR:H	7	0.55
(2,62)	1:A:56:THR:HG1	1:A:56:THR:H	7	0.55
(2,62)	1:A:56:THR:HG21	1:A:56:THR:H	7	0.55
(2,62)	1:A:56:THR:HG21	1:A:56:THR:H	7	0.55
(2,62)	1:A:56:THR:HG22	1:A:56:THR:H	7	0.55
(2,62)	1:A:56:THR:HG22	1:A:56:THR:H	7	0.55
(2,62)	1:A:56:THR:HG23	1:A:56:THR:H	7	0.55
(2,62)	1:A:56:THR:HG23	1:A:56:THR:H	7	0.55
(2,363)	1:A:49:ILE:HB	1:A:49:ILE:H	15	0.55
(2,363)	1:A:59:ILE:HB	1:A:49:ILE:H	15	0.55
(2,330)	1:A:92:CYS:HA	1:A:93:SER:H	12	0.55
(2,330)	1:A:111:SER:HG	1:A:93:SER:H	12	0.55
(2,330)	1:A:114:SER:HG	1:A:93:SER:H	12	0.55
(2,321)	1:A:64:ARG:HB2	1:A:67:GLY:H	9	0.55
(2,321)	1:A:64:ARG:HB3	1:A:67:GLY:H	9	0.55
(2,321)	1:A:64:ARG:HG2	1:A:67:GLY:H	9	0.55
(2,321)	1:A:64:ARG:HG3	1:A:67:GLY:H	9	0.55
(2,321)	1:A:68:GLU:HB2	1:A:67:GLY:H	9	0.55
(2,321)	1:A:68:GLU:HB3	1:A:67:GLY:H	9	0.55
(2,275)	1:A:43:THR:HG1	1:A:44:CYS:H	6	0.55
(2,275)	1:A:43:THR:HG1	1:A:44:CYS:H	6	0.55
(2,275)	1:A:43:THR:HG21	1:A:44:CYS:H	6	0.55
(2,275)	1:A:43:THR:HG21	1:A:44:CYS:H	6	0.55
(2,275)	1:A:43:THR:HG22	1:A:44:CYS:H	6	0.55
(2,275)	1:A:43:THR:HG22	1:A:44:CYS:H	6	0.55
(2,275)	1:A:43:THR:HG23	1:A:44:CYS:H	6	0.55
(2,275)	1:A:43:THR:HG23	1:A:44:CYS:H	6	0.55

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,275)	1:A:56:THR:HG21	1:A:44:CYS:H	6	0.55
(2,275)	1:A:56:THR:HG22	1:A:44:CYS:H	6	0.55
(2,275)	1:A:56:THR:HG23	1:A:44:CYS:H	6	0.55
(2,275)	1:A:43:THR:HG1	1:A:44:CYS:H	9	0.55
(2,275)	1:A:43:THR:HG1	1:A:44:CYS:H	9	0.55
(2,275)	1:A:43:THR:HG21	1:A:44:CYS:H	9	0.55
(2,275)	1:A:43:THR:HG21	1:A:44:CYS:H	9	0.55
(2,275)	1:A:43:THR:HG22	1:A:44:CYS:H	9	0.55
(2,275)	1:A:43:THR:HG22	1:A:44:CYS:H	9	0.55
(2,275)	1:A:43:THR:HG23	1:A:44:CYS:H	9	0.55
(2,275)	1:A:43:THR:HG23	1:A:44:CYS:H	9	0.55
(2,275)	1:A:56:THR:HG21	1:A:44:CYS:H	9	0.55
(2,275)	1:A:56:THR:HG22	1:A:44:CYS:H	9	0.55
(2,275)	1:A:56:THR:HG23	1:A:44:CYS:H	9	0.55
(2,241)	1:A:12:ASN:HD22	1:A:12:ASN:HD21	19	0.55
(2,241)	1:A:14:GLN:HE21	1:A:12:ASN:HD21	19	0.55
(2,208)	1:A:43:THR:HG1	1:A:52:GLY:H	13	0.55
(2,208)	1:A:43:THR:HG1	1:A:52:GLY:H	13	0.55
(2,208)	1:A:43:THR:HG21	1:A:52:GLY:H	13	0.55
(2,208)	1:A:43:THR:HG21	1:A:52:GLY:H	13	0.55
(2,208)	1:A:43:THR:HG22	1:A:52:GLY:H	13	0.55
(2,208)	1:A:43:THR:HG22	1:A:52:GLY:H	13	0.55
(2,208)	1:A:43:THR:HG23	1:A:52:GLY:H	13	0.55
(2,208)	1:A:43:THR:HG23	1:A:52:GLY:H	13	0.55
(2,208)	1:A:53:ALA:HB1	1:A:52:GLY:H	13	0.55
(2,208)	1:A:53:ALA:HB2	1:A:52:GLY:H	13	0.55
(2,208)	1:A:53:ALA:HB3	1:A:52:GLY:H	13	0.55
(2,208)	1:A:56:THR:HG21	1:A:52:GLY:H	13	0.55
(2,208)	1:A:56:THR:HG22	1:A:52:GLY:H	13	0.55
(2,208)	1:A:56:THR:HG23	1:A:52:GLY:H	13	0.55
(2,208)	1:A:43:THR:HG1	1:A:52:GLY:H	19	0.55
(2,208)	1:A:43:THR:HG1	1:A:52:GLY:H	19	0.55
(2,208)	1:A:43:THR:HG21	1:A:52:GLY:H	19	0.55
(2,208)	1:A:43:THR:HG21	1:A:52:GLY:H	19	0.55
(2,208)	1:A:43:THR:HG22	1:A:52:GLY:H	19	0.55
(2,208)	1:A:43:THR:HG22	1:A:52:GLY:H	19	0.55
(2,208)	1:A:43:THR:HG23	1:A:52:GLY:H	19	0.55
(2,208)	1:A:43:THR:HG23	1:A:52:GLY:H	19	0.55
(2,208)	1:A:53:ALA:HB1	1:A:52:GLY:H	19	0.55
(2,208)	1:A:53:ALA:HB2	1:A:52:GLY:H	19	0.55
(2,208)	1:A:53:ALA:HB3	1:A:52:GLY:H	19	0.55
(2,208)	1:A:56:THR:HG21	1:A:52:GLY:H	19	0.55

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,208)	1:A:56:THR:HG22	1:A:52:GLY:H	19	0.55
(2,208)	1:A:56:THR:HG23	1:A:52:GLY:H	19	0.55
(2,184)	1:A:16:VAL:HG11	1:A:15:CYS:H	5	0.55
(2,184)	1:A:16:VAL:HG11	1:A:15:CYS:H	5	0.55
(2,184)	1:A:16:VAL:HG11	1:A:15:CYS:H	5	0.55
(2,184)	1:A:16:VAL:HG12	1:A:15:CYS:H	5	0.55
(2,184)	1:A:16:VAL:HG12	1:A:15:CYS:H	5	0.55
(2,184)	1:A:16:VAL:HG12	1:A:15:CYS:H	5	0.55
(2,184)	1:A:16:VAL:HG12	1:A:15:CYS:H	5	0.55
(2,184)	1:A:16:VAL:HG13	1:A:15:CYS:H	5	0.55
(2,184)	1:A:16:VAL:HG13	1:A:15:CYS:H	5	0.55
(2,184)	1:A:16:VAL:HG13	1:A:15:CYS:H	5	0.55
(2,184)	1:A:16:VAL:HG21	1:A:15:CYS:H	5	0.55
(2,184)	1:A:16:VAL:HG21	1:A:15:CYS:H	5	0.55
(2,184)	1:A:16:VAL:HG21	1:A:15:CYS:H	5	0.55
(2,184)	1:A:16:VAL:HG22	1:A:15:CYS:H	5	0.55
(2,184)	1:A:16:VAL:HG22	1:A:15:CYS:H	5	0.55
(2,184)	1:A:16:VAL:HG22	1:A:15:CYS:H	5	0.55
(2,184)	1:A:16:VAL:HG23	1:A:15:CYS:H	5	0.55
(2,184)	1:A:16:VAL:HG23	1:A:15:CYS:H	5	0.55
(2,184)	1:A:16:VAL:HG23	1:A:15:CYS:H	5	0.55
(2,152)	1:A:52:GLY:H	1:A:53:ALA:H	6	0.55
(2,152)	1:A:54:HIS:H	1:A:53:ALA:H	6	0.55
(1,877)	1:A:22:CYS:HA	1:A:44:CYS:H	18	0.55
(1,850)	1:A:12:ASN:H	1:A:11:ASN:HD22	7	0.55
(1,803)	1:A:101:ASN:HD21	1:A:99:SER:H	17	0.55
(1,80)	1:A:44:CYS:HB2	1:A:45:ARG:H	17	0.55
(1,80)	1:A:44:CYS:HB3	1:A:45:ARG:H	17	0.55
(1,794)	1:A:82:ASN:HD22	1:A:94:SER:H	17	0.55
(1,756)	1:A:57:GLN:HB2	1:A:57:GLN:HE21	12	0.55
(1,756)	1:A:57:GLN:HB2	1:A:57:GLN:HE21	12	0.55
(1,756)	1:A:57:GLN:HB3	1:A:57:GLN:HE21	12	0.55
(1,756)	1:A:57:GLN:HB3	1:A:57:GLN:HE21	12	0.55
(1,723)	1:A:23:ASP:H	1:A:21:LYS:HA	2	0.55
(1,721)	1:A:21:LYS:HG2	1:A:22:CYS:H	9	0.55
(1,721)	1:A:21:LYS:HG3	1:A:22:CYS:H	9	0.55
(1,721)	1:A:21:LYS:HG2	1:A:22:CYS:H	14	0.55
(1,721)	1:A:21:LYS:HG3	1:A:22:CYS:H	14	0.55
(1,721)	1:A:21:LYS:HG2	1:A:22:CYS:H	20	0.55
(1,721)	1:A:21:LYS:HG3	1:A:22:CYS:H	20	0.55
(1,710)	1:A:8:PHE:H	1:A:21:LYS:HD2	18	0.55
(1,710)	1:A:8:PHE:H	1:A:21:LYS:HD3	18	0.55
(1,688)	1:A:69:ASN:H	1:A:69:ASN:HD22	8	0.55

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,587)	1:A:14:GLN:H	1:A:12:ASN:H	10	0.55
(1,583)	1:A:40:HIS:HA	1:A:38:GLN:H	5	0.55
(1,583)	1:A:40:HIS:HA	1:A:38:GLN:H	6	0.55
(1,58)	1:A:66:ASP:H	1:A:65:CYS:H	1	0.55
(1,58)	1:A:66:ASP:H	1:A:65:CYS:H	5	0.55
(1,58)	1:A:66:ASP:H	1:A:65:CYS:H	7	0.55
(1,58)	1:A:66:ASP:H	1:A:65:CYS:H	11	0.55
(1,58)	1:A:66:ASP:H	1:A:65:CYS:H	18	0.55
(1,555)	1:A:103:VAL:HG11	1:A:104:CYS:H	9	0.55
(1,555)	1:A:103:VAL:HG12	1:A:104:CYS:H	9	0.55
(1,555)	1:A:103:VAL:HG13	1:A:104:CYS:H	9	0.55
(1,555)	1:A:103:VAL:HG21	1:A:104:CYS:H	9	0.55
(1,555)	1:A:103:VAL:HG22	1:A:104:CYS:H	9	0.55
(1,555)	1:A:103:VAL:HG23	1:A:104:CYS:H	9	0.55
(1,534)	1:A:77:GLU:HB2	1:A:77:GLU:H	6	0.55
(1,534)	1:A:77:GLU:HB3	1:A:77:GLU:H	6	0.55
(1,531)	1:A:71:CYS:HB2	1:A:71:CYS:H	9	0.55
(1,531)	1:A:71:CYS:HB3	1:A:71:CYS:H	9	0.55
(1,529)	1:A:59:ILE:HD11	1:A:70:ASP:H	18	0.55
(1,529)	1:A:59:ILE:HD12	1:A:70:ASP:H	18	0.55
(1,529)	1:A:59:ILE:HD13	1:A:70:ASP:H	18	0.55
(1,480)	1:A:10:CYS:HB2	1:A:10:CYS:H	5	0.55
(1,480)	1:A:10:CYS:HB3	1:A:10:CYS:H	5	0.55
(1,480)	1:A:10:CYS:HB2	1:A:10:CYS:H	10	0.55
(1,480)	1:A:10:CYS:HB3	1:A:10:CYS:H	10	0.55
(1,480)	1:A:10:CYS:HB2	1:A:10:CYS:H	14	0.55
(1,480)	1:A:10:CYS:HB3	1:A:10:CYS:H	14	0.55
(1,459)	1:A:70:ASP:HA	1:A:76:ASP:H	15	0.55
(1,447)	1:A:71:CYS:HA	1:A:74:GLY:H	1	0.55
(1,430)	1:A:69:ASN:HB2	1:A:69:ASN:H	1	0.55
(1,430)	1:A:69:ASN:HB3	1:A:69:ASN:H	1	0.55
(1,371)	1:A:44:CYS:HA	1:A:45:ARG:H	12	0.55
(1,371)	1:A:44:CYS:HA	1:A:45:ARG:H	16	0.55
(1,371)	1:A:44:CYS:HA	1:A:45:ARG:H	20	0.55
(1,289)	1:A:8:PHE:HA	1:A:8:PHE:H	14	0.55
(1,2)	1:A:112:ASP:H	1:A:113:GLY:H	10	0.55
(1,134)	1:A:110:CYS:H	1:A:109:ASP:HB2	17	0.55
(1,134)	1:A:110:CYS:H	1:A:109:ASP:HB2	17	0.55
(1,134)	1:A:110:CYS:H	1:A:109:ASP:HB3	17	0.55
(1,134)	1:A:110:CYS:H	1:A:109:ASP:HB3	17	0.55
(2,80)	1:A:41:MET:HA	1:A:56:THR:H	5	0.54
(2,80)	1:A:42:ARG:HA	1:A:56:THR:H	5	0.54

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,80)	1:A:56:THR:HB	1:A:56:THR:H	5	0.54
(2,75)	1:A:107:GLN:HA	1:A:108:ASP:H	17	0.54
(2,75)	1:A:108:ASP:HA	1:A:108:ASP:H	17	0.54
(2,75)	1:A:109:ASP:HA	1:A:108:ASP:H	17	0.54
(2,62)	1:A:56:THR:HG1	1:A:56:THR:H	6	0.54
(2,62)	1:A:56:THR:HG1	1:A:56:THR:H	6	0.54
(2,62)	1:A:56:THR:HG21	1:A:56:THR:H	6	0.54
(2,62)	1:A:56:THR:HG21	1:A:56:THR:H	6	0.54
(2,62)	1:A:56:THR:HG22	1:A:56:THR:H	6	0.54
(2,62)	1:A:56:THR:HG22	1:A:56:THR:H	6	0.54
(2,62)	1:A:56:THR:HG23	1:A:56:THR:H	6	0.54
(2,62)	1:A:56:THR:HG23	1:A:56:THR:H	6	0.54
(2,306)	1:A:71:CYS:HB2	1:A:77:GLU:H	17	0.54
(2,306)	1:A:71:CYS:HB3	1:A:77:GLU:H	17	0.54
(2,306)	1:A:80:CYS:HB2	1:A:77:GLU:H	17	0.54
(2,306)	1:A:80:CYS:HB3	1:A:77:GLU:H	17	0.54
(2,264)	1:A:42:ARG:HB2	1:A:50:SER:H	1	0.54
(2,264)	1:A:42:ARG:HB3	1:A:50:SER:H	1	0.54
(2,264)	1:A:49:ILE:HB	1:A:50:SER:H	1	0.54
(2,264)	1:A:42:ARG:HB2	1:A:50:SER:H	17	0.54
(2,264)	1:A:42:ARG:HB3	1:A:50:SER:H	17	0.54
(2,264)	1:A:49:ILE:HB	1:A:50:SER:H	17	0.54
(2,264)	1:A:42:ARG:HB2	1:A:50:SER:H	20	0.54
(2,264)	1:A:42:ARG:HB3	1:A:50:SER:H	20	0.54
(2,264)	1:A:49:ILE:HB	1:A:50:SER:H	20	0.54
(2,25)	1:A:79:ASN:HD22	1:A:80:CYS:HA	11	0.54
(2,25)	1:A:86:SER:HA	1:A:80:CYS:HA	11	0.54
(2,222)	1:A:24:GLY:HA2	1:A:45:ARG:H	6	0.54
(2,222)	1:A:24:GLY:HA3	1:A:45:ARG:H	6	0.54
(2,222)	1:A:45:ARG:HA	1:A:45:ARG:H	6	0.54
(2,212)	1:A:88:ASP:H	1:A:86:SER:H	7	0.54
(2,207)	1:A:79:ASN:HB2	1:A:79:ASN:HD22	14	0.54
(2,207)	1:A:97:CYS:HB2	1:A:79:ASN:HD22	14	0.54
(1,888)	1:A:49:ILE:HA	1:A:61:VAL:H	8	0.54
(1,888)	1:A:49:ILE:HA	1:A:61:VAL:H	18	0.54
(1,772)	1:A:68:GLU:H	1:A:64:ARG:H	4	0.54
(1,745)	1:A:48:GLU:HB2	1:A:49:ILE:H	11	0.54
(1,745)	1:A:48:GLU:HB3	1:A:49:ILE:H	11	0.54
(1,740)	1:A:35:SER:H	1:A:56:THR:HG1	13	0.54
(1,740)	1:A:35:SER:H	1:A:56:THR:HG21	13	0.54
(1,740)	1:A:35:SER:H	1:A:56:THR:HG22	13	0.54
(1,740)	1:A:35:SER:H	1:A:56:THR:HG23	13	0.54

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,723)	1:A:23:ASP:H	1:A:21:LYS:HA	17	0.54
(1,723)	1:A:23:ASP:H	1:A:21:LYS:HA	20	0.54
(1,710)	1:A:8:PHE:H	1:A:21:LYS:HD2	15	0.54
(1,710)	1:A:8:PHE:H	1:A:21:LYS:HD3	15	0.54
(1,693)	1:A:21:LYS:HD2	1:A:21:LYS:H	6	0.54
(1,693)	1:A:21:LYS:HD3	1:A:21:LYS:H	6	0.54
(1,687)	1:A:69:ASN:HD21	1:A:74:GLY:H	5	0.54
(1,687)	1:A:69:ASN:HD21	1:A:74:GLY:H	10	0.54
(1,634)	1:A:79:ASN:HD22	1:A:79:ASN:HA	5	0.54
(1,634)	1:A:79:ASN:HD22	1:A:79:ASN:HA	9	0.54
(1,608)	1:A:14:GLN:HG2	1:A:14:GLN:HE21	19	0.54
(1,608)	1:A:14:GLN:HG3	1:A:14:GLN:HE21	19	0.54
(1,583)	1:A:40:HIS:HA	1:A:38:GLN:H	12	0.54
(1,583)	1:A:40:HIS:HA	1:A:38:GLN:H	13	0.54
(1,583)	1:A:40:HIS:HA	1:A:38:GLN:H	20	0.54
(1,58)	1:A:66:ASP:H	1:A:65:CYS:H	9	0.54
(1,543)	1:A:112:ASP:HB2	1:A:114:SER:H	11	0.54
(1,543)	1:A:112:ASP:HB3	1:A:114:SER:H	11	0.54
(1,517)	1:A:59:ILE:HG12	1:A:59:ILE:H	8	0.54
(1,517)	1:A:59:ILE:HG12	1:A:59:ILE:H	8	0.54
(1,517)	1:A:59:ILE:HG13	1:A:59:ILE:H	8	0.54
(1,517)	1:A:59:ILE:HG13	1:A:59:ILE:H	8	0.54
(1,517)	1:A:59:ILE:HG12	1:A:59:ILE:H	11	0.54
(1,517)	1:A:59:ILE:HG12	1:A:59:ILE:H	11	0.54
(1,517)	1:A:59:ILE:HG13	1:A:59:ILE:H	11	0.54
(1,517)	1:A:59:ILE:HG13	1:A:59:ILE:H	11	0.54
(1,509)	1:A:46:ILE:HA	1:A:46:ILE:H	5	0.54
(1,509)	1:A:46:ILE:HA	1:A:46:ILE:H	9	0.54
(1,509)	1:A:46:ILE:HA	1:A:46:ILE:H	16	0.54
(1,509)	1:A:46:ILE:HA	1:A:46:ILE:H	17	0.54
(1,509)	1:A:46:ILE:HA	1:A:46:ILE:H	18	0.54
(1,509)	1:A:46:ILE:HA	1:A:46:ILE:H	20	0.54
(1,480)	1:A:10:CYS:HB2	1:A:10:CYS:H	1	0.54
(1,480)	1:A:10:CYS:HB3	1:A:10:CYS:H	1	0.54
(1,480)	1:A:10:CYS:HB2	1:A:10:CYS:H	19	0.54
(1,480)	1:A:10:CYS:HB3	1:A:10:CYS:H	19	0.54
(1,454)	1:A:78:GLU:HG2	1:A:76:ASP:H	4	0.54
(1,454)	1:A:78:GLU:HG3	1:A:76:ASP:H	4	0.54
(1,454)	1:A:78:GLU:HG2	1:A:76:ASP:H	17	0.54
(1,454)	1:A:78:GLU:HG3	1:A:76:ASP:H	17	0.54
(1,446)	1:A:73:SER:H	1:A:74:GLY:H	6	0.54
(1,430)	1:A:69:ASN:HB2	1:A:69:ASN:H	7	0.54

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,430)	1:A:69:ASN:HB3	1:A:69:ASN:H	7	0.54
(1,399)	1:A:54:HIS:H	1:A:53:ALA:HB1	8	0.54
(1,399)	1:A:54:HIS:H	1:A:53:ALA:HB2	8	0.54
(1,399)	1:A:54:HIS:H	1:A:53:ALA:HB3	8	0.54
(1,371)	1:A:44:CYS:HA	1:A:45:ARG:H	4	0.54
(1,371)	1:A:44:CYS:HA	1:A:45:ARG:H	15	0.54
(1,366)	1:A:42:ARG:HB2	1:A:43:THR:H	17	0.54
(1,366)	1:A:42:ARG:HB2	1:A:43:THR:H	17	0.54
(1,366)	1:A:42:ARG:HB3	1:A:43:THR:H	17	0.54
(1,366)	1:A:42:ARG:HB3	1:A:43:THR:H	17	0.54
(1,289)	1:A:8:PHE:HA	1:A:8:PHE:H	7	0.54
(1,289)	1:A:8:PHE:HA	1:A:8:PHE:H	10	0.54
(1,2)	1:A:112:ASP:H	1:A:113:GLY:H	1	0.54
(1,174)	1:A:103:VAL:H	1:A:101:ASN:HB2	7	0.54
(1,174)	1:A:103:VAL:H	1:A:101:ASN:HB3	7	0.54
(1,137)	1:A:109:ASP:H	1:A:113:GLY:HA2	4	0.54
(1,137)	1:A:109:ASP:H	1:A:113:GLY:HA3	4	0.54
(1,137)	1:A:109:ASP:H	1:A:113:GLY:HA2	7	0.54
(1,137)	1:A:109:ASP:H	1:A:113:GLY:HA3	7	0.54
(1,119)	1:A:112:ASP:H	1:A:115:ASP:H	3	0.54
(1,118)	1:A:115:ASP:H	1:A:113:GLY:H	14	0.54
(4,8)	1:A:8:PHE:O	1:A:16:VAL:H	2	0.53
(2,75)	1:A:107:GLN:HA	1:A:108:ASP:H	2	0.53
(2,75)	1:A:108:ASP:HA	1:A:108:ASP:H	2	0.53
(2,75)	1:A:109:ASP:HA	1:A:108:ASP:H	2	0.53
(2,64)	1:A:45:ARG:HB2	1:A:46:ILE:H	19	0.53
(2,64)	1:A:45:ARG:HB3	1:A:46:ILE:H	19	0.53
(2,64)	1:A:46:ILE:HG12	1:A:46:ILE:H	19	0.53
(2,64)	1:A:46:ILE:HG13	1:A:46:ILE:H	19	0.53
(2,62)	1:A:56:THR:HG1	1:A:56:THR:H	1	0.53
(2,62)	1:A:56:THR:HG1	1:A:56:THR:H	1	0.53
(2,62)	1:A:56:THR:HG21	1:A:56:THR:H	1	0.53
(2,62)	1:A:56:THR:HG21	1:A:56:THR:H	1	0.53
(2,62)	1:A:56:THR:HG22	1:A:56:THR:H	1	0.53
(2,62)	1:A:56:THR:HG22	1:A:56:THR:H	1	0.53
(2,62)	1:A:56:THR:HG23	1:A:56:THR:H	1	0.53
(2,62)	1:A:56:THR:HG23	1:A:56:THR:H	1	0.53
(2,390)	1:A:17:PRO:HB2	1:A:19:ARG:H	19	0.53
(2,390)	1:A:17:PRO:HB3	1:A:19:ARG:H	19	0.53
(2,390)	1:A:17:PRO:HG2	1:A:19:ARG:H	19	0.53
(2,390)	1:A:17:PRO:HG3	1:A:19:ARG:H	19	0.53
(2,275)	1:A:43:THR:HG1	1:A:44:CYS:H	20	0.53

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,275)	1:A:43:THR:HG1	1:A:44:CYS:H	20	0.53
(2,275)	1:A:43:THR:HG21	1:A:44:CYS:H	20	0.53
(2,275)	1:A:43:THR:HG21	1:A:44:CYS:H	20	0.53
(2,275)	1:A:43:THR:HG22	1:A:44:CYS:H	20	0.53
(2,275)	1:A:43:THR:HG22	1:A:44:CYS:H	20	0.53
(2,275)	1:A:43:THR:HG23	1:A:44:CYS:H	20	0.53
(2,275)	1:A:43:THR:HG23	1:A:44:CYS:H	20	0.53
(2,275)	1:A:56:THR:HG21	1:A:44:CYS:H	20	0.53
(2,275)	1:A:56:THR:HG22	1:A:44:CYS:H	20	0.53
(2,275)	1:A:56:THR:HG23	1:A:44:CYS:H	20	0.53
(2,264)	1:A:42:ARG:HB2	1:A:50:SER:H	16	0.53
(2,264)	1:A:42:ARG:HB3	1:A:50:SER:H	16	0.53
(2,264)	1:A:49:ILE:HB	1:A:50:SER:H	16	0.53
(2,25)	1:A:79:ASN:HD22	1:A:80:CYS:HA	3	0.53
(2,25)	1:A:86:SER:HA	1:A:80:CYS:HA	3	0.53
(2,222)	1:A:24:GLY:HA2	1:A:45:ARG:H	18	0.53
(2,222)	1:A:24:GLY:HA3	1:A:45:ARG:H	18	0.53
(2,222)	1:A:45:ARG:HA	1:A:45:ARG:H	18	0.53
(2,184)	1:A:16:VAL:HG11	1:A:15:CYS:H	9	0.53
(2,184)	1:A:16:VAL:HG11	1:A:15:CYS:H	9	0.53
(2,184)	1:A:16:VAL:HG11	1:A:15:CYS:H	9	0.53
(2,184)	1:A:16:VAL:HG12	1:A:15:CYS:H	9	0.53
(2,184)	1:A:16:VAL:HG12	1:A:15:CYS:H	9	0.53
(2,184)	1:A:16:VAL:HG12	1:A:15:CYS:H	9	0.53
(2,184)	1:A:16:VAL:HG12	1:A:15:CYS:H	9	0.53
(2,184)	1:A:16:VAL:HG13	1:A:15:CYS:H	9	0.53
(2,184)	1:A:16:VAL:HG13	1:A:15:CYS:H	9	0.53
(2,184)	1:A:16:VAL:HG13	1:A:15:CYS:H	9	0.53
(2,184)	1:A:16:VAL:HG21	1:A:15:CYS:H	9	0.53
(2,184)	1:A:16:VAL:HG21	1:A:15:CYS:H	9	0.53
(2,184)	1:A:16:VAL:HG21	1:A:15:CYS:H	9	0.53
(2,184)	1:A:16:VAL:HG22	1:A:15:CYS:H	9	0.53
(2,184)	1:A:16:VAL:HG22	1:A:15:CYS:H	9	0.53
(2,184)	1:A:16:VAL:HG22	1:A:15:CYS:H	9	0.53
(2,184)	1:A:16:VAL:HG22	1:A:15:CYS:H	9	0.53
(2,184)	1:A:16:VAL:HG23	1:A:15:CYS:H	9	0.53
(2,184)	1:A:16:VAL:HG23	1:A:15:CYS:H	9	0.53
(2,184)	1:A:16:VAL:HG23	1:A:15:CYS:H	9	0.53
(2,152)	1:A:52:GLY:H	1:A:53:ALA:H	2	0.53
(2,152)	1:A:54:HIS:H	1:A:53:ALA:H	2	0.53
(1,923)	1:A:8:PHE:HB2	1:A:16:VAL:HA	16	0.53
(1,850)	1:A:12:ASN:H	1:A:11:ASN:HD22	1	0.53
(1,80)	1:A:44:CYS:HB2	1:A:45:ARG:H	7	0.53
(1,80)	1:A:44:CYS:HB3	1:A:45:ARG:H	7	0.53

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,756)	1:A:57:GLN:HB2	1:A:57:GLN:HE21	19	0.53
(1,756)	1:A:57:GLN:HB2	1:A:57:GLN:HE21	19	0.53
(1,756)	1:A:57:GLN:HB3	1:A:57:GLN:HE21	19	0.53
(1,756)	1:A:57:GLN:HB3	1:A:57:GLN:HE21	19	0.53
(1,746)	1:A:50:SER:H	1:A:49:ILE:HG12	18	0.53
(1,746)	1:A:50:SER:H	1:A:49:ILE:HG13	18	0.53
(1,721)	1:A:21:LYS:HG2	1:A:22:CYS:H	6	0.53
(1,721)	1:A:21:LYS:HG3	1:A:22:CYS:H	6	0.53
(1,721)	1:A:21:LYS:HG2	1:A:22:CYS:H	12	0.53
(1,721)	1:A:21:LYS:HG3	1:A:22:CYS:H	12	0.53
(1,711)	1:A:10:CYS:HB2	1:A:11:ASN:H	11	0.53
(1,711)	1:A:10:CYS:HB3	1:A:11:ASN:H	11	0.53
(1,711)	1:A:10:CYS:HB2	1:A:11:ASN:H	13	0.53
(1,711)	1:A:10:CYS:HB3	1:A:11:ASN:H	13	0.53
(1,687)	1:A:69:ASN:HD21	1:A:74:GLY:H	4	0.53
(1,670)	1:A:107:GLN:HB2	1:A:105:ASN:HD22	11	0.53
(1,670)	1:A:107:GLN:HB2	1:A:105:ASN:HD22	11	0.53
(1,670)	1:A:107:GLN:HB3	1:A:105:ASN:HD22	11	0.53
(1,670)	1:A:107:GLN:HB3	1:A:105:ASN:HD22	11	0.53
(1,642)	1:A:82:ASN:HA	1:A:82:ASN:HD22	10	0.53
(1,634)	1:A:79:ASN:HD22	1:A:79:ASN:HA	6	0.53
(1,634)	1:A:79:ASN:HD22	1:A:79:ASN:HA	10	0.53
(1,634)	1:A:79:ASN:HD22	1:A:79:ASN:HA	11	0.53
(1,634)	1:A:79:ASN:HD22	1:A:79:ASN:HA	13	0.53
(1,587)	1:A:14:GLN:H	1:A:12:ASN:H	4	0.53
(1,587)	1:A:14:GLN:H	1:A:12:ASN:H	6	0.53
(1,58)	1:A:66:ASP:H	1:A:65:CYS:H	10	0.53
(1,58)	1:A:66:ASP:H	1:A:65:CYS:H	14	0.53
(1,531)	1:A:71:CYS:HB2	1:A:71:CYS:H	13	0.53
(1,531)	1:A:71:CYS:HB3	1:A:71:CYS:H	13	0.53
(1,531)	1:A:71:CYS:HB2	1:A:71:CYS:H	16	0.53
(1,531)	1:A:71:CYS:HB3	1:A:71:CYS:H	16	0.53
(1,509)	1:A:46:ILE:HA	1:A:46:ILE:H	1	0.53
(1,509)	1:A:46:ILE:HA	1:A:46:ILE:H	2	0.53
(1,509)	1:A:46:ILE:HA	1:A:46:ILE:H	6	0.53
(1,509)	1:A:46:ILE:HA	1:A:46:ILE:H	8	0.53
(1,509)	1:A:46:ILE:HA	1:A:46:ILE:H	13	0.53
(1,447)	1:A:71:CYS:HA	1:A:74:GLY:H	9	0.53
(1,430)	1:A:69:ASN:HB2	1:A:69:ASN:H	2	0.53
(1,430)	1:A:69:ASN:HB3	1:A:69:ASN:H	2	0.53
(1,366)	1:A:42:ARG:HB2	1:A:43:THR:H	3	0.53
(1,366)	1:A:42:ARG:HB2	1:A:43:THR:H	3	0.53

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,366)	1:A:42:ARG:HB3	1:A:43:THR:H	3	0.53
(1,366)	1:A:42:ARG:HB3	1:A:43:THR:H	3	0.53
(1,289)	1:A:8:PHE:HA	1:A:8:PHE:H	4	0.53
(1,27)	1:A:118:ASP:H	1:A:117:LEU:H	9	0.53
(1,2)	1:A:112:ASP:H	1:A:113:GLY:H	18	0.53
(1,2)	1:A:112:ASP:H	1:A:113:GLY:H	20	0.53
(2,62)	1:A:56:THR:HG1	1:A:56:THR:H	2	0.52
(2,62)	1:A:56:THR:HG1	1:A:56:THR:H	2	0.52
(2,62)	1:A:56:THR:HG21	1:A:56:THR:H	2	0.52
(2,62)	1:A:56:THR:HG21	1:A:56:THR:H	2	0.52
(2,62)	1:A:56:THR:HG22	1:A:56:THR:H	2	0.52
(2,62)	1:A:56:THR:HG22	1:A:56:THR:H	2	0.52
(2,62)	1:A:56:THR:HG23	1:A:56:THR:H	2	0.52
(2,62)	1:A:56:THR:HG23	1:A:56:THR:H	2	0.52
(2,62)	1:A:56:THR:HG1	1:A:56:THR:H	5	0.52
(2,62)	1:A:56:THR:HG1	1:A:56:THR:H	5	0.52
(2,62)	1:A:56:THR:HG21	1:A:56:THR:H	5	0.52
(2,62)	1:A:56:THR:HG21	1:A:56:THR:H	5	0.52
(2,62)	1:A:56:THR:HG22	1:A:56:THR:H	5	0.52
(2,62)	1:A:56:THR:HG22	1:A:56:THR:H	5	0.52
(2,62)	1:A:56:THR:HG23	1:A:56:THR:H	5	0.52
(2,62)	1:A:56:THR:HG23	1:A:56:THR:H	5	0.52
(2,62)	1:A:56:THR:HG1	1:A:56:THR:H	13	0.52
(2,62)	1:A:56:THR:HG1	1:A:56:THR:H	13	0.52
(2,62)	1:A:56:THR:HG21	1:A:56:THR:H	13	0.52
(2,62)	1:A:56:THR:HG21	1:A:56:THR:H	13	0.52
(2,62)	1:A:56:THR:HG22	1:A:56:THR:H	13	0.52
(2,62)	1:A:56:THR:HG22	1:A:56:THR:H	13	0.52
(2,62)	1:A:56:THR:HG23	1:A:56:THR:H	13	0.52
(2,62)	1:A:56:THR:HG23	1:A:56:THR:H	13	0.52
(2,390)	1:A:17:PRO:HB2	1:A:19:ARG:H	7	0.52
(2,390)	1:A:17:PRO:HB3	1:A:19:ARG:H	7	0.52
(2,390)	1:A:17:PRO:HG2	1:A:19:ARG:H	7	0.52
(2,390)	1:A:17:PRO:HG3	1:A:19:ARG:H	7	0.52
(2,390)	1:A:17:PRO:HB2	1:A:19:ARG:H	11	0.52
(2,390)	1:A:17:PRO:HB3	1:A:19:ARG:H	11	0.52
(2,390)	1:A:17:PRO:HG2	1:A:19:ARG:H	11	0.52
(2,390)	1:A:17:PRO:HG3	1:A:19:ARG:H	11	0.52
(2,390)	1:A:17:PRO:HB2	1:A:19:ARG:H	16	0.52
(2,390)	1:A:17:PRO:HB3	1:A:19:ARG:H	16	0.52
(2,390)	1:A:17:PRO:HG2	1:A:19:ARG:H	16	0.52
(2,390)	1:A:17:PRO:HG3	1:A:19:ARG:H	16	0.52

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,302)	1:A:114:SER:HG	1:A:120:ALA:H	11	0.52
(2,302)	1:A:119:CYS:HA	1:A:120:ALA:H	11	0.52
(2,262)	1:A:51:CYS:HB2	1:A:74:GLY:H	7	0.52
(2,262)	1:A:51:CYS:HB3	1:A:74:GLY:H	7	0.52
(2,262)	1:A:71:CYS:HB2	1:A:74:GLY:H	7	0.52
(2,262)	1:A:71:CYS:HB3	1:A:74:GLY:H	7	0.52
(2,223)	1:A:45:ARG:HG2	1:A:45:ARG:H	18	0.52
(2,223)	1:A:45:ARG:HG3	1:A:45:ARG:H	18	0.52
(2,223)	1:A:46:ILE:HB	1:A:45:ARG:H	18	0.52
(2,216)	1:A:49:ILE:HD11	1:A:50:SER:H	8	0.52
(2,216)	1:A:49:ILE:HD12	1:A:50:SER:H	8	0.52
(2,216)	1:A:49:ILE:HD13	1:A:50:SER:H	8	0.52
(2,216)	1:A:49:ILE:HG12	1:A:50:SER:H	8	0.52
(2,216)	1:A:49:ILE:HG13	1:A:50:SER:H	8	0.52
(2,216)	1:A:49:ILE:HG21	1:A:50:SER:H	8	0.52
(2,216)	1:A:49:ILE:HG22	1:A:50:SER:H	8	0.52
(2,216)	1:A:49:ILE:HG23	1:A:50:SER:H	8	0.52
(2,212)	1:A:88:ASP:H	1:A:86:SER:H	11	0.52
(2,208)	1:A:43:THR:HG1	1:A:52:GLY:H	7	0.52
(2,208)	1:A:43:THR:HG1	1:A:52:GLY:H	7	0.52
(2,208)	1:A:43:THR:HG21	1:A:52:GLY:H	7	0.52
(2,208)	1:A:43:THR:HG21	1:A:52:GLY:H	7	0.52
(2,208)	1:A:43:THR:HG22	1:A:52:GLY:H	7	0.52
(2,208)	1:A:43:THR:HG22	1:A:52:GLY:H	7	0.52
(2,208)	1:A:43:THR:HG23	1:A:52:GLY:H	7	0.52
(2,208)	1:A:43:THR:HG23	1:A:52:GLY:H	7	0.52
(2,208)	1:A:53:ALA:HB1	1:A:52:GLY:H	7	0.52
(2,208)	1:A:53:ALA:HB2	1:A:52:GLY:H	7	0.52
(2,208)	1:A:53:ALA:HB3	1:A:52:GLY:H	7	0.52
(2,208)	1:A:56:THR:HG21	1:A:52:GLY:H	7	0.52
(2,208)	1:A:56:THR:HG22	1:A:52:GLY:H	7	0.52
(2,208)	1:A:56:THR:HG23	1:A:52:GLY:H	7	0.52
(2,207)	1:A:79:ASN:HB2	1:A:79:ASN:HD22	18	0.52
(2,207)	1:A:97:CYS:HB2	1:A:79:ASN:HD22	18	0.52
(1,911)	1:A:57:GLN:HE21	1:A:71:CYS:H	2	0.52
(1,819)	1:A:112:ASP:HB2	1:A:115:ASP:H	11	0.52
(1,819)	1:A:112:ASP:HB3	1:A:115:ASP:H	11	0.52
(1,766)	1:A:48:GLU:HB2	1:A:58:CYS:H	8	0.52
(1,766)	1:A:48:GLU:HB3	1:A:58:CYS:H	8	0.52
(1,740)	1:A:35:SER:H	1:A:56:THR:HG1	16	0.52
(1,740)	1:A:35:SER:H	1:A:56:THR:HG21	16	0.52
(1,740)	1:A:35:SER:H	1:A:56:THR:HG22	16	0.52

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,740)	1:A:35:SER:H	1:A:56:THR:HG23	16	0.52
(1,73)	1:A:65:CYS:HB2	1:A:65:CYS:H	5	0.52
(1,73)	1:A:65:CYS:HB3	1:A:65:CYS:H	5	0.52
(1,73)	1:A:65:CYS:HB2	1:A:65:CYS:H	20	0.52
(1,73)	1:A:65:CYS:HB3	1:A:65:CYS:H	20	0.52
(1,710)	1:A:8:PHE:H	1:A:21:LYS:HD2	5	0.52
(1,710)	1:A:8:PHE:H	1:A:21:LYS:HD3	5	0.52
(1,681)	1:A:79:ASN:HD21	1:A:87:PRO:HD2	7	0.52
(1,681)	1:A:79:ASN:HD21	1:A:87:PRO:HD3	7	0.52
(1,608)	1:A:14:GLN:HG2	1:A:14:GLN:HE21	12	0.52
(1,608)	1:A:14:GLN:HG3	1:A:14:GLN:HE21	12	0.52
(1,587)	1:A:14:GLN:H	1:A:12:ASN:H	5	0.52
(1,587)	1:A:14:GLN:H	1:A:12:ASN:H	8	0.52
(1,587)	1:A:14:GLN:H	1:A:12:ASN:H	12	0.52
(1,583)	1:A:40:HIS:HA	1:A:38:GLN:H	7	0.52
(1,555)	1:A:103:VAL:HG11	1:A:104:CYS:H	20	0.52
(1,555)	1:A:103:VAL:HG12	1:A:104:CYS:H	20	0.52
(1,555)	1:A:103:VAL:HG13	1:A:104:CYS:H	20	0.52
(1,555)	1:A:103:VAL:HG21	1:A:104:CYS:H	20	0.52
(1,555)	1:A:103:VAL:HG22	1:A:104:CYS:H	20	0.52
(1,555)	1:A:103:VAL:HG23	1:A:104:CYS:H	20	0.52
(1,551)	1:A:104:CYS:HB2	1:A:104:CYS:H	19	0.52
(1,551)	1:A:104:CYS:HB3	1:A:104:CYS:H	19	0.52
(1,550)	1:A:104:CYS:HB2	1:A:104:CYS:H	19	0.52
(1,550)	1:A:104:CYS:HB3	1:A:104:CYS:H	19	0.52
(1,543)	1:A:112:ASP:HB2	1:A:114:SER:H	12	0.52
(1,543)	1:A:112:ASP:HB3	1:A:114:SER:H	12	0.52
(1,526)	1:A:64:ARG:H	1:A:67:GLY:H	15	0.52
(1,509)	1:A:46:ILE:HA	1:A:46:ILE:H	7	0.52
(1,459)	1:A:70:ASP:HA	1:A:76:ASP:H	8	0.52
(1,366)	1:A:42:ARG:HB2	1:A:43:THR:H	4	0.52
(1,366)	1:A:42:ARG:HB2	1:A:43:THR:H	4	0.52
(1,366)	1:A:42:ARG:HB3	1:A:43:THR:H	4	0.52
(1,366)	1:A:42:ARG:HB3	1:A:43:THR:H	4	0.52
(1,366)	1:A:42:ARG:HB2	1:A:43:THR:H	5	0.52
(1,366)	1:A:42:ARG:HB2	1:A:43:THR:H	5	0.52
(1,366)	1:A:42:ARG:HB3	1:A:43:THR:H	5	0.52
(1,366)	1:A:42:ARG:HB3	1:A:43:THR:H	5	0.52
(1,366)	1:A:42:ARG:HB2	1:A:43:THR:H	9	0.52
(1,366)	1:A:42:ARG:HB2	1:A:43:THR:H	9	0.52
(1,366)	1:A:42:ARG:HB3	1:A:43:THR:H	9	0.52
(1,366)	1:A:42:ARG:HB3	1:A:43:THR:H	9	0.52

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,366)	1:A:42:ARG:HB2	1:A:43:THR:H	16	0.52
(1,366)	1:A:42:ARG:HB2	1:A:43:THR:H	16	0.52
(1,366)	1:A:42:ARG:HB3	1:A:43:THR:H	16	0.52
(1,366)	1:A:42:ARG:HB3	1:A:43:THR:H	16	0.52
(1,298)	1:A:14:GLN:H	1:A:11:ASN:H	6	0.52
(1,298)	1:A:14:GLN:H	1:A:11:ASN:H	12	0.52
(1,289)	1:A:8:PHE:HA	1:A:8:PHE:H	6	0.52
(1,289)	1:A:8:PHE:HA	1:A:8:PHE:H	9	0.52
(1,212)	1:A:96:ARG:H	1:A:92:CYS:HA	12	0.52
(1,2)	1:A:112:ASP:H	1:A:113:GLY:H	11	0.52
(1,2)	1:A:112:ASP:H	1:A:113:GLY:H	12	0.52
(4,8)	1:A:8:PHE:O	1:A:16:VAL:H	11	0.51
(2,98)	1:A:28:CYS:HB2	1:A:11:ASN:H	3	0.51
(2,98)	1:A:28:CYS:HB3	1:A:11:ASN:H	3	0.51
(2,98)	1:A:32:SER:HB2	1:A:11:ASN:H	3	0.51
(2,98)	1:A:32:SER:HB3	1:A:11:ASN:H	3	0.51
(2,76)	1:A:28:CYS:HB2	1:A:32:SER:H	8	0.51
(2,76)	1:A:28:CYS:HB3	1:A:32:SER:H	8	0.51
(2,76)	1:A:29:GLU:HA	1:A:32:SER:H	8	0.51
(2,76)	1:A:32:SER:HA	1:A:32:SER:H	8	0.51
(2,76)	1:A:32:SER:HB2	1:A:32:SER:H	8	0.51
(2,76)	1:A:32:SER:HB3	1:A:32:SER:H	8	0.51
(2,76)	1:A:33:ASP:HA	1:A:32:SER:H	8	0.51
(2,76)	1:A:35:SER:HB2	1:A:32:SER:H	8	0.51
(2,76)	1:A:35:SER:HB3	1:A:32:SER:H	8	0.51
(2,62)	1:A:56:THR:HG1	1:A:56:THR:H	17	0.51
(2,62)	1:A:56:THR:HG1	1:A:56:THR:H	17	0.51
(2,62)	1:A:56:THR:HG21	1:A:56:THR:H	17	0.51
(2,62)	1:A:56:THR:HG21	1:A:56:THR:H	17	0.51
(2,62)	1:A:56:THR:HG22	1:A:56:THR:H	17	0.51
(2,62)	1:A:56:THR:HG22	1:A:56:THR:H	17	0.51
(2,62)	1:A:56:THR:HG23	1:A:56:THR:H	17	0.51
(2,62)	1:A:56:THR:HG23	1:A:56:THR:H	17	0.51
(2,390)	1:A:17:PRO:HB2	1:A:19:ARG:H	5	0.51
(2,390)	1:A:17:PRO:HB3	1:A:19:ARG:H	5	0.51
(2,390)	1:A:17:PRO:HG2	1:A:19:ARG:H	5	0.51
(2,390)	1:A:17:PRO:HG3	1:A:19:ARG:H	5	0.51
(2,390)	1:A:17:PRO:HB2	1:A:19:ARG:H	18	0.51
(2,390)	1:A:17:PRO:HB3	1:A:19:ARG:H	18	0.51
(2,390)	1:A:17:PRO:HG2	1:A:19:ARG:H	18	0.51
(2,390)	1:A:17:PRO:HG3	1:A:19:ARG:H	18	0.51
(2,331)	1:A:2:THR:H	1:A:99:SER:H	19	0.51

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,331)	1:A:3:CYS:H	1:A:99:SER:H	19	0.51
(2,331)	1:A:80:CYS:H	1:A:99:SER:H	19	0.51
(2,331)	1:A:81:GLY:H	1:A:99:SER:H	19	0.51
(2,331)	1:A:101:ASN:H	1:A:99:SER:H	19	0.51
(2,330)	1:A:92:CYS:HA	1:A:93:SER:H	11	0.51
(2,330)	1:A:111:SER:HG	1:A:93:SER:H	11	0.51
(2,330)	1:A:114:SER:HG	1:A:93:SER:H	11	0.51
(2,281)	1:A:10:CYS:HA	1:A:11:ASN:HD22	9	0.51
(2,281)	1:A:11:ASN:HA	1:A:11:ASN:HD22	9	0.51
(2,275)	1:A:43:THR:HG1	1:A:44:CYS:H	16	0.51
(2,275)	1:A:43:THR:HG1	1:A:44:CYS:H	16	0.51
(2,275)	1:A:43:THR:HG21	1:A:44:CYS:H	16	0.51
(2,275)	1:A:43:THR:HG21	1:A:44:CYS:H	16	0.51
(2,275)	1:A:43:THR:HG22	1:A:44:CYS:H	16	0.51
(2,275)	1:A:43:THR:HG22	1:A:44:CYS:H	16	0.51
(2,275)	1:A:43:THR:HG23	1:A:44:CYS:H	16	0.51
(2,275)	1:A:43:THR:HG23	1:A:44:CYS:H	16	0.51
(2,275)	1:A:56:THR:HG21	1:A:44:CYS:H	16	0.51
(2,275)	1:A:56:THR:HG22	1:A:44:CYS:H	16	0.51
(2,275)	1:A:56:THR:HG23	1:A:44:CYS:H	16	0.51
(2,264)	1:A:42:ARG:HB2	1:A:50:SER:H	19	0.51
(2,264)	1:A:42:ARG:HB3	1:A:50:SER:H	19	0.51
(2,264)	1:A:49:ILE:HB	1:A:50:SER:H	19	0.51
(2,25)	1:A:79:ASN:HD22	1:A:80:CYS:HA	5	0.51
(2,25)	1:A:86:SER:HA	1:A:80:CYS:HA	5	0.51
(2,25)	1:A:79:ASN:HD22	1:A:80:CYS:HA	7	0.51
(2,25)	1:A:86:SER:HA	1:A:80:CYS:HA	7	0.51
(2,239)	1:A:64:ARG:HB2	1:A:69:ASN:H	4	0.51
(2,239)	1:A:64:ARG:HB3	1:A:69:ASN:H	4	0.51
(2,239)	1:A:64:ARG:HG2	1:A:69:ASN:H	4	0.51
(2,239)	1:A:64:ARG:HG3	1:A:69:ASN:H	4	0.51
(2,239)	1:A:68:GLU:HB2	1:A:69:ASN:H	4	0.51
(2,239)	1:A:68:GLU:HB3	1:A:69:ASN:H	4	0.51
(2,222)	1:A:24:GLY:HA2	1:A:45:ARG:H	9	0.51
(2,222)	1:A:24:GLY:HA3	1:A:45:ARG:H	9	0.51
(2,222)	1:A:45:ARG:HA	1:A:45:ARG:H	9	0.51
(2,212)	1:A:88:ASP:H	1:A:86:SER:H	2	0.51
(2,212)	1:A:88:ASP:H	1:A:86:SER:H	12	0.51
(2,212)	1:A:88:ASP:H	1:A:86:SER:H	13	0.51
(2,208)	1:A:43:THR:HG1	1:A:52:GLY:H	14	0.51
(2,208)	1:A:43:THR:HG1	1:A:52:GLY:H	14	0.51
(2,208)	1:A:43:THR:HG21	1:A:52:GLY:H	14	0.51

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,208)	1:A:43:THR:HG21	1:A:52:GLY:H	14	0.51
(2,208)	1:A:43:THR:HG22	1:A:52:GLY:H	14	0.51
(2,208)	1:A:43:THR:HG22	1:A:52:GLY:H	14	0.51
(2,208)	1:A:43:THR:HG23	1:A:52:GLY:H	14	0.51
(2,208)	1:A:43:THR:HG23	1:A:52:GLY:H	14	0.51
(2,208)	1:A:53:ALA:HB1	1:A:52:GLY:H	14	0.51
(2,208)	1:A:53:ALA:HB2	1:A:52:GLY:H	14	0.51
(2,208)	1:A:53:ALA:HB3	1:A:52:GLY:H	14	0.51
(2,208)	1:A:56:THR:HG21	1:A:52:GLY:H	14	0.51
(2,208)	1:A:56:THR:HG22	1:A:52:GLY:H	14	0.51
(2,208)	1:A:56:THR:HG23	1:A:52:GLY:H	14	0.51
(2,177)	1:A:22:CYS:HB2	1:A:44:CYS:H	3	0.51
(2,177)	1:A:22:CYS:HB3	1:A:44:CYS:H	3	0.51
(2,177)	1:A:44:CYS:HB2	1:A:44:CYS:H	3	0.51
(2,177)	1:A:44:CYS:HB3	1:A:44:CYS:H	3	0.51
(2,144)	1:A:21:LYS:HB2	1:A:22:CYS:H	4	0.51
(2,144)	1:A:21:LYS:HB3	1:A:22:CYS:H	4	0.51
(2,144)	1:A:21:LYS:HD2	1:A:22:CYS:H	4	0.51
(2,144)	1:A:21:LYS:HD3	1:A:22:CYS:H	4	0.51
(2,144)	1:A:34:GLU:HB2	1:A:22:CYS:H	4	0.51
(2,144)	1:A:21:LYS:HB2	1:A:22:CYS:H	6	0.51
(2,144)	1:A:21:LYS:HB3	1:A:22:CYS:H	6	0.51
(2,144)	1:A:21:LYS:HD2	1:A:22:CYS:H	6	0.51
(2,144)	1:A:21:LYS:HD3	1:A:22:CYS:H	6	0.51
(2,144)	1:A:34:GLU:HB2	1:A:22:CYS:H	6	0.51
(2,144)	1:A:21:LYS:HB2	1:A:22:CYS:H	10	0.51
(2,144)	1:A:21:LYS:HB3	1:A:22:CYS:H	10	0.51
(2,144)	1:A:21:LYS:HD2	1:A:22:CYS:H	10	0.51
(2,144)	1:A:21:LYS:HD3	1:A:22:CYS:H	10	0.51
(2,144)	1:A:34:GLU:HB2	1:A:22:CYS:H	10	0.51
(1,888)	1:A:49:ILE:HA	1:A:61:VAL:H	12	0.51
(1,878)	1:A:48:GLU:HB2	1:A:45:ARG:H	3	0.51
(1,878)	1:A:48:GLU:HB3	1:A:45:ARG:H	3	0.51
(1,856)	1:A:14:GLN:H	1:A:12:ASN:HD22	4	0.51
(1,850)	1:A:12:ASN:H	1:A:11:ASN:HD22	19	0.51
(1,819)	1:A:112:ASP:HB2	1:A:115:ASP:H	18	0.51
(1,819)	1:A:112:ASP:HB3	1:A:115:ASP:H	18	0.51
(1,81)	1:A:28:CYS:HA	1:A:33:ASP:H	7	0.51
(1,80)	1:A:44:CYS:HB2	1:A:45:ARG:H	13	0.51
(1,80)	1:A:44:CYS:HB3	1:A:45:ARG:H	13	0.51
(1,756)	1:A:57:GLN:HB2	1:A:57:GLN:HE21	4	0.51
(1,756)	1:A:57:GLN:HB2	1:A:57:GLN:HE21	4	0.51

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,756)	1:A:57:GLN:HB3	1:A:57:GLN:HE21	4	0.51
(1,756)	1:A:57:GLN:HB3	1:A:57:GLN:HE21	4	0.51
(1,756)	1:A:57:GLN:HB2	1:A:57:GLN:HE21	15	0.51
(1,756)	1:A:57:GLN:HB2	1:A:57:GLN:HE21	15	0.51
(1,756)	1:A:57:GLN:HB3	1:A:57:GLN:HE21	15	0.51
(1,756)	1:A:57:GLN:HB3	1:A:57:GLN:HE21	15	0.51
(1,723)	1:A:23:ASP:H	1:A:21:LYS:HA	1	0.51
(1,721)	1:A:21:LYS:HG2	1:A:22:CYS:H	18	0.51
(1,721)	1:A:21:LYS:HG3	1:A:22:CYS:H	18	0.51
(1,711)	1:A:10:CYS:HB2	1:A:11:ASN:H	20	0.51
(1,711)	1:A:10:CYS:HB3	1:A:11:ASN:H	20	0.51
(1,706)	1:A:45:ARG:HB2	1:A:45:ARG:H	5	0.51
(1,706)	1:A:45:ARG:HB3	1:A:45:ARG:H	5	0.51
(1,635)	1:A:78:GLU:HB2	1:A:79:ASN:HD21	8	0.51
(1,635)	1:A:78:GLU:HB2	1:A:79:ASN:HD21	8	0.51
(1,635)	1:A:78:GLU:HB3	1:A:79:ASN:HD21	8	0.51
(1,635)	1:A:78:GLU:HB3	1:A:79:ASN:HD21	8	0.51
(1,60)	1:A:56:THR:H	1:A:57:GLN:H	1	0.51
(1,586)	1:A:69:ASN:HA	1:A:64:ARG:H	6	0.51
(1,58)	1:A:66:ASP:H	1:A:65:CYS:H	8	0.51
(1,543)	1:A:112:ASP:HB2	1:A:114:SER:H	10	0.51
(1,543)	1:A:112:ASP:HB3	1:A:114:SER:H	10	0.51
(1,517)	1:A:59:ILE:HG12	1:A:59:ILE:H	3	0.51
(1,517)	1:A:59:ILE:HG12	1:A:59:ILE:H	3	0.51
(1,517)	1:A:59:ILE:HG13	1:A:59:ILE:H	3	0.51
(1,517)	1:A:59:ILE:HG13	1:A:59:ILE:H	3	0.51
(1,509)	1:A:46:ILE:HA	1:A:46:ILE:H	19	0.51
(1,486)	1:A:7:ASP:HA	1:A:19:ARG:H	9	0.51
(1,486)	1:A:7:ASP:HA	1:A:19:ARG:H	11	0.51
(1,480)	1:A:10:CYS:HB2	1:A:10:CYS:H	2	0.51
(1,480)	1:A:10:CYS:HB3	1:A:10:CYS:H	2	0.51
(1,480)	1:A:10:CYS:HB2	1:A:10:CYS:H	18	0.51
(1,480)	1:A:10:CYS:HB3	1:A:10:CYS:H	18	0.51
(1,430)	1:A:69:ASN:HB2	1:A:69:ASN:H	17	0.51
(1,430)	1:A:69:ASN:HB3	1:A:69:ASN:H	17	0.51
(1,430)	1:A:69:ASN:HB2	1:A:69:ASN:H	19	0.51
(1,430)	1:A:69:ASN:HB3	1:A:69:ASN:H	19	0.51
(1,371)	1:A:44:CYS:HA	1:A:45:ARG:H	11	0.51
(1,366)	1:A:42:ARG:HB2	1:A:43:THR:H	11	0.51
(1,366)	1:A:42:ARG:HB2	1:A:43:THR:H	11	0.51
(1,366)	1:A:42:ARG:HB3	1:A:43:THR:H	11	0.51
(1,366)	1:A:42:ARG:HB3	1:A:43:THR:H	11	0.51

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,359)	1:A:40:HIS:H	1:A:40:HIS:HB2	10	0.51
(1,359)	1:A:40:HIS:H	1:A:40:HIS:HB3	10	0.51
(1,359)	1:A:40:HIS:H	1:A:40:HIS:HB2	16	0.51
(1,359)	1:A:40:HIS:H	1:A:40:HIS:HB3	16	0.51
(1,289)	1:A:8:PHE:HA	1:A:8:PHE:H	12	0.51
(1,27)	1:A:118:ASP:H	1:A:117:LEU:H	6	0.51
(1,140)	1:A:108:ASP:H	1:A:108:ASP:HB2	1	0.51
(1,140)	1:A:108:ASP:H	1:A:108:ASP:HB3	1	0.51
(1,118)	1:A:115:ASP:H	1:A:113:GLY:H	15	0.51
(2,390)	1:A:17:PRO:HB2	1:A:19:ARG:H	2	0.5
(2,390)	1:A:17:PRO:HB3	1:A:19:ARG:H	2	0.5
(2,390)	1:A:17:PRO:HG2	1:A:19:ARG:H	2	0.5
(2,390)	1:A:17:PRO:HG3	1:A:19:ARG:H	2	0.5
(2,330)	1:A:92:CYS:HA	1:A:93:SER:H	13	0.5
(2,330)	1:A:111:SER:HG	1:A:93:SER:H	13	0.5
(2,330)	1:A:114:SER:HG	1:A:93:SER:H	13	0.5
(2,323)	1:A:64:ARG:HG2	1:A:68:GLU:H	15	0.5
(2,323)	1:A:64:ARG:HG3	1:A:68:GLU:H	15	0.5
(2,323)	1:A:68:GLU:HG3	1:A:68:GLU:H	15	0.5
(2,321)	1:A:64:ARG:HB2	1:A:67:GLY:H	16	0.5
(2,321)	1:A:64:ARG:HB3	1:A:67:GLY:H	16	0.5
(2,321)	1:A:64:ARG:HG2	1:A:67:GLY:H	16	0.5
(2,321)	1:A:64:ARG:HG3	1:A:67:GLY:H	16	0.5
(2,321)	1:A:68:GLU:HB2	1:A:67:GLY:H	16	0.5
(2,321)	1:A:68:GLU:HB3	1:A:67:GLY:H	16	0.5
(2,276)	1:A:42:ARG:HA	1:A:57:GLN:H	12	0.5
(2,276)	1:A:43:THR:HA	1:A:57:GLN:H	12	0.5
(2,276)	1:A:56:THR:HB	1:A:57:GLN:H	12	0.5
(2,275)	1:A:43:THR:HG1	1:A:44:CYS:H	1	0.5
(2,275)	1:A:43:THR:HG1	1:A:44:CYS:H	1	0.5
(2,275)	1:A:43:THR:HG21	1:A:44:CYS:H	1	0.5
(2,275)	1:A:43:THR:HG21	1:A:44:CYS:H	1	0.5
(2,275)	1:A:43:THR:HG22	1:A:44:CYS:H	1	0.5
(2,275)	1:A:43:THR:HG22	1:A:44:CYS:H	1	0.5
(2,275)	1:A:43:THR:HG23	1:A:44:CYS:H	1	0.5
(2,275)	1:A:43:THR:HG23	1:A:44:CYS:H	1	0.5
(2,275)	1:A:56:THR:HG21	1:A:44:CYS:H	1	0.5
(2,275)	1:A:56:THR:HG22	1:A:44:CYS:H	1	0.5
(2,275)	1:A:56:THR:HG23	1:A:44:CYS:H	1	0.5
(2,275)	1:A:43:THR:HG1	1:A:44:CYS:H	4	0.5
(2,275)	1:A:43:THR:HG1	1:A:44:CYS:H	4	0.5
(2,275)	1:A:43:THR:HG21	1:A:44:CYS:H	4	0.5

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,275)	1:A:43:THR:HG21	1:A:44:CYS:H	4	0.5
(2,275)	1:A:43:THR:HG22	1:A:44:CYS:H	4	0.5
(2,275)	1:A:43:THR:HG22	1:A:44:CYS:H	4	0.5
(2,275)	1:A:43:THR:HG23	1:A:44:CYS:H	4	0.5
(2,275)	1:A:43:THR:HG23	1:A:44:CYS:H	4	0.5
(2,275)	1:A:56:THR:HG21	1:A:44:CYS:H	4	0.5
(2,275)	1:A:56:THR:HG22	1:A:44:CYS:H	4	0.5
(2,275)	1:A:56:THR:HG23	1:A:44:CYS:H	4	0.5
(2,275)	1:A:43:THR:HG1	1:A:44:CYS:H	7	0.5
(2,275)	1:A:43:THR:HG1	1:A:44:CYS:H	7	0.5
(2,275)	1:A:43:THR:HG21	1:A:44:CYS:H	7	0.5
(2,275)	1:A:43:THR:HG21	1:A:44:CYS:H	7	0.5
(2,275)	1:A:43:THR:HG22	1:A:44:CYS:H	7	0.5
(2,275)	1:A:43:THR:HG22	1:A:44:CYS:H	7	0.5
(2,275)	1:A:43:THR:HG23	1:A:44:CYS:H	7	0.5
(2,275)	1:A:43:THR:HG23	1:A:44:CYS:H	7	0.5
(2,275)	1:A:56:THR:HG21	1:A:44:CYS:H	7	0.5
(2,275)	1:A:56:THR:HG22	1:A:44:CYS:H	7	0.5
(2,275)	1:A:56:THR:HG23	1:A:44:CYS:H	7	0.5
(2,264)	1:A:42:ARG:HB2	1:A:50:SER:H	14	0.5
(2,264)	1:A:42:ARG:HB3	1:A:50:SER:H	14	0.5
(2,264)	1:A:49:ILE:HB	1:A:50:SER:H	14	0.5
(2,25)	1:A:79:ASN:HD22	1:A:80:CYS:HA	12	0.5
(2,25)	1:A:86:SER:HA	1:A:80:CYS:HA	12	0.5
(2,239)	1:A:64:ARG:HB2	1:A:69:ASN:H	17	0.5
(2,239)	1:A:64:ARG:HB3	1:A:69:ASN:H	17	0.5
(2,239)	1:A:64:ARG:HG2	1:A:69:ASN:H	17	0.5
(2,239)	1:A:64:ARG:HG3	1:A:69:ASN:H	17	0.5
(2,239)	1:A:68:GLU:HB2	1:A:69:ASN:H	17	0.5
(2,239)	1:A:68:GLU:HB3	1:A:69:ASN:H	17	0.5
(2,222)	1:A:24:GLY:HA2	1:A:45:ARG:H	5	0.5
(2,222)	1:A:24:GLY:HA3	1:A:45:ARG:H	5	0.5
(2,222)	1:A:45:ARG:HA	1:A:45:ARG:H	5	0.5
(2,216)	1:A:49:ILE:HD11	1:A:50:SER:H	14	0.5
(2,216)	1:A:49:ILE:HD12	1:A:50:SER:H	14	0.5
(2,216)	1:A:49:ILE:HD13	1:A:50:SER:H	14	0.5
(2,216)	1:A:49:ILE:HG12	1:A:50:SER:H	14	0.5
(2,216)	1:A:49:ILE:HG13	1:A:50:SER:H	14	0.5
(2,216)	1:A:49:ILE:HG21	1:A:50:SER:H	14	0.5
(2,216)	1:A:49:ILE:HG22	1:A:50:SER:H	14	0.5
(2,216)	1:A:49:ILE:HG23	1:A:50:SER:H	14	0.5
(2,212)	1:A:88:ASP:H	1:A:86:SER:H	4	0.5

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,207)	1:A:79:ASN:HB2	1:A:79:ASN:HD22	2	0.5
(2,207)	1:A:97:CYS:HB2	1:A:79:ASN:HD22	2	0.5
(2,144)	1:A:21:LYS:HB2	1:A:22:CYS:H	12	0.5
(2,144)	1:A:21:LYS:HB3	1:A:22:CYS:H	12	0.5
(2,144)	1:A:21:LYS:HD2	1:A:22:CYS:H	12	0.5
(2,144)	1:A:21:LYS:HD3	1:A:22:CYS:H	12	0.5
(2,144)	1:A:34:GLU:HB2	1:A:22:CYS:H	12	0.5
(2,114)	1:A:16:VAL:HG11	1:A:16:VAL:H	11	0.5
(2,114)	1:A:16:VAL:HG12	1:A:16:VAL:H	11	0.5
(2,114)	1:A:16:VAL:HG13	1:A:16:VAL:H	11	0.5
(2,114)	1:A:16:VAL:HG21	1:A:16:VAL:H	11	0.5
(2,114)	1:A:16:VAL:HG21	1:A:16:VAL:H	11	0.5
(2,114)	1:A:16:VAL:HG22	1:A:16:VAL:H	11	0.5
(2,114)	1:A:16:VAL:HG22	1:A:16:VAL:H	11	0.5
(2,114)	1:A:16:VAL:HG23	1:A:16:VAL:H	11	0.5
(2,114)	1:A:16:VAL:HG23	1:A:16:VAL:H	11	0.5
(2,11)	1:A:108:ASP:HA	1:A:113:GLY:H	12	0.5
(2,11)	1:A:109:ASP:HA	1:A:113:GLY:H	12	0.5
(2,11)	1:A:110:CYS:HA	1:A:113:GLY:H	12	0.5
(2,11)	1:A:114:SER:HG	1:A:113:GLY:H	12	0.5
(2,11)	1:A:108:ASP:HA	1:A:113:GLY:H	15	0.5
(2,11)	1:A:109:ASP:HA	1:A:113:GLY:H	15	0.5
(2,11)	1:A:110:CYS:HA	1:A:113:GLY:H	15	0.5
(2,11)	1:A:114:SER:HG	1:A:113:GLY:H	15	0.5
(1,890)	1:A:81:GLY:HA2	1:A:63:TRP:HE1	6	0.5
(1,890)	1:A:81:GLY:HA2	1:A:63:TRP:HE1	6	0.5
(1,890)	1:A:81:GLY:HA3	1:A:63:TRP:HE1	6	0.5
(1,890)	1:A:81:GLY:HA3	1:A:63:TRP:HE1	6	0.5
(1,888)	1:A:49:ILE:HA	1:A:61:VAL:H	3	0.5
(1,888)	1:A:49:ILE:HA	1:A:61:VAL:H	19	0.5
(1,862)	1:A:21:LYS:HE2	1:A:19:ARG:H	9	0.5
(1,862)	1:A:21:LYS:HE3	1:A:19:ARG:H	9	0.5
(1,85)	1:A:21:LYS:HG2	1:A:22:CYS:H	10	0.5
(1,85)	1:A:21:LYS:HG3	1:A:22:CYS:H	10	0.5
(1,85)	1:A:21:LYS:HG2	1:A:22:CYS:H	11	0.5
(1,85)	1:A:21:LYS:HG3	1:A:22:CYS:H	11	0.5
(1,849)	1:A:33:ASP:H	1:A:11:ASN:H	19	0.5
(1,819)	1:A:112:ASP:HB2	1:A:115:ASP:H	15	0.5
(1,819)	1:A:112:ASP:HB3	1:A:115:ASP:H	15	0.5
(1,807)	1:A:98:ILE:HG12	1:A:103:VAL:H	18	0.5
(1,807)	1:A:98:ILE:HG13	1:A:103:VAL:H	18	0.5
(1,806)	1:A:101:ASN:HD21	1:A:102:PHE:H	2	0.5

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,801)	1:A:102:PHE:HB2	1:A:98:ILE:H	10	0.5
(1,801)	1:A:102:PHE:HB3	1:A:98:ILE:H	10	0.5
(1,799)	1:A:85:CYS:HA	1:A:97:CYS:H	9	0.5
(1,786)	1:A:71:CYS:H	1:A:76:ASP:H	10	0.5
(1,772)	1:A:68:GLU:H	1:A:64:ARG:H	10	0.5
(1,740)	1:A:35:SER:H	1:A:56:THR:HG1	7	0.5
(1,740)	1:A:35:SER:H	1:A:56:THR:HG21	7	0.5
(1,740)	1:A:35:SER:H	1:A:56:THR:HG22	7	0.5
(1,740)	1:A:35:SER:H	1:A:56:THR:HG23	7	0.5
(1,73)	1:A:65:CYS:HB2	1:A:65:CYS:H	16	0.5
(1,73)	1:A:65:CYS:HB3	1:A:65:CYS:H	16	0.5
(1,723)	1:A:23:ASP:H	1:A:21:LYS:HA	5	0.5
(1,721)	1:A:21:LYS:HG2	1:A:22:CYS:H	3	0.5
(1,721)	1:A:21:LYS:HG3	1:A:22:CYS:H	3	0.5
(1,711)	1:A:10:CYS:HB2	1:A:11:ASN:H	16	0.5
(1,711)	1:A:10:CYS:HB3	1:A:11:ASN:H	16	0.5
(1,706)	1:A:45:ARG:HB2	1:A:45:ARG:H	16	0.5
(1,706)	1:A:45:ARG:HB3	1:A:45:ARG:H	16	0.5
(1,693)	1:A:21:LYS:HD2	1:A:21:LYS:H	16	0.5
(1,693)	1:A:21:LYS:HD3	1:A:21:LYS:H	16	0.5
(1,693)	1:A:21:LYS:HD2	1:A:21:LYS:H	17	0.5
(1,693)	1:A:21:LYS:HD3	1:A:21:LYS:H	17	0.5
(1,667)	1:A:107:GLN:HG2	1:A:105:ASN:HD22	17	0.5
(1,667)	1:A:107:GLN:HG2	1:A:105:ASN:HD22	17	0.5
(1,667)	1:A:107:GLN:HG3	1:A:105:ASN:HD22	17	0.5
(1,667)	1:A:107:GLN:HG3	1:A:105:ASN:HD22	17	0.5
(1,654)	1:A:107:GLN:HB2	1:A:107:GLN:HE22	11	0.5
(1,654)	1:A:107:GLN:HB2	1:A:107:GLN:HE22	11	0.5
(1,654)	1:A:107:GLN:HB3	1:A:107:GLN:HE22	11	0.5
(1,654)	1:A:107:GLN:HB3	1:A:107:GLN:HE22	11	0.5
(1,654)	1:A:107:GLN:HB2	1:A:107:GLN:HE22	13	0.5
(1,654)	1:A:107:GLN:HB2	1:A:107:GLN:HE22	13	0.5
(1,654)	1:A:107:GLN:HB3	1:A:107:GLN:HE22	13	0.5
(1,654)	1:A:107:GLN:HB3	1:A:107:GLN:HE22	13	0.5
(1,642)	1:A:82:ASN:HA	1:A:82:ASN:HD22	8	0.5
(1,636)	1:A:78:GLU:HB2	1:A:79:ASN:HD22	12	0.5
(1,636)	1:A:78:GLU:HB2	1:A:79:ASN:HD22	12	0.5
(1,636)	1:A:78:GLU:HB3	1:A:79:ASN:HD22	12	0.5
(1,636)	1:A:78:GLU:HB3	1:A:79:ASN:HD22	12	0.5
(1,634)	1:A:79:ASN:HD22	1:A:79:ASN:HA	4	0.5
(1,608)	1:A:14:GLN:HG2	1:A:14:GLN:HE21	7	0.5
(1,608)	1:A:14:GLN:HG3	1:A:14:GLN:HE21	7	0.5

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,608)	1:A:14:GLN:HG2	1:A:14:GLN:HE21	16	0.5
(1,608)	1:A:14:GLN:HG3	1:A:14:GLN:HE21	16	0.5
(1,587)	1:A:14:GLN:H	1:A:12:ASN:H	3	0.5
(1,587)	1:A:14:GLN:H	1:A:12:ASN:H	18	0.5
(1,583)	1:A:40:HIS:HA	1:A:38:GLN:H	11	0.5
(1,58)	1:A:66:ASP:H	1:A:65:CYS:H	15	0.5
(1,531)	1:A:71:CYS:HB2	1:A:71:CYS:H	1	0.5
(1,531)	1:A:71:CYS:HB3	1:A:71:CYS:H	1	0.5
(1,531)	1:A:71:CYS:HB2	1:A:71:CYS:H	3	0.5
(1,531)	1:A:71:CYS:HB3	1:A:71:CYS:H	3	0.5
(1,517)	1:A:59:ILE:HG12	1:A:59:ILE:H	13	0.5
(1,517)	1:A:59:ILE:HG12	1:A:59:ILE:H	13	0.5
(1,517)	1:A:59:ILE:HG13	1:A:59:ILE:H	13	0.5
(1,517)	1:A:59:ILE:HG13	1:A:59:ILE:H	13	0.5
(1,509)	1:A:46:ILE:HA	1:A:46:ILE:H	11	0.5
(1,486)	1:A:7:ASP:HA	1:A:19:ARG:H	10	0.5
(1,480)	1:A:10:CYS:HB2	1:A:10:CYS:H	3	0.5
(1,480)	1:A:10:CYS:HB3	1:A:10:CYS:H	3	0.5
(1,480)	1:A:10:CYS:HB2	1:A:10:CYS:H	6	0.5
(1,480)	1:A:10:CYS:HB3	1:A:10:CYS:H	6	0.5
(1,480)	1:A:10:CYS:HB2	1:A:10:CYS:H	8	0.5
(1,480)	1:A:10:CYS:HB3	1:A:10:CYS:H	8	0.5
(1,480)	1:A:10:CYS:HB2	1:A:10:CYS:H	15	0.5
(1,480)	1:A:10:CYS:HB3	1:A:10:CYS:H	15	0.5
(1,371)	1:A:44:CYS:HA	1:A:45:ARG:H	18	0.5
(1,359)	1:A:40:HIS:H	1:A:40:HIS:HB2	1	0.5
(1,359)	1:A:40:HIS:H	1:A:40:HIS:HB3	1	0.5
(1,359)	1:A:40:HIS:H	1:A:40:HIS:HB2	4	0.5
(1,359)	1:A:40:HIS:H	1:A:40:HIS:HB3	4	0.5
(1,359)	1:A:40:HIS:H	1:A:40:HIS:HB2	5	0.5
(1,359)	1:A:40:HIS:H	1:A:40:HIS:HB3	5	0.5
(1,359)	1:A:40:HIS:H	1:A:40:HIS:HB2	9	0.5
(1,359)	1:A:40:HIS:H	1:A:40:HIS:HB3	9	0.5
(1,346)	1:A:32:SER:H	1:A:31:GLY:H	12	0.5
(1,323)	1:A:64:ARG:H	1:A:80:CYS:HB2	12	0.5
(1,323)	1:A:64:ARG:H	1:A:80:CYS:HB3	12	0.5
(1,27)	1:A:118:ASP:H	1:A:117:LEU:H	20	0.5
(1,2)	1:A:112:ASP:H	1:A:113:GLY:H	8	0.5
(1,2)	1:A:112:ASP:H	1:A:113:GLY:H	15	0.5
(1,140)	1:A:108:ASP:H	1:A:108:ASP:HB2	10	0.5
(1,140)	1:A:108:ASP:H	1:A:108:ASP:HB3	10	0.5
(1,118)	1:A:115:ASP:H	1:A:113:GLY:H	20	0.5

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(4,8)	1:A:8:PHE:O	1:A:16:VAL:H	13	0.49
(2,98)	1:A:28:CYS:HB2	1:A:11:ASN:H	18	0.49
(2,98)	1:A:28:CYS:HB3	1:A:11:ASN:H	18	0.49
(2,98)	1:A:32:SER:HB2	1:A:11:ASN:H	18	0.49
(2,98)	1:A:32:SER:HB3	1:A:11:ASN:H	18	0.49
(2,64)	1:A:45:ARG:HB2	1:A:46:ILE:H	5	0.49
(2,64)	1:A:45:ARG:HB3	1:A:46:ILE:H	5	0.49
(2,64)	1:A:46:ILE:HG12	1:A:46:ILE:H	5	0.49
(2,64)	1:A:46:ILE:HG13	1:A:46:ILE:H	5	0.49
(2,390)	1:A:17:PRO:HB2	1:A:19:ARG:H	1	0.49
(2,390)	1:A:17:PRO:HB3	1:A:19:ARG:H	1	0.49
(2,390)	1:A:17:PRO:HG2	1:A:19:ARG:H	1	0.49
(2,390)	1:A:17:PRO:HG3	1:A:19:ARG:H	1	0.49
(2,363)	1:A:49:ILE:HB	1:A:49:ILE:H	8	0.49
(2,363)	1:A:59:ILE:HB	1:A:49:ILE:H	8	0.49
(2,342)	1:A:17:PRO:HB2	1:A:20:TRP:HE1	12	0.49
(2,342)	1:A:17:PRO:HB3	1:A:20:TRP:HE1	12	0.49
(2,342)	1:A:19:ARG:HB2	1:A:20:TRP:HE1	12	0.49
(2,342)	1:A:19:ARG:HB3	1:A:20:TRP:HE1	12	0.49
(2,342)	1:A:17:PRO:HB2	1:A:20:TRP:HE1	15	0.49
(2,342)	1:A:17:PRO:HB3	1:A:20:TRP:HE1	15	0.49
(2,342)	1:A:19:ARG:HB2	1:A:20:TRP:HE1	15	0.49
(2,342)	1:A:19:ARG:HB3	1:A:20:TRP:HE1	15	0.49
(2,341)	1:A:78:GLU:HG2	1:A:78:GLU:H	1	0.49
(2,341)	1:A:78:GLU:HG3	1:A:78:GLU:H	1	0.49
(2,341)	1:A:87:PRO:HB2	1:A:78:GLU:H	1	0.49
(2,341)	1:A:87:PRO:HB3	1:A:78:GLU:H	1	0.49
(2,341)	1:A:78:GLU:HG2	1:A:78:GLU:H	20	0.49
(2,341)	1:A:78:GLU:HG3	1:A:78:GLU:H	20	0.49
(2,341)	1:A:87:PRO:HB2	1:A:78:GLU:H	20	0.49
(2,341)	1:A:87:PRO:HB3	1:A:78:GLU:H	20	0.49
(2,321)	1:A:64:ARG:HB2	1:A:67:GLY:H	5	0.49
(2,321)	1:A:64:ARG:HB3	1:A:67:GLY:H	5	0.49
(2,321)	1:A:64:ARG:HG2	1:A:67:GLY:H	5	0.49
(2,321)	1:A:64:ARG:HG3	1:A:67:GLY:H	5	0.49
(2,321)	1:A:68:GLU:HB2	1:A:67:GLY:H	5	0.49
(2,321)	1:A:68:GLU:HB3	1:A:67:GLY:H	5	0.49
(2,321)	1:A:64:ARG:HB2	1:A:67:GLY:H	7	0.49
(2,321)	1:A:64:ARG:HB3	1:A:67:GLY:H	7	0.49
(2,321)	1:A:64:ARG:HG2	1:A:67:GLY:H	7	0.49
(2,321)	1:A:64:ARG:HG3	1:A:67:GLY:H	7	0.49
(2,321)	1:A:68:GLU:HB2	1:A:67:GLY:H	7	0.49

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,321)	1:A:68:GLU:HB3	1:A:67:GLY:H	7	0.49
(2,285)	1:A:109:ASP:HB2	1:A:112:ASP:H	13	0.49
(2,285)	1:A:109:ASP:HB3	1:A:112:ASP:H	13	0.49
(2,285)	1:A:112:ASP:HB2	1:A:112:ASP:H	13	0.49
(2,285)	1:A:112:ASP:HB3	1:A:112:ASP:H	13	0.49
(2,276)	1:A:42:ARG:HA	1:A:57:GLN:H	4	0.49
(2,276)	1:A:43:THR:HA	1:A:57:GLN:H	4	0.49
(2,276)	1:A:56:THR:HB	1:A:57:GLN:H	4	0.49
(2,25)	1:A:79:ASN:HD22	1:A:80:CYS:HA	20	0.49
(2,25)	1:A:86:SER:HA	1:A:80:CYS:HA	20	0.49
(2,223)	1:A:45:ARG:HG2	1:A:45:ARG:H	6	0.49
(2,223)	1:A:45:ARG:HG3	1:A:45:ARG:H	6	0.49
(2,223)	1:A:46:ILE:HB	1:A:45:ARG:H	6	0.49
(2,207)	1:A:79:ASN:HB2	1:A:79:ASN:HD22	12	0.49
(2,207)	1:A:97:CYS:HB2	1:A:79:ASN:HD22	12	0.49
(2,207)	1:A:79:ASN:HB2	1:A:79:ASN:HD22	17	0.49
(2,207)	1:A:97:CYS:HB2	1:A:79:ASN:HD22	17	0.49
(1,97)	1:A:98:ILE:HD11	1:A:99:SER:H	3	0.49
(1,97)	1:A:98:ILE:HD12	1:A:99:SER:H	3	0.49
(1,97)	1:A:98:ILE:HD13	1:A:99:SER:H	3	0.49
(1,923)	1:A:8:PHE:HB2	1:A:16:VAL:HA	14	0.49
(1,909)	1:A:43:THR:HG1	1:A:46:ILE:H	3	0.49
(1,909)	1:A:43:THR:HG21	1:A:46:ILE:H	3	0.49
(1,909)	1:A:43:THR:HG22	1:A:46:ILE:H	3	0.49
(1,909)	1:A:43:THR:HG23	1:A:46:ILE:H	3	0.49
(1,896)	1:A:64:ARG:H	1:A:66:ASP:H	15	0.49
(1,888)	1:A:49:ILE:HA	1:A:61:VAL:H	4	0.49
(1,878)	1:A:48:GLU:HB2	1:A:45:ARG:H	19	0.49
(1,878)	1:A:48:GLU:HB3	1:A:45:ARG:H	19	0.49
(1,859)	1:A:3:CYS:HB2	1:A:18:SER:H	12	0.49
(1,859)	1:A:3:CYS:HB3	1:A:18:SER:H	12	0.49
(1,856)	1:A:14:GLN:H	1:A:12:ASN:HD22	18	0.49
(1,850)	1:A:12:ASN:H	1:A:11:ASN:HD22	13	0.49
(1,819)	1:A:112:ASP:HB2	1:A:115:ASP:H	12	0.49
(1,819)	1:A:112:ASP:HB3	1:A:115:ASP:H	12	0.49
(1,799)	1:A:85:CYS:HA	1:A:97:CYS:H	5	0.49
(1,772)	1:A:68:GLU:H	1:A:64:ARG:H	14	0.49
(1,766)	1:A:48:GLU:HB2	1:A:58:CYS:H	2	0.49
(1,766)	1:A:48:GLU:HB3	1:A:58:CYS:H	2	0.49
(1,73)	1:A:65:CYS:HB2	1:A:65:CYS:H	1	0.49
(1,73)	1:A:65:CYS:HB3	1:A:65:CYS:H	1	0.49
(1,721)	1:A:21:LYS:HG2	1:A:22:CYS:H	4	0.49

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,721)	1:A:21:LYS:HG3	1:A:22:CYS:H	4	0.49
(1,721)	1:A:21:LYS:HG2	1:A:22:CYS:H	15	0.49
(1,721)	1:A:21:LYS:HG3	1:A:22:CYS:H	15	0.49
(1,711)	1:A:10:CYS:HB2	1:A:11:ASN:H	7	0.49
(1,711)	1:A:10:CYS:HB3	1:A:11:ASN:H	7	0.49
(1,710)	1:A:8:PHE:H	1:A:21:LYS:HD2	8	0.49
(1,710)	1:A:8:PHE:H	1:A:21:LYS:HD3	8	0.49
(1,685)	1:A:107:GLN:HG2	1:A:107:GLN:HE21	10	0.49
(1,685)	1:A:107:GLN:HG2	1:A:107:GLN:HE21	10	0.49
(1,685)	1:A:107:GLN:HG3	1:A:107:GLN:HE21	10	0.49
(1,685)	1:A:107:GLN:HG3	1:A:107:GLN:HE21	10	0.49
(1,685)	1:A:107:GLN:HG2	1:A:107:GLN:HE21	17	0.49
(1,685)	1:A:107:GLN:HG2	1:A:107:GLN:HE21	17	0.49
(1,685)	1:A:107:GLN:HG3	1:A:107:GLN:HE21	17	0.49
(1,685)	1:A:107:GLN:HG3	1:A:107:GLN:HE21	17	0.49
(1,681)	1:A:79:ASN:HD21	1:A:87:PRO:HD2	10	0.49
(1,681)	1:A:79:ASN:HD21	1:A:87:PRO:HD3	10	0.49
(1,670)	1:A:107:GLN:HB2	1:A:105:ASN:HD22	20	0.49
(1,670)	1:A:107:GLN:HB2	1:A:105:ASN:HD22	20	0.49
(1,670)	1:A:107:GLN:HB3	1:A:105:ASN:HD22	20	0.49
(1,670)	1:A:107:GLN:HB3	1:A:105:ASN:HD22	20	0.49
(1,60)	1:A:56:THR:H	1:A:57:GLN:H	18	0.49
(1,583)	1:A:40:HIS:HA	1:A:38:GLN:H	4	0.49
(1,583)	1:A:40:HIS:HA	1:A:38:GLN:H	9	0.49
(1,583)	1:A:40:HIS:HA	1:A:38:GLN:H	17	0.49
(1,583)	1:A:40:HIS:HA	1:A:38:GLN:H	19	0.49
(1,543)	1:A:112:ASP:HB2	1:A:114:SER:H	5	0.49
(1,543)	1:A:112:ASP:HB3	1:A:114:SER:H	5	0.49
(1,543)	1:A:112:ASP:HB2	1:A:114:SER:H	17	0.49
(1,543)	1:A:112:ASP:HB3	1:A:114:SER:H	17	0.49
(1,531)	1:A:71:CYS:HB2	1:A:71:CYS:H	19	0.49
(1,531)	1:A:71:CYS:HB3	1:A:71:CYS:H	19	0.49
(1,436)	1:A:73:SER:H	1:A:72:ASP:H	4	0.49
(1,371)	1:A:44:CYS:HA	1:A:45:ARG:H	14	0.49
(1,366)	1:A:42:ARG:HB2	1:A:43:THR:H	1	0.49
(1,366)	1:A:42:ARG:HB2	1:A:43:THR:H	1	0.49
(1,366)	1:A:42:ARG:HB3	1:A:43:THR:H	1	0.49
(1,366)	1:A:42:ARG:HB3	1:A:43:THR:H	1	0.49
(1,359)	1:A:40:HIS:H	1:A:40:HIS:HB2	19	0.49
(1,359)	1:A:40:HIS:H	1:A:40:HIS:HB3	19	0.49
(1,335)	1:A:45:ARG:HD2	1:A:24:GLY:H	11	0.49
(1,335)	1:A:45:ARG:HD3	1:A:24:GLY:H	11	0.49

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,298)	1:A:14:GLN:H	1:A:11:ASN:H	8	0.49
(1,289)	1:A:8:PHE:HA	1:A:8:PHE:H	2	0.49
(1,27)	1:A:118:ASP:H	1:A:117:LEU:H	17	0.49
(1,212)	1:A:96:ARG:H	1:A:92:CYS:HA	20	0.49
(1,140)	1:A:108:ASP:H	1:A:108:ASP:HB2	8	0.49
(1,140)	1:A:108:ASP:H	1:A:108:ASP:HB3	8	0.49
(2,62)	1:A:56:THR:HG1	1:A:56:THR:H	20	0.48
(2,62)	1:A:56:THR:HG1	1:A:56:THR:H	20	0.48
(2,62)	1:A:56:THR:HG21	1:A:56:THR:H	20	0.48
(2,62)	1:A:56:THR:HG21	1:A:56:THR:H	20	0.48
(2,62)	1:A:56:THR:HG22	1:A:56:THR:H	20	0.48
(2,62)	1:A:56:THR:HG22	1:A:56:THR:H	20	0.48
(2,62)	1:A:56:THR:HG23	1:A:56:THR:H	20	0.48
(2,62)	1:A:56:THR:HG23	1:A:56:THR:H	20	0.48
(2,390)	1:A:17:PRO:HB2	1:A:19:ARG:H	20	0.48
(2,390)	1:A:17:PRO:HB3	1:A:19:ARG:H	20	0.48
(2,390)	1:A:17:PRO:HG2	1:A:19:ARG:H	20	0.48
(2,390)	1:A:17:PRO:HG3	1:A:19:ARG:H	20	0.48
(2,330)	1:A:92:CYS:HA	1:A:93:SER:H	15	0.48
(2,330)	1:A:111:SER:HG	1:A:93:SER:H	15	0.48
(2,330)	1:A:114:SER:HG	1:A:93:SER:H	15	0.48
(2,321)	1:A:64:ARG:HB2	1:A:67:GLY:H	11	0.48
(2,321)	1:A:64:ARG:HB3	1:A:67:GLY:H	11	0.48
(2,321)	1:A:64:ARG:HG2	1:A:67:GLY:H	11	0.48
(2,321)	1:A:64:ARG:HG3	1:A:67:GLY:H	11	0.48
(2,321)	1:A:68:GLU:HB2	1:A:67:GLY:H	11	0.48
(2,321)	1:A:68:GLU:HB3	1:A:67:GLY:H	11	0.48
(2,321)	1:A:64:ARG:HB2	1:A:67:GLY:H	17	0.48
(2,321)	1:A:64:ARG:HB3	1:A:67:GLY:H	17	0.48
(2,321)	1:A:64:ARG:HG2	1:A:67:GLY:H	17	0.48
(2,321)	1:A:64:ARG:HG3	1:A:67:GLY:H	17	0.48
(2,321)	1:A:68:GLU:HB2	1:A:67:GLY:H	17	0.48
(2,321)	1:A:68:GLU:HB3	1:A:67:GLY:H	17	0.48
(2,275)	1:A:43:THR:HG1	1:A:44:CYS:H	5	0.48
(2,275)	1:A:43:THR:HG1	1:A:44:CYS:H	5	0.48
(2,275)	1:A:43:THR:HG21	1:A:44:CYS:H	5	0.48
(2,275)	1:A:43:THR:HG21	1:A:44:CYS:H	5	0.48
(2,275)	1:A:43:THR:HG22	1:A:44:CYS:H	5	0.48
(2,275)	1:A:43:THR:HG22	1:A:44:CYS:H	5	0.48
(2,275)	1:A:43:THR:HG23	1:A:44:CYS:H	5	0.48
(2,275)	1:A:43:THR:HG23	1:A:44:CYS:H	5	0.48
(2,275)	1:A:56:THR:HG21	1:A:44:CYS:H	5	0.48

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,275)	1:A:56:THR:HG22	1:A:44:CYS:H	5	0.48
(2,275)	1:A:56:THR:HG23	1:A:44:CYS:H	5	0.48
(2,264)	1:A:42:ARG:HB2	1:A:50:SER:H	3	0.48
(2,264)	1:A:42:ARG:HB3	1:A:50:SER:H	3	0.48
(2,264)	1:A:49:ILE:HB	1:A:50:SER:H	3	0.48
(2,239)	1:A:64:ARG:HB2	1:A:69:ASN:H	11	0.48
(2,239)	1:A:64:ARG:HB3	1:A:69:ASN:H	11	0.48
(2,239)	1:A:64:ARG:HG2	1:A:69:ASN:H	11	0.48
(2,239)	1:A:64:ARG:HG3	1:A:69:ASN:H	11	0.48
(2,239)	1:A:68:GLU:HB2	1:A:69:ASN:H	11	0.48
(2,239)	1:A:68:GLU:HB3	1:A:69:ASN:H	11	0.48
(2,222)	1:A:24:GLY:HA2	1:A:45:ARG:H	11	0.48
(2,222)	1:A:24:GLY:HA3	1:A:45:ARG:H	11	0.48
(2,222)	1:A:45:ARG:HA	1:A:45:ARG:H	11	0.48
(2,207)	1:A:79:ASN:HB2	1:A:79:ASN:HD22	4	0.48
(2,207)	1:A:97:CYS:HB2	1:A:79:ASN:HD22	4	0.48
(2,11)	1:A:108:ASP:HA	1:A:113:GLY:H	20	0.48
(2,11)	1:A:109:ASP:HA	1:A:113:GLY:H	20	0.48
(2,11)	1:A:110:CYS:HA	1:A:113:GLY:H	20	0.48
(2,11)	1:A:114:SER:HG	1:A:113:GLY:H	20	0.48
(1,896)	1:A:64:ARG:H	1:A:66:ASP:H	18	0.48
(1,881)	1:A:48:GLU:H	1:A:45:ARG:H	18	0.48
(1,879)	1:A:48:GLU:H	1:A:45:ARG:H	18	0.48
(1,862)	1:A:21:LYS:HE2	1:A:19:ARG:H	14	0.48
(1,862)	1:A:21:LYS:HE3	1:A:19:ARG:H	14	0.48
(1,856)	1:A:14:GLN:H	1:A:12:ASN:HD22	14	0.48
(1,85)	1:A:21:LYS:HG2	1:A:22:CYS:H	13	0.48
(1,85)	1:A:21:LYS:HG3	1:A:22:CYS:H	13	0.48
(1,833)	1:A:42:ARG:HG2	1:A:41:MET:H	13	0.48
(1,833)	1:A:42:ARG:HG2	1:A:41:MET:H	13	0.48
(1,833)	1:A:42:ARG:HG3	1:A:41:MET:H	13	0.48
(1,833)	1:A:42:ARG:HG3	1:A:41:MET:H	13	0.48
(1,81)	1:A:28:CYS:HA	1:A:33:ASP:H	9	0.48
(1,803)	1:A:101:ASN:HD21	1:A:99:SER:H	10	0.48
(1,800)	1:A:85:CYS:HB2	1:A:98:ILE:H	15	0.48
(1,800)	1:A:85:CYS:HB3	1:A:98:ILE:H	15	0.48
(1,799)	1:A:85:CYS:HA	1:A:97:CYS:H	19	0.48
(1,796)	1:A:96:ARG:H	1:A:83:ILE:HG21	11	0.48
(1,796)	1:A:96:ARG:H	1:A:83:ILE:HG22	11	0.48
(1,796)	1:A:96:ARG:H	1:A:83:ILE:HG23	11	0.48
(1,756)	1:A:57:GLN:HB2	1:A:57:GLN:HE21	8	0.48
(1,756)	1:A:57:GLN:HB2	1:A:57:GLN:HE21	8	0.48

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,756)	1:A:57:GLN:HB3	1:A:57:GLN:HE21	8	0.48
(1,756)	1:A:57:GLN:HB3	1:A:57:GLN:HE21	8	0.48
(1,750)	1:A:57:GLN:HB2	1:A:52:GLY:H	10	0.48
(1,750)	1:A:57:GLN:HB2	1:A:52:GLY:H	10	0.48
(1,750)	1:A:57:GLN:HB3	1:A:52:GLY:H	10	0.48
(1,750)	1:A:57:GLN:HB3	1:A:52:GLY:H	10	0.48
(1,721)	1:A:21:LYS:HG2	1:A:22:CYS:H	2	0.48
(1,721)	1:A:21:LYS:HG3	1:A:22:CYS:H	2	0.48
(1,710)	1:A:8:PHE:H	1:A:21:LYS:HD2	9	0.48
(1,710)	1:A:8:PHE:H	1:A:21:LYS:HD3	9	0.48
(1,706)	1:A:45:ARG:HB2	1:A:45:ARG:H	6	0.48
(1,706)	1:A:45:ARG:HB3	1:A:45:ARG:H	6	0.48
(1,706)	1:A:45:ARG:HB2	1:A:45:ARG:H	11	0.48
(1,706)	1:A:45:ARG:HB3	1:A:45:ARG:H	11	0.48
(1,685)	1:A:107:GLN:HG2	1:A:107:GLN:HE21	2	0.48
(1,685)	1:A:107:GLN:HG2	1:A:107:GLN:HE21	2	0.48
(1,685)	1:A:107:GLN:HG3	1:A:107:GLN:HE21	2	0.48
(1,685)	1:A:107:GLN:HG3	1:A:107:GLN:HE21	2	0.48
(1,657)	1:A:105:ASN:HA	1:A:105:ASN:HD22	2	0.48
(1,657)	1:A:105:ASN:HA	1:A:105:ASN:HD22	4	0.48
(1,657)	1:A:105:ASN:HA	1:A:105:ASN:HD22	6	0.48
(1,657)	1:A:105:ASN:HA	1:A:105:ASN:HD22	17	0.48
(1,654)	1:A:107:GLN:HB2	1:A:107:GLN:HE22	20	0.48
(1,654)	1:A:107:GLN:HB2	1:A:107:GLN:HE22	20	0.48
(1,654)	1:A:107:GLN:HB3	1:A:107:GLN:HE22	20	0.48
(1,654)	1:A:107:GLN:HB3	1:A:107:GLN:HE22	20	0.48
(1,634)	1:A:79:ASN:HD22	1:A:79:ASN:HA	2	0.48
(1,608)	1:A:14:GLN:HG2	1:A:14:GLN:HE21	3	0.48
(1,608)	1:A:14:GLN:HG3	1:A:14:GLN:HE21	3	0.48
(1,608)	1:A:14:GLN:HG2	1:A:14:GLN:HE21	4	0.48
(1,608)	1:A:14:GLN:HG3	1:A:14:GLN:HE21	4	0.48
(1,608)	1:A:14:GLN:HG2	1:A:14:GLN:HE21	11	0.48
(1,608)	1:A:14:GLN:HG3	1:A:14:GLN:HE21	11	0.48
(1,596)	1:A:74:GLY:HA2	1:A:69:ASN:HD21	10	0.48
(1,596)	1:A:74:GLY:HA3	1:A:69:ASN:HD21	10	0.48
(1,587)	1:A:14:GLN:H	1:A:12:ASN:H	9	0.48
(1,58)	1:A:66:ASP:H	1:A:65:CYS:H	17	0.48
(1,543)	1:A:112:ASP:HB2	1:A:114:SER:H	20	0.48
(1,543)	1:A:112:ASP:HB3	1:A:114:SER:H	20	0.48
(1,463)	1:A:71:CYS:HB2	1:A:78:GLU:H	18	0.48
(1,463)	1:A:71:CYS:HB3	1:A:78:GLU:H	18	0.48
(1,436)	1:A:73:SER:H	1:A:72:ASP:H	12	0.48

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,366)	1:A:42:ARG:HB2	1:A:43:THR:H	6	0.48
(1,366)	1:A:42:ARG:HB2	1:A:43:THR:H	6	0.48
(1,366)	1:A:42:ARG:HB3	1:A:43:THR:H	6	0.48
(1,366)	1:A:42:ARG:HB3	1:A:43:THR:H	6	0.48
(1,359)	1:A:40:HIS:H	1:A:40:HIS:HB2	14	0.48
(1,359)	1:A:40:HIS:H	1:A:40:HIS:HB3	14	0.48
(1,289)	1:A:8:PHE:HA	1:A:8:PHE:H	19	0.48
(1,27)	1:A:118:ASP:H	1:A:117:LEU:H	5	0.48
(1,27)	1:A:118:ASP:H	1:A:117:LEU:H	14	0.48
(1,174)	1:A:103:VAL:H	1:A:101:ASN:HB2	10	0.48
(1,174)	1:A:103:VAL:H	1:A:101:ASN:HB3	10	0.48
(1,119)	1:A:112:ASP:H	1:A:115:ASP:H	6	0.48
(1,118)	1:A:115:ASP:H	1:A:113:GLY:H	8	0.48
(4,8)	1:A:8:PHE:O	1:A:16:VAL:H	9	0.47
(2,64)	1:A:45:ARG:HB2	1:A:46:ILE:H	7	0.47
(2,64)	1:A:45:ARG:HB3	1:A:46:ILE:H	7	0.47
(2,64)	1:A:46:ILE:HG12	1:A:46:ILE:H	7	0.47
(2,64)	1:A:46:ILE:HG13	1:A:46:ILE:H	7	0.47
(2,54)	1:A:17:PRO:HB2	1:A:18:SER:H	5	0.47
(2,54)	1:A:17:PRO:HB3	1:A:18:SER:H	5	0.47
(2,54)	1:A:17:PRO:HG2	1:A:18:SER:H	5	0.47
(2,54)	1:A:17:PRO:HG3	1:A:18:SER:H	5	0.47
(2,54)	1:A:17:PRO:HB2	1:A:18:SER:H	15	0.47
(2,54)	1:A:17:PRO:HB3	1:A:18:SER:H	15	0.47
(2,54)	1:A:17:PRO:HG2	1:A:18:SER:H	15	0.47
(2,54)	1:A:17:PRO:HG3	1:A:18:SER:H	15	0.47
(2,390)	1:A:17:PRO:HB2	1:A:19:ARG:H	3	0.47
(2,390)	1:A:17:PRO:HB3	1:A:19:ARG:H	3	0.47
(2,390)	1:A:17:PRO:HG2	1:A:19:ARG:H	3	0.47
(2,390)	1:A:17:PRO:HG3	1:A:19:ARG:H	3	0.47
(2,390)	1:A:17:PRO:HB2	1:A:19:ARG:H	17	0.47
(2,390)	1:A:17:PRO:HB3	1:A:19:ARG:H	17	0.47
(2,390)	1:A:17:PRO:HG2	1:A:19:ARG:H	17	0.47
(2,390)	1:A:17:PRO:HG3	1:A:19:ARG:H	17	0.47
(2,321)	1:A:64:ARG:HB2	1:A:67:GLY:H	13	0.47
(2,321)	1:A:64:ARG:HB3	1:A:67:GLY:H	13	0.47
(2,321)	1:A:64:ARG:HG2	1:A:67:GLY:H	13	0.47
(2,321)	1:A:64:ARG:HG3	1:A:67:GLY:H	13	0.47
(2,321)	1:A:68:GLU:HB2	1:A:67:GLY:H	13	0.47
(2,321)	1:A:68:GLU:HB3	1:A:67:GLY:H	13	0.47
(2,293)	1:A:18:SER:HA	1:A:8:PHE:H	16	0.47
(2,293)	1:A:18:SER:HB2	1:A:8:PHE:H	16	0.47

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,293)	1:A:18:SER:HB3	1:A:8:PHE:H	16	0.47
(2,281)	1:A:10:CYS:HA	1:A:11:ASN:HD22	6	0.47
(2,281)	1:A:11:ASN:HA	1:A:11:ASN:HD22	6	0.47
(2,275)	1:A:43:THR:HG1	1:A:44:CYS:H	12	0.47
(2,275)	1:A:43:THR:HG1	1:A:44:CYS:H	12	0.47
(2,275)	1:A:43:THR:HG21	1:A:44:CYS:H	12	0.47
(2,275)	1:A:43:THR:HG21	1:A:44:CYS:H	12	0.47
(2,275)	1:A:43:THR:HG22	1:A:44:CYS:H	12	0.47
(2,275)	1:A:43:THR:HG22	1:A:44:CYS:H	12	0.47
(2,275)	1:A:43:THR:HG23	1:A:44:CYS:H	12	0.47
(2,275)	1:A:43:THR:HG23	1:A:44:CYS:H	12	0.47
(2,275)	1:A:56:THR:HG21	1:A:44:CYS:H	12	0.47
(2,275)	1:A:56:THR:HG22	1:A:44:CYS:H	12	0.47
(2,275)	1:A:56:THR:HG23	1:A:44:CYS:H	12	0.47
(2,275)	1:A:43:THR:HG1	1:A:44:CYS:H	13	0.47
(2,275)	1:A:43:THR:HG1	1:A:44:CYS:H	13	0.47
(2,275)	1:A:43:THR:HG21	1:A:44:CYS:H	13	0.47
(2,275)	1:A:43:THR:HG21	1:A:44:CYS:H	13	0.47
(2,275)	1:A:43:THR:HG22	1:A:44:CYS:H	13	0.47
(2,275)	1:A:43:THR:HG22	1:A:44:CYS:H	13	0.47
(2,275)	1:A:43:THR:HG23	1:A:44:CYS:H	13	0.47
(2,275)	1:A:43:THR:HG23	1:A:44:CYS:H	13	0.47
(2,275)	1:A:56:THR:HG21	1:A:44:CYS:H	13	0.47
(2,275)	1:A:56:THR:HG22	1:A:44:CYS:H	13	0.47
(2,275)	1:A:56:THR:HG23	1:A:44:CYS:H	13	0.47
(2,239)	1:A:64:ARG:HB2	1:A:69:ASN:H	1	0.47
(2,239)	1:A:64:ARG:HB3	1:A:69:ASN:H	1	0.47
(2,239)	1:A:64:ARG:HG2	1:A:69:ASN:H	1	0.47
(2,239)	1:A:64:ARG:HG3	1:A:69:ASN:H	1	0.47
(2,239)	1:A:68:GLU:HB2	1:A:69:ASN:H	1	0.47
(2,239)	1:A:68:GLU:HB3	1:A:69:ASN:H	1	0.47
(2,239)	1:A:64:ARG:HB2	1:A:69:ASN:H	18	0.47
(2,239)	1:A:64:ARG:HB3	1:A:69:ASN:H	18	0.47
(2,239)	1:A:64:ARG:HG2	1:A:69:ASN:H	18	0.47
(2,239)	1:A:64:ARG:HG3	1:A:69:ASN:H	18	0.47
(2,239)	1:A:68:GLU:HB2	1:A:69:ASN:H	18	0.47
(2,239)	1:A:68:GLU:HB3	1:A:69:ASN:H	18	0.47
(2,216)	1:A:49:ILE:HD11	1:A:50:SER:H	16	0.47
(2,216)	1:A:49:ILE:HD12	1:A:50:SER:H	16	0.47
(2,216)	1:A:49:ILE:HD13	1:A:50:SER:H	16	0.47
(2,216)	1:A:49:ILE:HG12	1:A:50:SER:H	16	0.47
(2,216)	1:A:49:ILE:HG13	1:A:50:SER:H	16	0.47

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,216)	1:A:49:ILE:HG21	1:A:50:SER:H	16	0.47
(2,216)	1:A:49:ILE:HG22	1:A:50:SER:H	16	0.47
(2,216)	1:A:49:ILE:HG23	1:A:50:SER:H	16	0.47
(2,212)	1:A:88:ASP:H	1:A:86:SER:H	19	0.47
(2,208)	1:A:43:THR:HG1	1:A:52:GLY:H	6	0.47
(2,208)	1:A:43:THR:HG1	1:A:52:GLY:H	6	0.47
(2,208)	1:A:43:THR:HG21	1:A:52:GLY:H	6	0.47
(2,208)	1:A:43:THR:HG21	1:A:52:GLY:H	6	0.47
(2,208)	1:A:43:THR:HG22	1:A:52:GLY:H	6	0.47
(2,208)	1:A:43:THR:HG22	1:A:52:GLY:H	6	0.47
(2,208)	1:A:43:THR:HG23	1:A:52:GLY:H	6	0.47
(2,208)	1:A:43:THR:HG23	1:A:52:GLY:H	6	0.47
(2,208)	1:A:53:ALA:HB1	1:A:52:GLY:H	6	0.47
(2,208)	1:A:53:ALA:HB2	1:A:52:GLY:H	6	0.47
(2,208)	1:A:53:ALA:HB3	1:A:52:GLY:H	6	0.47
(2,208)	1:A:56:THR:HG21	1:A:52:GLY:H	6	0.47
(2,208)	1:A:56:THR:HG22	1:A:52:GLY:H	6	0.47
(2,208)	1:A:56:THR:HG23	1:A:52:GLY:H	6	0.47
(2,208)	1:A:43:THR:HG1	1:A:52:GLY:H	15	0.47
(2,208)	1:A:43:THR:HG1	1:A:52:GLY:H	15	0.47
(2,208)	1:A:43:THR:HG21	1:A:52:GLY:H	15	0.47
(2,208)	1:A:43:THR:HG21	1:A:52:GLY:H	15	0.47
(2,208)	1:A:43:THR:HG22	1:A:52:GLY:H	15	0.47
(2,208)	1:A:43:THR:HG22	1:A:52:GLY:H	15	0.47
(2,208)	1:A:43:THR:HG23	1:A:52:GLY:H	15	0.47
(2,208)	1:A:43:THR:HG23	1:A:52:GLY:H	15	0.47
(2,208)	1:A:53:ALA:HB1	1:A:52:GLY:H	15	0.47
(2,208)	1:A:53:ALA:HB2	1:A:52:GLY:H	15	0.47
(2,208)	1:A:53:ALA:HB3	1:A:52:GLY:H	15	0.47
(2,208)	1:A:56:THR:HG21	1:A:52:GLY:H	15	0.47
(2,208)	1:A:56:THR:HG22	1:A:52:GLY:H	15	0.47
(2,208)	1:A:56:THR:HG23	1:A:52:GLY:H	15	0.47
(2,207)	1:A:79:ASN:HB2	1:A:79:ASN:HD22	6	0.47
(2,207)	1:A:97:CYS:HB2	1:A:79:ASN:HD22	6	0.47
(2,207)	1:A:79:ASN:HB2	1:A:79:ASN:HD22	9	0.47
(2,207)	1:A:97:CYS:HB2	1:A:79:ASN:HD22	9	0.47
(2,200)	1:A:77:GLU:HG2	1:A:76:ASP:H	10	0.47
(2,200)	1:A:77:GLU:HG3	1:A:76:ASP:H	10	0.47
(2,200)	1:A:87:PRO:HG2	1:A:76:ASP:H	10	0.47
(2,200)	1:A:87:PRO:HG3	1:A:76:ASP:H	10	0.47
(2,164)	1:A:14:GLN:HB2	1:A:14:GLN:H	17	0.47
(2,164)	1:A:14:GLN:HB3	1:A:14:GLN:H	17	0.47

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,124)	1:A:43:THR:HG1	1:A:57:GLN:H	3	0.47
(2,124)	1:A:43:THR:HG1	1:A:57:GLN:H	3	0.47
(2,124)	1:A:43:THR:HG21	1:A:57:GLN:H	3	0.47
(2,124)	1:A:43:THR:HG21	1:A:57:GLN:H	3	0.47
(2,124)	1:A:43:THR:HG22	1:A:57:GLN:H	3	0.47
(2,124)	1:A:43:THR:HG22	1:A:57:GLN:H	3	0.47
(2,124)	1:A:43:THR:HG23	1:A:57:GLN:H	3	0.47
(2,124)	1:A:43:THR:HG23	1:A:57:GLN:H	3	0.47
(2,124)	1:A:56:THR:HG1	1:A:57:GLN:H	3	0.47
(2,124)	1:A:56:THR:HG21	1:A:57:GLN:H	3	0.47
(2,124)	1:A:56:THR:HG21	1:A:57:GLN:H	3	0.47
(2,124)	1:A:56:THR:HG22	1:A:57:GLN:H	3	0.47
(2,124)	1:A:56:THR:HG22	1:A:57:GLN:H	3	0.47
(2,124)	1:A:56:THR:HG23	1:A:57:GLN:H	3	0.47
(2,124)	1:A:56:THR:HG23	1:A:57:GLN:H	3	0.47
(1,881)	1:A:48:GLU:H	1:A:45:ARG:H	10	0.47
(1,881)	1:A:48:GLU:H	1:A:45:ARG:H	12	0.47
(1,879)	1:A:48:GLU:H	1:A:45:ARG:H	10	0.47
(1,879)	1:A:48:GLU:H	1:A:45:ARG:H	12	0.47
(1,877)	1:A:22:CYS:HA	1:A:44:CYS:H	11	0.47
(1,859)	1:A:3:CYS:HB2	1:A:18:SER:H	14	0.47
(1,859)	1:A:3:CYS:HB3	1:A:18:SER:H	14	0.47
(1,856)	1:A:14:GLN:H	1:A:12:ASN:HD22	15	0.47
(1,824)	1:A:118:ASP:H	1:A:116:GLU:H	2	0.47
(1,824)	1:A:118:ASP:H	1:A:116:GLU:H	19	0.47
(1,81)	1:A:28:CYS:HA	1:A:33:ASP:H	13	0.47
(1,807)	1:A:98:ILE:HG12	1:A:103:VAL:H	11	0.47
(1,807)	1:A:98:ILE:HG13	1:A:103:VAL:H	11	0.47
(1,803)	1:A:101:ASN:HD21	1:A:99:SER:H	1	0.47
(1,80)	1:A:44:CYS:HB2	1:A:45:ARG:H	2	0.47
(1,80)	1:A:44:CYS:HB3	1:A:45:ARG:H	2	0.47
(1,786)	1:A:71:CYS:H	1:A:76:ASP:H	8	0.47
(1,784)	1:A:71:CYS:HB2	1:A:76:ASP:H	8	0.47
(1,784)	1:A:71:CYS:HB3	1:A:76:ASP:H	8	0.47
(1,772)	1:A:68:GLU:H	1:A:64:ARG:H	18	0.47
(1,746)	1:A:50:SER:H	1:A:49:ILE:HG12	4	0.47
(1,746)	1:A:50:SER:H	1:A:49:ILE:HG13	4	0.47
(1,73)	1:A:65:CYS:HB2	1:A:65:CYS:H	11	0.47
(1,73)	1:A:65:CYS:HB3	1:A:65:CYS:H	11	0.47
(1,721)	1:A:21:LYS:HG2	1:A:22:CYS:H	16	0.47
(1,721)	1:A:21:LYS:HG3	1:A:22:CYS:H	16	0.47
(1,710)	1:A:8:PHE:H	1:A:21:LYS:HD2	17	0.47

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,710)	1:A:8:PHE:H	1:A:21:LYS:HD3	17	0.47
(1,696)	1:A:44:CYS:HB2	1:A:34:GLU:H	2	0.47
(1,696)	1:A:44:CYS:HB3	1:A:34:GLU:H	2	0.47
(1,686)	1:A:74:GLY:H	1:A:69:ASN:HD22	20	0.47
(1,670)	1:A:107:GLN:HB2	1:A:105:ASN:HD22	13	0.47
(1,670)	1:A:107:GLN:HB2	1:A:105:ASN:HD22	13	0.47
(1,670)	1:A:107:GLN:HB3	1:A:105:ASN:HD22	13	0.47
(1,670)	1:A:107:GLN:HB3	1:A:105:ASN:HD22	13	0.47
(1,667)	1:A:107:GLN:HG2	1:A:105:ASN:HD22	16	0.47
(1,667)	1:A:107:GLN:HG2	1:A:105:ASN:HD22	16	0.47
(1,667)	1:A:107:GLN:HG3	1:A:105:ASN:HD22	16	0.47
(1,667)	1:A:107:GLN:HG3	1:A:105:ASN:HD22	16	0.47
(1,657)	1:A:105:ASN:HA	1:A:105:ASN:HD22	3	0.47
(1,657)	1:A:105:ASN:HA	1:A:105:ASN:HD22	9	0.47
(1,657)	1:A:105:ASN:HA	1:A:105:ASN:HD22	19	0.47
(1,634)	1:A:79:ASN:HD22	1:A:79:ASN:HA	14	0.47
(1,608)	1:A:14:GLN:HG2	1:A:14:GLN:HE21	8	0.47
(1,608)	1:A:14:GLN:HG3	1:A:14:GLN:HE21	8	0.47
(1,608)	1:A:14:GLN:HG2	1:A:14:GLN:HE21	15	0.47
(1,608)	1:A:14:GLN:HG3	1:A:14:GLN:HE21	15	0.47
(1,60)	1:A:56:THR:H	1:A:57:GLN:H	2	0.47
(1,596)	1:A:74:GLY:HA2	1:A:69:ASN:HD21	6	0.47
(1,596)	1:A:74:GLY:HA3	1:A:69:ASN:HD21	6	0.47
(1,58)	1:A:66:ASP:H	1:A:65:CYS:H	2	0.47
(1,543)	1:A:112:ASP:HB2	1:A:114:SER:H	18	0.47
(1,543)	1:A:112:ASP:HB3	1:A:114:SER:H	18	0.47
(1,534)	1:A:77:GLU:HB2	1:A:77:GLU:H	4	0.47
(1,534)	1:A:77:GLU:HB3	1:A:77:GLU:H	4	0.47
(1,534)	1:A:77:GLU:HB2	1:A:77:GLU:H	10	0.47
(1,534)	1:A:77:GLU:HB3	1:A:77:GLU:H	10	0.47
(1,534)	1:A:77:GLU:HB2	1:A:77:GLU:H	18	0.47
(1,534)	1:A:77:GLU:HB3	1:A:77:GLU:H	18	0.47
(1,531)	1:A:71:CYS:HB2	1:A:71:CYS:H	12	0.47
(1,531)	1:A:71:CYS:HB3	1:A:71:CYS:H	12	0.47
(1,526)	1:A:64:ARG:H	1:A:67:GLY:H	12	0.47
(1,436)	1:A:73:SER:H	1:A:72:ASP:H	14	0.47
(1,436)	1:A:73:SER:H	1:A:72:ASP:H	18	0.47
(1,366)	1:A:42:ARG:HB2	1:A:43:THR:H	12	0.47
(1,366)	1:A:42:ARG:HB2	1:A:43:THR:H	12	0.47
(1,366)	1:A:42:ARG:HB3	1:A:43:THR:H	12	0.47
(1,366)	1:A:42:ARG:HB3	1:A:43:THR:H	12	0.47
(1,359)	1:A:40:HIS:H	1:A:40:HIS:HB2	12	0.47

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,359)	1:A:40:HIS:H	1:A:40:HIS:HB3	12	0.47
(1,327)	1:A:22:CYS:HB2	1:A:22:CYS:H	13	0.47
(1,327)	1:A:22:CYS:HB3	1:A:22:CYS:H	13	0.47
(1,27)	1:A:118:ASP:H	1:A:117:LEU:H	18	0.47
(1,212)	1:A:96:ARG:H	1:A:92:CYS:HA	7	0.47
(1,212)	1:A:96:ARG:H	1:A:92:CYS:HA	13	0.47
(1,2)	1:A:112:ASP:H	1:A:113:GLY:H	9	0.47
(1,140)	1:A:108:ASP:H	1:A:108:ASP:HB2	18	0.47
(1,140)	1:A:108:ASP:H	1:A:108:ASP:HB3	18	0.47
(1,134)	1:A:110:CYS:H	1:A:109:ASP:HB2	2	0.47
(1,134)	1:A:110:CYS:H	1:A:109:ASP:HB2	2	0.47
(1,134)	1:A:110:CYS:H	1:A:109:ASP:HB3	2	0.47
(1,134)	1:A:110:CYS:H	1:A:109:ASP:HB3	2	0.47
(2,80)	1:A:41:MET:HA	1:A:56:THR:H	19	0.46
(2,80)	1:A:42:ARG:HA	1:A:56:THR:H	19	0.46
(2,80)	1:A:56:THR:HB	1:A:56:THR:H	19	0.46
(2,8)	1:A:24:GLY:HA2	1:A:46:ILE:H	10	0.46
(2,8)	1:A:24:GLY:HA3	1:A:46:ILE:H	10	0.46
(2,8)	1:A:45:ARG:HA	1:A:46:ILE:H	10	0.46
(2,62)	1:A:56:THR:HG1	1:A:56:THR:H	11	0.46
(2,62)	1:A:56:THR:HG1	1:A:56:THR:H	11	0.46
(2,62)	1:A:56:THR:HG21	1:A:56:THR:H	11	0.46
(2,62)	1:A:56:THR:HG21	1:A:56:THR:H	11	0.46
(2,62)	1:A:56:THR:HG22	1:A:56:THR:H	11	0.46
(2,62)	1:A:56:THR:HG22	1:A:56:THR:H	11	0.46
(2,62)	1:A:56:THR:HG23	1:A:56:THR:H	11	0.46
(2,62)	1:A:56:THR:HG23	1:A:56:THR:H	11	0.46
(2,54)	1:A:17:PRO:HB2	1:A:18:SER:H	12	0.46
(2,54)	1:A:17:PRO:HB3	1:A:18:SER:H	12	0.46
(2,54)	1:A:17:PRO:HG2	1:A:18:SER:H	12	0.46
(2,54)	1:A:17:PRO:HG3	1:A:18:SER:H	12	0.46
(2,390)	1:A:17:PRO:HB2	1:A:19:ARG:H	10	0.46
(2,390)	1:A:17:PRO:HB3	1:A:19:ARG:H	10	0.46
(2,390)	1:A:17:PRO:HG2	1:A:19:ARG:H	10	0.46
(2,390)	1:A:17:PRO:HG3	1:A:19:ARG:H	10	0.46
(2,377)	1:A:33:ASP:HB2	1:A:33:ASP:H	4	0.46
(2,377)	1:A:33:ASP:HB3	1:A:33:ASP:H	4	0.46
(2,377)	1:A:34:GLU:HB2	1:A:33:ASP:H	4	0.46
(2,377)	1:A:34:GLU:HB3	1:A:33:ASP:H	4	0.46
(2,331)	1:A:2:THR:H	1:A:99:SER:H	5	0.46
(2,331)	1:A:3:CYS:H	1:A:99:SER:H	5	0.46
(2,331)	1:A:80:CYS:H	1:A:99:SER:H	5	0.46

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,331)	1:A:81:GLY:H	1:A:99:SER:H	5	0.46
(2,331)	1:A:101:ASN:H	1:A:99:SER:H	5	0.46
(2,327)	1:A:64:ARG:HG2	1:A:71:CYS:H	8	0.46
(2,327)	1:A:64:ARG:HG3	1:A:71:CYS:H	8	0.46
(2,327)	1:A:68:GLU:HG2	1:A:71:CYS:H	8	0.46
(2,327)	1:A:68:GLU:HG3	1:A:71:CYS:H	8	0.46
(2,321)	1:A:64:ARG:HB2	1:A:67:GLY:H	15	0.46
(2,321)	1:A:64:ARG:HB3	1:A:67:GLY:H	15	0.46
(2,321)	1:A:64:ARG:HG2	1:A:67:GLY:H	15	0.46
(2,321)	1:A:64:ARG:HG3	1:A:67:GLY:H	15	0.46
(2,321)	1:A:68:GLU:HB2	1:A:67:GLY:H	15	0.46
(2,321)	1:A:68:GLU:HB3	1:A:67:GLY:H	15	0.46
(2,306)	1:A:71:CYS:HB2	1:A:77:GLU:H	20	0.46
(2,306)	1:A:71:CYS:HB3	1:A:77:GLU:H	20	0.46
(2,306)	1:A:80:CYS:HB2	1:A:77:GLU:H	20	0.46
(2,306)	1:A:80:CYS:HB3	1:A:77:GLU:H	20	0.46
(2,275)	1:A:43:THR:HG1	1:A:44:CYS:H	11	0.46
(2,275)	1:A:43:THR:HG1	1:A:44:CYS:H	11	0.46
(2,275)	1:A:43:THR:HG21	1:A:44:CYS:H	11	0.46
(2,275)	1:A:43:THR:HG21	1:A:44:CYS:H	11	0.46
(2,275)	1:A:43:THR:HG22	1:A:44:CYS:H	11	0.46
(2,275)	1:A:43:THR:HG22	1:A:44:CYS:H	11	0.46
(2,275)	1:A:43:THR:HG23	1:A:44:CYS:H	11	0.46
(2,275)	1:A:43:THR:HG23	1:A:44:CYS:H	11	0.46
(2,275)	1:A:56:THR:HG21	1:A:44:CYS:H	11	0.46
(2,275)	1:A:56:THR:HG22	1:A:44:CYS:H	11	0.46
(2,275)	1:A:56:THR:HG23	1:A:44:CYS:H	11	0.46
(2,25)	1:A:79:ASN:HD22	1:A:80:CYS:HA	8	0.46
(2,25)	1:A:86:SER:HA	1:A:80:CYS:HA	8	0.46
(2,239)	1:A:64:ARG:HB2	1:A:69:ASN:H	5	0.46
(2,239)	1:A:64:ARG:HB3	1:A:69:ASN:H	5	0.46
(2,239)	1:A:64:ARG:HG2	1:A:69:ASN:H	5	0.46
(2,239)	1:A:64:ARG:HG3	1:A:69:ASN:H	5	0.46
(2,239)	1:A:68:GLU:HB2	1:A:69:ASN:H	5	0.46
(2,239)	1:A:68:GLU:HB3	1:A:69:ASN:H	5	0.46
(2,239)	1:A:64:ARG:HB2	1:A:69:ASN:H	14	0.46
(2,239)	1:A:64:ARG:HB3	1:A:69:ASN:H	14	0.46
(2,239)	1:A:64:ARG:HG2	1:A:69:ASN:H	14	0.46
(2,239)	1:A:64:ARG:HG3	1:A:69:ASN:H	14	0.46
(2,239)	1:A:68:GLU:HB2	1:A:69:ASN:H	14	0.46
(2,239)	1:A:68:GLU:HB3	1:A:69:ASN:H	14	0.46
(2,212)	1:A:88:ASP:H	1:A:86:SER:H	6	0.46

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,212)	1:A:88:ASP:H	1:A:86:SER:H	10	0.46
(2,212)	1:A:88:ASP:H	1:A:86:SER:H	18	0.46
(2,208)	1:A:43:THR:HG1	1:A:52:GLY:H	5	0.46
(2,208)	1:A:43:THR:HG1	1:A:52:GLY:H	5	0.46
(2,208)	1:A:43:THR:HG21	1:A:52:GLY:H	5	0.46
(2,208)	1:A:43:THR:HG21	1:A:52:GLY:H	5	0.46
(2,208)	1:A:43:THR:HG22	1:A:52:GLY:H	5	0.46
(2,208)	1:A:43:THR:HG22	1:A:52:GLY:H	5	0.46
(2,208)	1:A:43:THR:HG23	1:A:52:GLY:H	5	0.46
(2,208)	1:A:43:THR:HG23	1:A:52:GLY:H	5	0.46
(2,208)	1:A:53:ALA:HB1	1:A:52:GLY:H	5	0.46
(2,208)	1:A:53:ALA:HB2	1:A:52:GLY:H	5	0.46
(2,208)	1:A:53:ALA:HB3	1:A:52:GLY:H	5	0.46
(2,208)	1:A:56:THR:HG21	1:A:52:GLY:H	5	0.46
(2,208)	1:A:56:THR:HG22	1:A:52:GLY:H	5	0.46
(2,208)	1:A:56:THR:HG23	1:A:52:GLY:H	5	0.46
(2,208)	1:A:43:THR:HG1	1:A:52:GLY:H	9	0.46
(2,208)	1:A:43:THR:HG1	1:A:52:GLY:H	9	0.46
(2,208)	1:A:43:THR:HG21	1:A:52:GLY:H	9	0.46
(2,208)	1:A:43:THR:HG21	1:A:52:GLY:H	9	0.46
(2,208)	1:A:43:THR:HG22	1:A:52:GLY:H	9	0.46
(2,208)	1:A:43:THR:HG22	1:A:52:GLY:H	9	0.46
(2,208)	1:A:43:THR:HG23	1:A:52:GLY:H	9	0.46
(2,208)	1:A:43:THR:HG23	1:A:52:GLY:H	9	0.46
(2,208)	1:A:53:ALA:HB1	1:A:52:GLY:H	9	0.46
(2,208)	1:A:53:ALA:HB2	1:A:52:GLY:H	9	0.46
(2,208)	1:A:53:ALA:HB3	1:A:52:GLY:H	9	0.46
(2,208)	1:A:56:THR:HG21	1:A:52:GLY:H	9	0.46
(2,208)	1:A:56:THR:HG22	1:A:52:GLY:H	9	0.46
(2,208)	1:A:56:THR:HG23	1:A:52:GLY:H	9	0.46
(2,207)	1:A:79:ASN:HB2	1:A:79:ASN:HD22	10	0.46
(2,207)	1:A:97:CYS:HB2	1:A:79:ASN:HD22	10	0.46
(2,18)	1:A:111:SER:HA	1:A:113:GLY:H	3	0.46
(2,18)	1:A:113:GLY:HA2	1:A:113:GLY:H	3	0.46
(2,18)	1:A:113:GLY:HA3	1:A:113:GLY:H	3	0.46
(2,18)	1:A:111:SER:HA	1:A:113:GLY:H	4	0.46
(2,18)	1:A:113:GLY:HA2	1:A:113:GLY:H	4	0.46
(2,18)	1:A:113:GLY:HA3	1:A:113:GLY:H	4	0.46
(2,114)	1:A:16:VAL:HG11	1:A:16:VAL:H	19	0.46
(2,114)	1:A:16:VAL:HG12	1:A:16:VAL:H	19	0.46
(2,114)	1:A:16:VAL:HG13	1:A:16:VAL:H	19	0.46
(2,114)	1:A:16:VAL:HG21	1:A:16:VAL:H	19	0.46

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,114)	1:A:16:VAL:HG21	1:A:16:VAL:H	19	0.46
(2,114)	1:A:16:VAL:HG22	1:A:16:VAL:H	19	0.46
(2,114)	1:A:16:VAL:HG22	1:A:16:VAL:H	19	0.46
(2,114)	1:A:16:VAL:HG23	1:A:16:VAL:H	19	0.46
(2,114)	1:A:16:VAL:HG23	1:A:16:VAL:H	19	0.46
(2,11)	1:A:108:ASP:HA	1:A:113:GLY:H	16	0.46
(2,11)	1:A:109:ASP:HA	1:A:113:GLY:H	16	0.46
(2,11)	1:A:110:CYS:HA	1:A:113:GLY:H	16	0.46
(2,11)	1:A:114:SER:HG	1:A:113:GLY:H	16	0.46
(2,11)	1:A:108:ASP:HA	1:A:113:GLY:H	18	0.46
(2,11)	1:A:109:ASP:HA	1:A:113:GLY:H	18	0.46
(2,11)	1:A:110:CYS:HA	1:A:113:GLY:H	18	0.46
(2,11)	1:A:114:SER:HG	1:A:113:GLY:H	18	0.46
(1,891)	1:A:64:ARG:H	1:A:80:CYS:HB2	1	0.46
(1,891)	1:A:64:ARG:H	1:A:80:CYS:HB3	1	0.46
(1,869)	1:A:14:GLN:HE22	1:A:28:CYS:H	7	0.46
(1,859)	1:A:3:CYS:HB2	1:A:18:SER:H	18	0.46
(1,859)	1:A:3:CYS:HB3	1:A:18:SER:H	18	0.46
(1,856)	1:A:14:GLN:H	1:A:12:ASN:HD22	3	0.46
(1,833)	1:A:42:ARG:HG2	1:A:41:MET:H	3	0.46
(1,833)	1:A:42:ARG:HG2	1:A:41:MET:H	3	0.46
(1,833)	1:A:42:ARG:HG3	1:A:41:MET:H	3	0.46
(1,833)	1:A:42:ARG:HG3	1:A:41:MET:H	3	0.46
(1,833)	1:A:42:ARG:HG2	1:A:41:MET:H	7	0.46
(1,833)	1:A:42:ARG:HG2	1:A:41:MET:H	7	0.46
(1,833)	1:A:42:ARG:HG3	1:A:41:MET:H	7	0.46
(1,833)	1:A:42:ARG:HG3	1:A:41:MET:H	7	0.46
(1,833)	1:A:42:ARG:HG2	1:A:41:MET:H	17	0.46
(1,833)	1:A:42:ARG:HG2	1:A:41:MET:H	17	0.46
(1,833)	1:A:42:ARG:HG3	1:A:41:MET:H	17	0.46
(1,833)	1:A:42:ARG:HG3	1:A:41:MET:H	17	0.46
(1,831)	1:A:73:SER:H	1:A:75:GLU:H	4	0.46
(1,831)	1:A:73:SER:H	1:A:75:GLU:H	18	0.46
(1,807)	1:A:98:ILE:HG12	1:A:103:VAL:H	13	0.46
(1,807)	1:A:98:ILE:HG13	1:A:103:VAL:H	13	0.46
(1,756)	1:A:57:GLN:HB2	1:A:57:GLN:HE21	3	0.46
(1,756)	1:A:57:GLN:HB2	1:A:57:GLN:HE21	3	0.46
(1,756)	1:A:57:GLN:HB3	1:A:57:GLN:HE21	3	0.46
(1,756)	1:A:57:GLN:HB3	1:A:57:GLN:HE21	3	0.46
(1,756)	1:A:57:GLN:HB2	1:A:57:GLN:HE21	5	0.46
(1,756)	1:A:57:GLN:HB2	1:A:57:GLN:HE21	5	0.46
(1,756)	1:A:57:GLN:HB3	1:A:57:GLN:HE21	5	0.46

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,756)	1:A:57:GLN:HB3	1:A:57:GLN:HE21	5	0.46
(1,756)	1:A:57:GLN:HB2	1:A:57:GLN:HE21	10	0.46
(1,756)	1:A:57:GLN:HB2	1:A:57:GLN:HE21	10	0.46
(1,756)	1:A:57:GLN:HB3	1:A:57:GLN:HE21	10	0.46
(1,756)	1:A:57:GLN:HB3	1:A:57:GLN:HE21	10	0.46
(1,756)	1:A:57:GLN:HB2	1:A:57:GLN:HE21	11	0.46
(1,756)	1:A:57:GLN:HB2	1:A:57:GLN:HE21	11	0.46
(1,756)	1:A:57:GLN:HB3	1:A:57:GLN:HE21	11	0.46
(1,756)	1:A:57:GLN:HB3	1:A:57:GLN:HE21	11	0.46
(1,73)	1:A:65:CYS:HB2	1:A:65:CYS:H	10	0.46
(1,73)	1:A:65:CYS:HB3	1:A:65:CYS:H	10	0.46
(1,706)	1:A:45:ARG:HB2	1:A:45:ARG:H	20	0.46
(1,706)	1:A:45:ARG:HB3	1:A:45:ARG:H	20	0.46
(1,704)	1:A:100:ARG:HG2	1:A:100:ARG:H	15	0.46
(1,704)	1:A:100:ARG:HG2	1:A:100:ARG:H	15	0.46
(1,704)	1:A:100:ARG:HG3	1:A:100:ARG:H	15	0.46
(1,704)	1:A:100:ARG:HG3	1:A:100:ARG:H	15	0.46
(1,693)	1:A:21:LYS:HD2	1:A:21:LYS:H	19	0.46
(1,693)	1:A:21:LYS:HD3	1:A:21:LYS:H	19	0.46
(1,657)	1:A:105:ASN:HA	1:A:105:ASN:HD22	7	0.46
(1,634)	1:A:79:ASN:HD22	1:A:79:ASN:HA	17	0.46
(1,628)	1:A:71:CYS:HB2	1:A:57:GLN:HE22	20	0.46
(1,628)	1:A:71:CYS:HB3	1:A:57:GLN:HE22	20	0.46
(1,619)	1:A:12:ASN:HD21	1:A:12:ASN:HD22	1	0.46
(1,619)	1:A:12:ASN:HD21	1:A:12:ASN:HD22	2	0.46
(1,619)	1:A:12:ASN:HD21	1:A:12:ASN:HD22	3	0.46
(1,619)	1:A:12:ASN:HD21	1:A:12:ASN:HD22	4	0.46
(1,619)	1:A:12:ASN:HD21	1:A:12:ASN:HD22	5	0.46
(1,619)	1:A:12:ASN:HD21	1:A:12:ASN:HD22	6	0.46
(1,619)	1:A:12:ASN:HD21	1:A:12:ASN:HD22	7	0.46
(1,619)	1:A:12:ASN:HD21	1:A:12:ASN:HD22	8	0.46
(1,619)	1:A:12:ASN:HD21	1:A:12:ASN:HD22	9	0.46
(1,619)	1:A:12:ASN:HD21	1:A:12:ASN:HD22	10	0.46
(1,619)	1:A:12:ASN:HD21	1:A:12:ASN:HD22	11	0.46
(1,619)	1:A:12:ASN:HD21	1:A:12:ASN:HD22	12	0.46
(1,619)	1:A:12:ASN:HD21	1:A:12:ASN:HD22	13	0.46
(1,619)	1:A:12:ASN:HD21	1:A:12:ASN:HD22	14	0.46
(1,619)	1:A:12:ASN:HD21	1:A:12:ASN:HD22	15	0.46
(1,619)	1:A:12:ASN:HD21	1:A:12:ASN:HD22	16	0.46
(1,619)	1:A:12:ASN:HD21	1:A:12:ASN:HD22	17	0.46
(1,619)	1:A:12:ASN:HD21	1:A:12:ASN:HD22	18	0.46
(1,619)	1:A:12:ASN:HD21	1:A:12:ASN:HD22	20	0.46

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,608)	1:A:14:GLN:HG2	1:A:14:GLN:HE21	6	0.46
(1,608)	1:A:14:GLN:HG3	1:A:14:GLN:HE21	6	0.46
(1,608)	1:A:14:GLN:HG2	1:A:14:GLN:HE21	9	0.46
(1,608)	1:A:14:GLN:HG3	1:A:14:GLN:HE21	9	0.46
(1,608)	1:A:14:GLN:HG2	1:A:14:GLN:HE21	13	0.46
(1,608)	1:A:14:GLN:HG3	1:A:14:GLN:HE21	13	0.46
(1,608)	1:A:14:GLN:HG2	1:A:14:GLN:HE21	18	0.46
(1,608)	1:A:14:GLN:HG3	1:A:14:GLN:HE21	18	0.46
(1,583)	1:A:40:HIS:HA	1:A:38:GLN:H	3	0.46
(1,583)	1:A:40:HIS:HA	1:A:38:GLN:H	16	0.46
(1,58)	1:A:66:ASP:H	1:A:65:CYS:H	13	0.46
(1,56)	1:A:70:ASP:H	1:A:71:CYS:H	18	0.46
(1,543)	1:A:112:ASP:HB2	1:A:114:SER:H	1	0.46
(1,543)	1:A:112:ASP:HB3	1:A:114:SER:H	1	0.46
(1,534)	1:A:77:GLU:HB2	1:A:77:GLU:H	14	0.46
(1,534)	1:A:77:GLU:HB3	1:A:77:GLU:H	14	0.46
(1,526)	1:A:64:ARG:H	1:A:67:GLY:H	3	0.46
(1,517)	1:A:59:ILE:HG12	1:A:59:ILE:H	20	0.46
(1,517)	1:A:59:ILE:HG12	1:A:59:ILE:H	20	0.46
(1,517)	1:A:59:ILE:HG13	1:A:59:ILE:H	20	0.46
(1,517)	1:A:59:ILE:HG13	1:A:59:ILE:H	20	0.46
(1,504)	1:A:39:CYS:HB2	1:A:39:CYS:H	15	0.46
(1,504)	1:A:39:CYS:HB3	1:A:39:CYS:H	15	0.46
(1,480)	1:A:10:CYS:HB2	1:A:10:CYS:H	7	0.46
(1,480)	1:A:10:CYS:HB3	1:A:10:CYS:H	7	0.46
(1,466)	1:A:80:CYS:HA	1:A:79:ASN:H	8	0.46
(1,466)	1:A:80:CYS:HA	1:A:79:ASN:H	14	0.46
(1,436)	1:A:73:SER:H	1:A:72:ASP:H	15	0.46
(1,436)	1:A:73:SER:H	1:A:72:ASP:H	19	0.46
(1,399)	1:A:54:HIS:H	1:A:53:ALA:HB1	10	0.46
(1,399)	1:A:54:HIS:H	1:A:53:ALA:HB2	10	0.46
(1,399)	1:A:54:HIS:H	1:A:53:ALA:HB3	10	0.46
(1,371)	1:A:44:CYS:HA	1:A:45:ARG:H	3	0.46
(1,366)	1:A:42:ARG:HB2	1:A:43:THR:H	13	0.46
(1,366)	1:A:42:ARG:HB2	1:A:43:THR:H	13	0.46
(1,366)	1:A:42:ARG:HB3	1:A:43:THR:H	13	0.46
(1,366)	1:A:42:ARG:HB3	1:A:43:THR:H	13	0.46
(1,296)	1:A:10:CYS:HB2	1:A:10:CYS:H	17	0.46
(1,296)	1:A:10:CYS:HB3	1:A:10:CYS:H	17	0.46
(1,27)	1:A:118:ASP:H	1:A:117:LEU:H	11	0.46
(1,2)	1:A:112:ASP:H	1:A:113:GLY:H	16	0.46
(1,140)	1:A:108:ASP:H	1:A:108:ASP:HB2	12	0.46

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,140)	1:A:108:ASP:H	1:A:108:ASP:HB3	12	0.46
(1,140)	1:A:108:ASP:H	1:A:108:ASP:HB2	17	0.46
(1,140)	1:A:108:ASP:H	1:A:108:ASP:HB3	17	0.46
(1,119)	1:A:112:ASP:H	1:A:115:ASP:H	4	0.46
(1,109)	1:A:119:CYS:H	1:A:117:LEU:HG	5	0.46
(2,98)	1:A:28:CYS:HB2	1:A:11:ASN:H	15	0.45
(2,98)	1:A:28:CYS:HB3	1:A:11:ASN:H	15	0.45
(2,98)	1:A:32:SER:HB2	1:A:11:ASN:H	15	0.45
(2,98)	1:A:32:SER:HB3	1:A:11:ASN:H	15	0.45
(2,76)	1:A:28:CYS:HB2	1:A:32:SER:H	11	0.45
(2,76)	1:A:28:CYS:HB3	1:A:32:SER:H	11	0.45
(2,76)	1:A:29:GLU:HA	1:A:32:SER:H	11	0.45
(2,76)	1:A:32:SER:HA	1:A:32:SER:H	11	0.45
(2,76)	1:A:32:SER:HB2	1:A:32:SER:H	11	0.45
(2,76)	1:A:32:SER:HB3	1:A:32:SER:H	11	0.45
(2,76)	1:A:33:ASP:HA	1:A:32:SER:H	11	0.45
(2,76)	1:A:35:SER:HB2	1:A:32:SER:H	11	0.45
(2,76)	1:A:35:SER:HB3	1:A:32:SER:H	11	0.45
(2,76)	1:A:28:CYS:HB2	1:A:32:SER:H	16	0.45
(2,76)	1:A:28:CYS:HB3	1:A:32:SER:H	16	0.45
(2,76)	1:A:29:GLU:HA	1:A:32:SER:H	16	0.45
(2,76)	1:A:32:SER:HA	1:A:32:SER:H	16	0.45
(2,76)	1:A:32:SER:HB2	1:A:32:SER:H	16	0.45
(2,76)	1:A:32:SER:HB3	1:A:32:SER:H	16	0.45
(2,76)	1:A:33:ASP:HA	1:A:32:SER:H	16	0.45
(2,76)	1:A:35:SER:HB2	1:A:32:SER:H	16	0.45
(2,76)	1:A:35:SER:HB3	1:A:32:SER:H	16	0.45
(2,76)	1:A:28:CYS:HB2	1:A:32:SER:H	20	0.45
(2,76)	1:A:28:CYS:HB3	1:A:32:SER:H	20	0.45
(2,76)	1:A:29:GLU:HA	1:A:32:SER:H	20	0.45
(2,76)	1:A:32:SER:HA	1:A:32:SER:H	20	0.45
(2,76)	1:A:32:SER:HB2	1:A:32:SER:H	20	0.45
(2,76)	1:A:32:SER:HB3	1:A:32:SER:H	20	0.45
(2,76)	1:A:33:ASP:HA	1:A:32:SER:H	20	0.45
(2,76)	1:A:35:SER:HB2	1:A:32:SER:H	20	0.45
(2,76)	1:A:35:SER:HB3	1:A:32:SER:H	20	0.45
(2,321)	1:A:64:ARG:HB2	1:A:67:GLY:H	3	0.45
(2,321)	1:A:64:ARG:HB3	1:A:67:GLY:H	3	0.45
(2,321)	1:A:64:ARG:HG2	1:A:67:GLY:H	3	0.45
(2,321)	1:A:64:ARG:HG3	1:A:67:GLY:H	3	0.45
(2,321)	1:A:68:GLU:HB2	1:A:67:GLY:H	3	0.45
(2,321)	1:A:68:GLU:HB3	1:A:67:GLY:H	3	0.45

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,321)	1:A:64:ARG:HB2	1:A:67:GLY:H	6	0.45
(2,321)	1:A:64:ARG:HB3	1:A:67:GLY:H	6	0.45
(2,321)	1:A:64:ARG:HG2	1:A:67:GLY:H	6	0.45
(2,321)	1:A:64:ARG:HG3	1:A:67:GLY:H	6	0.45
(2,321)	1:A:68:GLU:HB2	1:A:67:GLY:H	6	0.45
(2,321)	1:A:68:GLU:HB3	1:A:67:GLY:H	6	0.45
(2,304)	1:A:11:ASN:HD21	1:A:12:ASN:H	17	0.45
(2,304)	1:A:12:ASN:HD22	1:A:12:ASN:H	17	0.45
(2,303)	1:A:75:GLU:HB2	1:A:77:GLU:H	1	0.45
(2,303)	1:A:75:GLU:HB3	1:A:77:GLU:H	1	0.45
(2,303)	1:A:77:GLU:HG2	1:A:77:GLU:H	1	0.45
(2,303)	1:A:77:GLU:HG3	1:A:77:GLU:H	1	0.45
(2,303)	1:A:78:GLU:HB2	1:A:77:GLU:H	1	0.45
(2,303)	1:A:78:GLU:HB3	1:A:77:GLU:H	1	0.45
(2,303)	1:A:87:PRO:HG2	1:A:77:GLU:H	1	0.45
(2,303)	1:A:87:PRO:HG3	1:A:77:GLU:H	1	0.45
(2,275)	1:A:43:THR:HG1	1:A:44:CYS:H	2	0.45
(2,275)	1:A:43:THR:HG1	1:A:44:CYS:H	2	0.45
(2,275)	1:A:43:THR:HG21	1:A:44:CYS:H	2	0.45
(2,275)	1:A:43:THR:HG21	1:A:44:CYS:H	2	0.45
(2,275)	1:A:43:THR:HG22	1:A:44:CYS:H	2	0.45
(2,275)	1:A:43:THR:HG22	1:A:44:CYS:H	2	0.45
(2,275)	1:A:43:THR:HG23	1:A:44:CYS:H	2	0.45
(2,275)	1:A:43:THR:HG23	1:A:44:CYS:H	2	0.45
(2,275)	1:A:56:THR:HG21	1:A:44:CYS:H	2	0.45
(2,275)	1:A:56:THR:HG22	1:A:44:CYS:H	2	0.45
(2,275)	1:A:56:THR:HG23	1:A:44:CYS:H	2	0.45
(2,275)	1:A:43:THR:HG1	1:A:44:CYS:H	8	0.45
(2,275)	1:A:43:THR:HG1	1:A:44:CYS:H	8	0.45
(2,275)	1:A:43:THR:HG21	1:A:44:CYS:H	8	0.45
(2,275)	1:A:43:THR:HG21	1:A:44:CYS:H	8	0.45
(2,275)	1:A:43:THR:HG22	1:A:44:CYS:H	8	0.45
(2,275)	1:A:43:THR:HG22	1:A:44:CYS:H	8	0.45
(2,275)	1:A:43:THR:HG23	1:A:44:CYS:H	8	0.45
(2,275)	1:A:43:THR:HG23	1:A:44:CYS:H	8	0.45
(2,275)	1:A:56:THR:HG21	1:A:44:CYS:H	8	0.45
(2,275)	1:A:56:THR:HG22	1:A:44:CYS:H	8	0.45
(2,275)	1:A:56:THR:HG23	1:A:44:CYS:H	8	0.45
(2,25)	1:A:79:ASN:HD22	1:A:80:CYS:HA	19	0.45
(2,25)	1:A:86:SER:HA	1:A:80:CYS:HA	19	0.45
(2,239)	1:A:64:ARG:HB2	1:A:69:ASN:H	3	0.45
(2,239)	1:A:64:ARG:HB3	1:A:69:ASN:H	3	0.45

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,239)	1:A:64:ARG:HG2	1:A:69:ASN:H	3	0.45
(2,239)	1:A:64:ARG:HG3	1:A:69:ASN:H	3	0.45
(2,239)	1:A:68:GLU:HB2	1:A:69:ASN:H	3	0.45
(2,239)	1:A:68:GLU:HB3	1:A:69:ASN:H	3	0.45
(2,207)	1:A:79:ASN:HB2	1:A:79:ASN:HD22	1	0.45
(2,207)	1:A:97:CYS:HB2	1:A:79:ASN:HD22	1	0.45
(2,184)	1:A:16:VAL:HG11	1:A:15:CYS:H	2	0.45
(2,184)	1:A:16:VAL:HG11	1:A:15:CYS:H	2	0.45
(2,184)	1:A:16:VAL:HG11	1:A:15:CYS:H	2	0.45
(2,184)	1:A:16:VAL:HG12	1:A:15:CYS:H	2	0.45
(2,184)	1:A:16:VAL:HG12	1:A:15:CYS:H	2	0.45
(2,184)	1:A:16:VAL:HG12	1:A:15:CYS:H	2	0.45
(2,184)	1:A:16:VAL:HG13	1:A:15:CYS:H	2	0.45
(2,184)	1:A:16:VAL:HG13	1:A:15:CYS:H	2	0.45
(2,184)	1:A:16:VAL:HG13	1:A:15:CYS:H	2	0.45
(2,184)	1:A:16:VAL:HG21	1:A:15:CYS:H	2	0.45
(2,184)	1:A:16:VAL:HG21	1:A:15:CYS:H	2	0.45
(2,184)	1:A:16:VAL:HG21	1:A:15:CYS:H	2	0.45
(2,184)	1:A:16:VAL:HG22	1:A:15:CYS:H	2	0.45
(2,184)	1:A:16:VAL:HG22	1:A:15:CYS:H	2	0.45
(2,184)	1:A:16:VAL:HG22	1:A:15:CYS:H	2	0.45
(2,184)	1:A:16:VAL:HG23	1:A:15:CYS:H	2	0.45
(2,184)	1:A:16:VAL:HG23	1:A:15:CYS:H	2	0.45
(2,184)	1:A:16:VAL:HG23	1:A:15:CYS:H	2	0.45
(2,184)	1:A:16:VAL:HG23	1:A:15:CYS:H	2	0.45
(2,184)	1:A:16:VAL:HG11	1:A:15:CYS:H	6	0.45
(2,184)	1:A:16:VAL:HG11	1:A:15:CYS:H	6	0.45
(2,184)	1:A:16:VAL:HG11	1:A:15:CYS:H	6	0.45
(2,184)	1:A:16:VAL:HG12	1:A:15:CYS:H	6	0.45
(2,184)	1:A:16:VAL:HG12	1:A:15:CYS:H	6	0.45
(2,184)	1:A:16:VAL:HG12	1:A:15:CYS:H	6	0.45
(2,184)	1:A:16:VAL:HG13	1:A:15:CYS:H	6	0.45
(2,184)	1:A:16:VAL:HG13	1:A:15:CYS:H	6	0.45
(2,184)	1:A:16:VAL:HG13	1:A:15:CYS:H	6	0.45
(2,184)	1:A:16:VAL:HG21	1:A:15:CYS:H	6	0.45
(2,184)	1:A:16:VAL:HG21	1:A:15:CYS:H	6	0.45
(2,184)	1:A:16:VAL:HG21	1:A:15:CYS:H	6	0.45
(2,184)	1:A:16:VAL:HG22	1:A:15:CYS:H	6	0.45
(2,184)	1:A:16:VAL:HG22	1:A:15:CYS:H	6	0.45
(2,184)	1:A:16:VAL:HG22	1:A:15:CYS:H	6	0.45
(2,184)	1:A:16:VAL:HG23	1:A:15:CYS:H	6	0.45
(2,184)	1:A:16:VAL:HG23	1:A:15:CYS:H	6	0.45
(2,184)	1:A:16:VAL:HG23	1:A:15:CYS:H	6	0.45

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,18)	1:A:111:SER:HA	1:A:113:GLY:H	7	0.45
(2,18)	1:A:113:GLY:HA2	1:A:113:GLY:H	7	0.45
(2,18)	1:A:113:GLY:HA3	1:A:113:GLY:H	7	0.45
(2,137)	1:A:116:GLU:HB2	1:A:117:LEU:H	8	0.45
(2,137)	1:A:116:GLU:HB3	1:A:117:LEU:H	8	0.45
(2,137)	1:A:117:LEU:HB2	1:A:117:LEU:H	8	0.45
(2,137)	1:A:117:LEU:HB3	1:A:117:LEU:H	8	0.45
(1,97)	1:A:98:ILE:HD11	1:A:99:SER:H	6	0.45
(1,97)	1:A:98:ILE:HD12	1:A:99:SER:H	6	0.45
(1,97)	1:A:98:ILE:HD13	1:A:99:SER:H	6	0.45
(1,97)	1:A:98:ILE:HD11	1:A:99:SER:H	7	0.45
(1,97)	1:A:98:ILE:HD12	1:A:99:SER:H	7	0.45
(1,97)	1:A:98:ILE:HD13	1:A:99:SER:H	7	0.45
(1,97)	1:A:98:ILE:HD11	1:A:99:SER:H	17	0.45
(1,97)	1:A:98:ILE:HD12	1:A:99:SER:H	17	0.45
(1,97)	1:A:98:ILE:HD13	1:A:99:SER:H	17	0.45
(1,93)	1:A:8:PHE:H	1:A:7:ASP:HA	6	0.45
(1,923)	1:A:8:PHE:HB2	1:A:16:VAL:HA	4	0.45
(1,916)	1:A:77:GLU:HB2	1:A:77:GLU:H	6	0.45
(1,916)	1:A:77:GLU:HB3	1:A:77:GLU:H	6	0.45
(1,896)	1:A:64:ARG:H	1:A:66:ASP:H	17	0.45
(1,888)	1:A:49:ILE:HA	1:A:61:VAL:H	17	0.45
(1,871)	1:A:30:ASP:HB2	1:A:32:SER:H	3	0.45
(1,871)	1:A:30:ASP:HB3	1:A:32:SER:H	3	0.45
(1,871)	1:A:30:ASP:HB2	1:A:32:SER:H	18	0.45
(1,871)	1:A:30:ASP:HB3	1:A:32:SER:H	18	0.45
(1,856)	1:A:14:GLN:H	1:A:12:ASN:HD22	12	0.45
(1,850)	1:A:12:ASN:H	1:A:11:ASN:HD22	20	0.45
(1,85)	1:A:21:LYS:HG2	1:A:22:CYS:H	1	0.45
(1,85)	1:A:21:LYS:HG3	1:A:22:CYS:H	1	0.45
(1,833)	1:A:42:ARG:HG2	1:A:41:MET:H	5	0.45
(1,833)	1:A:42:ARG:HG2	1:A:41:MET:H	5	0.45
(1,833)	1:A:42:ARG:HG3	1:A:41:MET:H	5	0.45
(1,833)	1:A:42:ARG:HG3	1:A:41:MET:H	5	0.45
(1,820)	1:A:110:CYS:H	1:A:115:ASP:H	8	0.45
(1,820)	1:A:110:CYS:H	1:A:115:ASP:H	10	0.45
(1,81)	1:A:28:CYS:HA	1:A:33:ASP:H	20	0.45
(1,797)	1:A:91:THR:HG1	1:A:96:ARG:H	14	0.45
(1,797)	1:A:91:THR:HG21	1:A:96:ARG:H	14	0.45
(1,797)	1:A:91:THR:HG22	1:A:96:ARG:H	14	0.45
(1,797)	1:A:91:THR:HG23	1:A:96:ARG:H	14	0.45
(1,776)	1:A:77:GLU:HG2	1:A:70:ASP:H	2	0.45

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,776)	1:A:77:GLU:HG3	1:A:70:ASP:H	2	0.45
(1,772)	1:A:68:GLU:H	1:A:64:ARG:H	19	0.45
(1,750)	1:A:57:GLN:HB2	1:A:52:GLY:H	1	0.45
(1,750)	1:A:57:GLN:HB2	1:A:52:GLY:H	1	0.45
(1,750)	1:A:57:GLN:HB3	1:A:52:GLY:H	1	0.45
(1,750)	1:A:57:GLN:HB3	1:A:52:GLY:H	1	0.45
(1,740)	1:A:35:SER:H	1:A:56:THR:HG1	19	0.45
(1,740)	1:A:35:SER:H	1:A:56:THR:HG21	19	0.45
(1,740)	1:A:35:SER:H	1:A:56:THR:HG22	19	0.45
(1,740)	1:A:35:SER:H	1:A:56:THR:HG23	19	0.45
(1,735)	1:A:28:CYS:HB2	1:A:33:ASP:H	18	0.45
(1,735)	1:A:28:CYS:HB3	1:A:33:ASP:H	18	0.45
(1,732)	1:A:31:GLY:HA2	1:A:32:SER:H	11	0.45
(1,732)	1:A:31:GLY:HA3	1:A:32:SER:H	11	0.45
(1,732)	1:A:31:GLY:HA2	1:A:32:SER:H	16	0.45
(1,732)	1:A:31:GLY:HA3	1:A:32:SER:H	16	0.45
(1,73)	1:A:65:CYS:HB2	1:A:65:CYS:H	8	0.45
(1,73)	1:A:65:CYS:HB3	1:A:65:CYS:H	8	0.45
(1,721)	1:A:21:LYS:HG2	1:A:22:CYS:H	7	0.45
(1,721)	1:A:21:LYS:HG3	1:A:22:CYS:H	7	0.45
(1,706)	1:A:45:ARG:HB2	1:A:45:ARG:H	18	0.45
(1,706)	1:A:45:ARG:HB3	1:A:45:ARG:H	18	0.45
(1,704)	1:A:100:ARG:HG2	1:A:100:ARG:H	20	0.45
(1,704)	1:A:100:ARG:HG2	1:A:100:ARG:H	20	0.45
(1,704)	1:A:100:ARG:HG3	1:A:100:ARG:H	20	0.45
(1,704)	1:A:100:ARG:HG3	1:A:100:ARG:H	20	0.45
(1,693)	1:A:21:LYS:HD2	1:A:21:LYS:H	7	0.45
(1,693)	1:A:21:LYS:HD3	1:A:21:LYS:H	7	0.45
(1,687)	1:A:69:ASN:HD21	1:A:74:GLY:H	20	0.45
(1,686)	1:A:74:GLY:H	1:A:69:ASN:HD22	19	0.45
(1,685)	1:A:107:GLN:HG2	1:A:107:GLN:HE21	4	0.45
(1,685)	1:A:107:GLN:HG2	1:A:107:GLN:HE21	4	0.45
(1,685)	1:A:107:GLN:HG3	1:A:107:GLN:HE21	4	0.45
(1,685)	1:A:107:GLN:HG3	1:A:107:GLN:HE21	4	0.45
(1,670)	1:A:107:GLN:HB2	1:A:105:ASN:HD22	16	0.45
(1,670)	1:A:107:GLN:HB2	1:A:105:ASN:HD22	16	0.45
(1,670)	1:A:107:GLN:HB3	1:A:105:ASN:HD22	16	0.45
(1,670)	1:A:107:GLN:HB3	1:A:105:ASN:HD22	16	0.45
(1,654)	1:A:107:GLN:HB2	1:A:107:GLN:HE22	5	0.45
(1,654)	1:A:107:GLN:HB2	1:A:107:GLN:HE22	5	0.45
(1,654)	1:A:107:GLN:HB3	1:A:107:GLN:HE22	5	0.45
(1,654)	1:A:107:GLN:HB3	1:A:107:GLN:HE22	5	0.45

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,643)	1:A:82:ASN:HB2	1:A:82:ASN:HD21	8	0.45
(1,643)	1:A:82:ASN:HB2	1:A:82:ASN:HD21	8	0.45
(1,643)	1:A:82:ASN:HB3	1:A:82:ASN:HD21	8	0.45
(1,643)	1:A:82:ASN:HB3	1:A:82:ASN:HD21	8	0.45
(1,642)	1:A:82:ASN:HA	1:A:82:ASN:HD22	17	0.45
(1,619)	1:A:12:ASN:HD21	1:A:12:ASN:HD22	19	0.45
(1,608)	1:A:14:GLN:HG2	1:A:14:GLN:HE21	10	0.45
(1,608)	1:A:14:GLN:HG3	1:A:14:GLN:HE21	10	0.45
(1,608)	1:A:14:GLN:HG2	1:A:14:GLN:HE21	14	0.45
(1,608)	1:A:14:GLN:HG3	1:A:14:GLN:HE21	14	0.45
(1,60)	1:A:56:THR:H	1:A:57:GLN:H	17	0.45
(1,587)	1:A:14:GLN:H	1:A:12:ASN:H	11	0.45
(1,587)	1:A:14:GLN:H	1:A:12:ASN:H	16	0.45
(1,587)	1:A:14:GLN:H	1:A:12:ASN:H	19	0.45
(1,587)	1:A:14:GLN:H	1:A:12:ASN:H	20	0.45
(1,583)	1:A:40:HIS:HA	1:A:38:GLN:H	1	0.45
(1,58)	1:A:66:ASP:H	1:A:65:CYS:H	6	0.45
(1,56)	1:A:70:ASP:H	1:A:71:CYS:H	14	0.45
(1,466)	1:A:80:CYS:HA	1:A:79:ASN:H	12	0.45
(1,466)	1:A:80:CYS:HA	1:A:79:ASN:H	18	0.45
(1,454)	1:A:78:GLU:HG2	1:A:76:ASP:H	10	0.45
(1,454)	1:A:78:GLU:HG3	1:A:76:ASP:H	10	0.45
(1,447)	1:A:71:CYS:HA	1:A:74:GLY:H	11	0.45
(1,366)	1:A:42:ARG:HB2	1:A:43:THR:H	7	0.45
(1,366)	1:A:42:ARG:HB2	1:A:43:THR:H	7	0.45
(1,366)	1:A:42:ARG:HB3	1:A:43:THR:H	7	0.45
(1,366)	1:A:42:ARG:HB3	1:A:43:THR:H	7	0.45
(1,359)	1:A:40:HIS:H	1:A:40:HIS:HB2	8	0.45
(1,359)	1:A:40:HIS:H	1:A:40:HIS:HB3	8	0.45
(1,346)	1:A:32:SER:H	1:A:31:GLY:H	7	0.45
(1,327)	1:A:22:CYS:HB2	1:A:22:CYS:H	7	0.45
(1,327)	1:A:22:CYS:HB3	1:A:22:CYS:H	7	0.45
(1,327)	1:A:22:CYS:HB2	1:A:22:CYS:H	20	0.45
(1,327)	1:A:22:CYS:HB3	1:A:22:CYS:H	20	0.45
(1,323)	1:A:64:ARG:H	1:A:80:CYS:HB2	11	0.45
(1,323)	1:A:64:ARG:H	1:A:80:CYS:HB3	11	0.45
(1,323)	1:A:64:ARG:H	1:A:80:CYS:HB2	16	0.45
(1,323)	1:A:64:ARG:H	1:A:80:CYS:HB3	16	0.45
(1,298)	1:A:14:GLN:H	1:A:11:ASN:H	5	0.45
(1,27)	1:A:118:ASP:H	1:A:117:LEU:H	12	0.45
(1,252)	1:A:82:ASN:HB2	1:A:83:ILE:H	10	0.45
(1,252)	1:A:82:ASN:HB2	1:A:83:ILE:H	10	0.45

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,252)	1:A:82:ASN:HB3	1:A:83:ILE:H	10	0.45
(1,252)	1:A:82:ASN:HB3	1:A:83:ILE:H	10	0.45
(1,140)	1:A:108:ASP:H	1:A:108:ASP:HB2	20	0.45
(1,140)	1:A:108:ASP:H	1:A:108:ASP:HB3	20	0.45
(1,119)	1:A:112:ASP:H	1:A:115:ASP:H	7	0.45
(1,118)	1:A:115:ASP:H	1:A:113:GLY:H	13	0.45
(1,118)	1:A:115:ASP:H	1:A:113:GLY:H	18	0.45
(2,98)	1:A:28:CYS:HB2	1:A:11:ASN:H	5	0.44
(2,98)	1:A:28:CYS:HB3	1:A:11:ASN:H	5	0.44
(2,98)	1:A:32:SER:HB2	1:A:11:ASN:H	5	0.44
(2,98)	1:A:32:SER:HB3	1:A:11:ASN:H	5	0.44
(2,76)	1:A:28:CYS:HB2	1:A:32:SER:H	2	0.44
(2,76)	1:A:28:CYS:HB3	1:A:32:SER:H	2	0.44
(2,76)	1:A:29:GLU:HA	1:A:32:SER:H	2	0.44
(2,76)	1:A:32:SER:HA	1:A:32:SER:H	2	0.44
(2,76)	1:A:32:SER:HB2	1:A:32:SER:H	2	0.44
(2,76)	1:A:32:SER:HB3	1:A:32:SER:H	2	0.44
(2,76)	1:A:33:ASP:HA	1:A:32:SER:H	2	0.44
(2,76)	1:A:35:SER:HB2	1:A:32:SER:H	2	0.44
(2,76)	1:A:35:SER:HB3	1:A:32:SER:H	2	0.44
(2,76)	1:A:28:CYS:HB2	1:A:32:SER:H	17	0.44
(2,76)	1:A:28:CYS:HB3	1:A:32:SER:H	17	0.44
(2,76)	1:A:29:GLU:HA	1:A:32:SER:H	17	0.44
(2,76)	1:A:32:SER:HA	1:A:32:SER:H	17	0.44
(2,76)	1:A:32:SER:HB2	1:A:32:SER:H	17	0.44
(2,76)	1:A:32:SER:HB3	1:A:32:SER:H	17	0.44
(2,76)	1:A:33:ASP:HA	1:A:32:SER:H	17	0.44
(2,76)	1:A:35:SER:HB2	1:A:32:SER:H	17	0.44
(2,76)	1:A:35:SER:HB3	1:A:32:SER:H	17	0.44
(2,62)	1:A:56:THR:HG1	1:A:56:THR:H	3	0.44
(2,62)	1:A:56:THR:HG1	1:A:56:THR:H	3	0.44
(2,62)	1:A:56:THR:HG21	1:A:56:THR:H	3	0.44
(2,62)	1:A:56:THR:HG21	1:A:56:THR:H	3	0.44
(2,62)	1:A:56:THR:HG22	1:A:56:THR:H	3	0.44
(2,62)	1:A:56:THR:HG22	1:A:56:THR:H	3	0.44
(2,62)	1:A:56:THR:HG23	1:A:56:THR:H	3	0.44
(2,62)	1:A:56:THR:HG23	1:A:56:THR:H	3	0.44
(2,341)	1:A:78:GLU:HG2	1:A:78:GLU:H	13	0.44
(2,341)	1:A:78:GLU:HG3	1:A:78:GLU:H	13	0.44
(2,341)	1:A:87:PRO:HB2	1:A:78:GLU:H	13	0.44
(2,341)	1:A:87:PRO:HB3	1:A:78:GLU:H	13	0.44
(2,304)	1:A:11:ASN:HD21	1:A:12:ASN:H	1	0.44

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,304)	1:A:12:ASN:HD22	1:A:12:ASN:H	1	0.44
(2,275)	1:A:43:THR:HG1	1:A:44:CYS:H	14	0.44
(2,275)	1:A:43:THR:HG1	1:A:44:CYS:H	14	0.44
(2,275)	1:A:43:THR:HG21	1:A:44:CYS:H	14	0.44
(2,275)	1:A:43:THR:HG21	1:A:44:CYS:H	14	0.44
(2,275)	1:A:43:THR:HG22	1:A:44:CYS:H	14	0.44
(2,275)	1:A:43:THR:HG22	1:A:44:CYS:H	14	0.44
(2,275)	1:A:43:THR:HG23	1:A:44:CYS:H	14	0.44
(2,275)	1:A:43:THR:HG23	1:A:44:CYS:H	14	0.44
(2,275)	1:A:56:THR:HG21	1:A:44:CYS:H	14	0.44
(2,275)	1:A:56:THR:HG22	1:A:44:CYS:H	14	0.44
(2,275)	1:A:56:THR:HG23	1:A:44:CYS:H	14	0.44
(2,239)	1:A:64:ARG:HB2	1:A:69:ASN:H	16	0.44
(2,239)	1:A:64:ARG:HB3	1:A:69:ASN:H	16	0.44
(2,239)	1:A:64:ARG:HG2	1:A:69:ASN:H	16	0.44
(2,239)	1:A:64:ARG:HG3	1:A:69:ASN:H	16	0.44
(2,239)	1:A:68:GLU:HB2	1:A:69:ASN:H	16	0.44
(2,239)	1:A:68:GLU:HB3	1:A:69:ASN:H	16	0.44
(2,223)	1:A:45:ARG:HG2	1:A:45:ARG:H	4	0.44
(2,223)	1:A:45:ARG:HG3	1:A:45:ARG:H	4	0.44
(2,223)	1:A:46:ILE:HB	1:A:45:ARG:H	4	0.44
(2,212)	1:A:88:ASP:H	1:A:86:SER:H	8	0.44
(2,208)	1:A:43:THR:HG1	1:A:52:GLY:H	8	0.44
(2,208)	1:A:43:THR:HG1	1:A:52:GLY:H	8	0.44
(2,208)	1:A:43:THR:HG21	1:A:52:GLY:H	8	0.44
(2,208)	1:A:43:THR:HG21	1:A:52:GLY:H	8	0.44
(2,208)	1:A:43:THR:HG22	1:A:52:GLY:H	8	0.44
(2,208)	1:A:43:THR:HG22	1:A:52:GLY:H	8	0.44
(2,208)	1:A:43:THR:HG23	1:A:52:GLY:H	8	0.44
(2,208)	1:A:43:THR:HG23	1:A:52:GLY:H	8	0.44
(2,208)	1:A:53:ALA:HB1	1:A:52:GLY:H	8	0.44
(2,208)	1:A:53:ALA:HB2	1:A:52:GLY:H	8	0.44
(2,208)	1:A:53:ALA:HB3	1:A:52:GLY:H	8	0.44
(2,208)	1:A:56:THR:HG21	1:A:52:GLY:H	8	0.44
(2,208)	1:A:56:THR:HG22	1:A:52:GLY:H	8	0.44
(2,208)	1:A:56:THR:HG23	1:A:52:GLY:H	8	0.44
(2,207)	1:A:79:ASN:HB2	1:A:79:ASN:HD22	5	0.44
(2,207)	1:A:97:CYS:HB2	1:A:79:ASN:HD22	5	0.44
(2,184)	1:A:16:VAL:HG11	1:A:15:CYS:H	8	0.44
(2,184)	1:A:16:VAL:HG11	1:A:15:CYS:H	8	0.44
(2,184)	1:A:16:VAL:HG11	1:A:15:CYS:H	8	0.44
(2,184)	1:A:16:VAL:HG12	1:A:15:CYS:H	8	0.44

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,184)	1:A:16:VAL:HG12	1:A:15:CYS:H	8	0.44
(2,184)	1:A:16:VAL:HG12	1:A:15:CYS:H	8	0.44
(2,184)	1:A:16:VAL:HG13	1:A:15:CYS:H	8	0.44
(2,184)	1:A:16:VAL:HG13	1:A:15:CYS:H	8	0.44
(2,184)	1:A:16:VAL:HG13	1:A:15:CYS:H	8	0.44
(2,184)	1:A:16:VAL:HG21	1:A:15:CYS:H	8	0.44
(2,184)	1:A:16:VAL:HG21	1:A:15:CYS:H	8	0.44
(2,184)	1:A:16:VAL:HG21	1:A:15:CYS:H	8	0.44
(2,184)	1:A:16:VAL:HG22	1:A:15:CYS:H	8	0.44
(2,184)	1:A:16:VAL:HG22	1:A:15:CYS:H	8	0.44
(2,184)	1:A:16:VAL:HG22	1:A:15:CYS:H	8	0.44
(2,184)	1:A:16:VAL:HG23	1:A:15:CYS:H	8	0.44
(2,184)	1:A:16:VAL:HG23	1:A:15:CYS:H	8	0.44
(2,184)	1:A:16:VAL:HG23	1:A:15:CYS:H	8	0.44
(2,184)	1:A:16:VAL:HG11	1:A:15:CYS:H	10	0.44
(2,184)	1:A:16:VAL:HG11	1:A:15:CYS:H	10	0.44
(2,184)	1:A:16:VAL:HG11	1:A:15:CYS:H	10	0.44
(2,184)	1:A:16:VAL:HG12	1:A:15:CYS:H	10	0.44
(2,184)	1:A:16:VAL:HG12	1:A:15:CYS:H	10	0.44
(2,184)	1:A:16:VAL:HG12	1:A:15:CYS:H	10	0.44
(2,184)	1:A:16:VAL:HG13	1:A:15:CYS:H	10	0.44
(2,184)	1:A:16:VAL:HG13	1:A:15:CYS:H	10	0.44
(2,184)	1:A:16:VAL:HG13	1:A:15:CYS:H	10	0.44
(2,184)	1:A:16:VAL:HG21	1:A:15:CYS:H	10	0.44
(2,184)	1:A:16:VAL:HG21	1:A:15:CYS:H	10	0.44
(2,184)	1:A:16:VAL:HG21	1:A:15:CYS:H	10	0.44
(2,184)	1:A:16:VAL:HG22	1:A:15:CYS:H	10	0.44
(2,184)	1:A:16:VAL:HG22	1:A:15:CYS:H	10	0.44
(2,184)	1:A:16:VAL:HG22	1:A:15:CYS:H	10	0.44
(2,184)	1:A:16:VAL:HG23	1:A:15:CYS:H	10	0.44
(2,184)	1:A:16:VAL:HG23	1:A:15:CYS:H	10	0.44
(2,184)	1:A:16:VAL:HG23	1:A:15:CYS:H	10	0.44
(2,160)	1:A:43:THR:HG1	1:A:43:THR:H	8	0.44
(2,160)	1:A:43:THR:HG1	1:A:43:THR:H	8	0.44
(2,160)	1:A:43:THR:HG21	1:A:43:THR:H	8	0.44
(2,160)	1:A:43:THR:HG21	1:A:43:THR:H	8	0.44
(2,160)	1:A:43:THR:HG22	1:A:43:THR:H	8	0.44
(2,160)	1:A:43:THR:HG22	1:A:43:THR:H	8	0.44
(2,160)	1:A:43:THR:HG23	1:A:43:THR:H	8	0.44
(2,160)	1:A:43:THR:HG23	1:A:43:THR:H	8	0.44
(2,160)	1:A:56:THR:HG1	1:A:43:THR:H	8	0.44
(2,160)	1:A:56:THR:HG21	1:A:43:THR:H	8	0.44

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,160)	1:A:56:THR:HG22	1:A:43:THR:H	8	0.44
(2,160)	1:A:56:THR:HG23	1:A:43:THR:H	8	0.44
(2,131)	1:A:25:ASP:HB2	1:A:27:ASP:H	5	0.44
(2,131)	1:A:25:ASP:HB3	1:A:27:ASP:H	5	0.44
(2,131)	1:A:33:ASP:HB2	1:A:27:ASP:H	5	0.44
(2,131)	1:A:34:GLU:HB3	1:A:27:ASP:H	5	0.44
(2,114)	1:A:16:VAL:HG11	1:A:16:VAL:H	2	0.44
(2,114)	1:A:16:VAL:HG12	1:A:16:VAL:H	2	0.44
(2,114)	1:A:16:VAL:HG13	1:A:16:VAL:H	2	0.44
(2,114)	1:A:16:VAL:HG21	1:A:16:VAL:H	2	0.44
(2,114)	1:A:16:VAL:HG21	1:A:16:VAL:H	2	0.44
(2,114)	1:A:16:VAL:HG22	1:A:16:VAL:H	2	0.44
(2,114)	1:A:16:VAL:HG22	1:A:16:VAL:H	2	0.44
(2,114)	1:A:16:VAL:HG23	1:A:16:VAL:H	2	0.44
(2,114)	1:A:16:VAL:HG23	1:A:16:VAL:H	2	0.44
(2,114)	1:A:16:VAL:HG11	1:A:16:VAL:H	7	0.44
(2,114)	1:A:16:VAL:HG12	1:A:16:VAL:H	7	0.44
(2,114)	1:A:16:VAL:HG13	1:A:16:VAL:H	7	0.44
(2,114)	1:A:16:VAL:HG21	1:A:16:VAL:H	7	0.44
(2,114)	1:A:16:VAL:HG21	1:A:16:VAL:H	7	0.44
(2,114)	1:A:16:VAL:HG22	1:A:16:VAL:H	7	0.44
(2,114)	1:A:16:VAL:HG22	1:A:16:VAL:H	7	0.44
(2,114)	1:A:16:VAL:HG23	1:A:16:VAL:H	7	0.44
(2,114)	1:A:16:VAL:HG23	1:A:16:VAL:H	7	0.44
(1,99)	1:A:98:ILE:HG12	1:A:99:SER:H	12	0.44
(1,99)	1:A:98:ILE:HG13	1:A:99:SER:H	12	0.44
(1,93)	1:A:8:PHE:H	1:A:7:ASP:HA	12	0.44
(1,898)	1:A:57:GLN:HE22	1:A:71:CYS:H	10	0.44
(1,896)	1:A:64:ARG:H	1:A:66:ASP:H	4	0.44
(1,896)	1:A:64:ARG:H	1:A:66:ASP:H	14	0.44
(1,831)	1:A:73:SER:H	1:A:75:GLU:H	12	0.44
(1,831)	1:A:73:SER:H	1:A:75:GLU:H	14	0.44
(1,831)	1:A:73:SER:H	1:A:75:GLU:H	15	0.44
(1,819)	1:A:112:ASP:HB2	1:A:115:ASP:H	20	0.44
(1,819)	1:A:112:ASP:HB3	1:A:115:ASP:H	20	0.44
(1,807)	1:A:98:ILE:HG12	1:A:103:VAL:H	14	0.44
(1,807)	1:A:98:ILE:HG13	1:A:103:VAL:H	14	0.44
(1,807)	1:A:98:ILE:HG12	1:A:103:VAL:H	15	0.44
(1,807)	1:A:98:ILE:HG13	1:A:103:VAL:H	15	0.44
(1,789)	1:A:85:CYS:H	1:A:84:THR:HB	1	0.44
(1,789)	1:A:85:CYS:H	1:A:84:THR:HB	6	0.44
(1,756)	1:A:57:GLN:HB2	1:A:57:GLN:HE21	1	0.44

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,756)	1:A:57:GLN:HB2	1:A:57:GLN:HE21	1	0.44
(1,756)	1:A:57:GLN:HB3	1:A:57:GLN:HE21	1	0.44
(1,756)	1:A:57:GLN:HB3	1:A:57:GLN:HE21	1	0.44
(1,747)	1:A:57:GLN:HB2	1:A:51:CYS:H	20	0.44
(1,747)	1:A:57:GLN:HB2	1:A:51:CYS:H	20	0.44
(1,747)	1:A:57:GLN:HB3	1:A:51:CYS:H	20	0.44
(1,747)	1:A:57:GLN:HB3	1:A:51:CYS:H	20	0.44
(1,733)	1:A:32:SER:H	1:A:28:CYS:H	6	0.44
(1,732)	1:A:31:GLY:HA2	1:A:32:SER:H	13	0.44
(1,732)	1:A:31:GLY:HA3	1:A:32:SER:H	13	0.44
(1,732)	1:A:31:GLY:HA2	1:A:32:SER:H	20	0.44
(1,732)	1:A:31:GLY:HA3	1:A:32:SER:H	20	0.44
(1,729)	1:A:32:SER:H	1:A:28:CYS:H	6	0.44
(1,721)	1:A:21:LYS:HG2	1:A:22:CYS:H	17	0.44
(1,721)	1:A:21:LYS:HG3	1:A:22:CYS:H	17	0.44
(1,721)	1:A:21:LYS:HG2	1:A:22:CYS:H	19	0.44
(1,721)	1:A:21:LYS:HG3	1:A:22:CYS:H	19	0.44
(1,708)	1:A:44:CYS:HB2	1:A:45:ARG:H	19	0.44
(1,708)	1:A:44:CYS:HB3	1:A:45:ARG:H	19	0.44
(1,706)	1:A:45:ARG:HB2	1:A:45:ARG:H	9	0.44
(1,706)	1:A:45:ARG:HB3	1:A:45:ARG:H	9	0.44
(1,706)	1:A:45:ARG:HB2	1:A:45:ARG:H	12	0.44
(1,706)	1:A:45:ARG:HB3	1:A:45:ARG:H	12	0.44
(1,696)	1:A:44:CYS:HB2	1:A:34:GLU:H	11	0.44
(1,696)	1:A:44:CYS:HB3	1:A:34:GLU:H	11	0.44
(1,693)	1:A:21:LYS:HD2	1:A:21:LYS:H	13	0.44
(1,693)	1:A:21:LYS:HD3	1:A:21:LYS:H	13	0.44
(1,687)	1:A:69:ASN:HD21	1:A:74:GLY:H	17	0.44
(1,657)	1:A:105:ASN:HA	1:A:105:ASN:HD22	1	0.44
(1,657)	1:A:105:ASN:HA	1:A:105:ASN:HD22	8	0.44
(1,657)	1:A:105:ASN:HA	1:A:105:ASN:HD22	10	0.44
(1,657)	1:A:105:ASN:HA	1:A:105:ASN:HD22	16	0.44
(1,654)	1:A:107:GLN:HB2	1:A:107:GLN:HE22	19	0.44
(1,654)	1:A:107:GLN:HB2	1:A:107:GLN:HE22	19	0.44
(1,654)	1:A:107:GLN:HB3	1:A:107:GLN:HE22	19	0.44
(1,654)	1:A:107:GLN:HB3	1:A:107:GLN:HE22	19	0.44
(1,643)	1:A:82:ASN:HB2	1:A:82:ASN:HD21	12	0.44
(1,643)	1:A:82:ASN:HB2	1:A:82:ASN:HD21	12	0.44
(1,643)	1:A:82:ASN:HB3	1:A:82:ASN:HD21	12	0.44
(1,643)	1:A:82:ASN:HB3	1:A:82:ASN:HD21	12	0.44
(1,634)	1:A:79:ASN:HD22	1:A:79:ASN:HA	12	0.44
(1,634)	1:A:79:ASN:HD22	1:A:79:ASN:HA	15	0.44

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,60)	1:A:56:THR:H	1:A:57:GLN:H	5	0.44
(1,60)	1:A:56:THR:H	1:A:57:GLN:H	13	0.44
(1,587)	1:A:14:GLN:H	1:A:12:ASN:H	17	0.44
(1,553)	1:A:115:ASP:HB2	1:A:104:CYS:H	20	0.44
(1,553)	1:A:115:ASP:HB3	1:A:104:CYS:H	20	0.44
(1,504)	1:A:39:CYS:HB2	1:A:39:CYS:H	14	0.44
(1,504)	1:A:39:CYS:HB3	1:A:39:CYS:H	14	0.44
(1,486)	1:A:7:ASP:HA	1:A:19:ARG:H	14	0.44
(1,446)	1:A:73:SER:H	1:A:74:GLY:H	10	0.44
(1,366)	1:A:42:ARG:HB2	1:A:43:THR:H	19	0.44
(1,366)	1:A:42:ARG:HB2	1:A:43:THR:H	19	0.44
(1,366)	1:A:42:ARG:HB3	1:A:43:THR:H	19	0.44
(1,366)	1:A:42:ARG:HB3	1:A:43:THR:H	19	0.44
(1,327)	1:A:22:CYS:HB2	1:A:22:CYS:H	11	0.44
(1,327)	1:A:22:CYS:HB3	1:A:22:CYS:H	11	0.44
(1,327)	1:A:22:CYS:HB2	1:A:22:CYS:H	12	0.44
(1,327)	1:A:22:CYS:HB3	1:A:22:CYS:H	12	0.44
(1,320)	1:A:7:ASP:HA	1:A:18:SER:H	20	0.44
(1,298)	1:A:14:GLN:H	1:A:11:ASN:H	16	0.44
(1,27)	1:A:118:ASP:H	1:A:117:LEU:H	15	0.44
(1,174)	1:A:103:VAL:H	1:A:101:ASN:HB2	6	0.44
(1,174)	1:A:103:VAL:H	1:A:101:ASN:HB3	6	0.44
(1,158)	1:A:104:CYS:HA	1:A:105:ASN:H	9	0.44
(1,140)	1:A:108:ASP:H	1:A:108:ASP:HB2	11	0.44
(1,140)	1:A:108:ASP:H	1:A:108:ASP:HB3	11	0.44
(1,140)	1:A:108:ASP:H	1:A:108:ASP:HB2	14	0.44
(1,140)	1:A:108:ASP:H	1:A:108:ASP:HB3	14	0.44
(1,140)	1:A:108:ASP:H	1:A:108:ASP:HB2	15	0.44
(1,140)	1:A:108:ASP:H	1:A:108:ASP:HB3	15	0.44
(1,118)	1:A:115:ASP:H	1:A:113:GLY:H	12	0.44
(4,8)	1:A:8:PHE:O	1:A:16:VAL:H	18	0.43
(2,8)	1:A:24:GLY:HA2	1:A:46:ILE:H	19	0.43
(2,8)	1:A:24:GLY:HA3	1:A:46:ILE:H	19	0.43
(2,8)	1:A:45:ARG:HA	1:A:46:ILE:H	19	0.43
(2,76)	1:A:28:CYS:HB2	1:A:32:SER:H	1	0.43
(2,76)	1:A:28:CYS:HB3	1:A:32:SER:H	1	0.43
(2,76)	1:A:29:GLU:HA	1:A:32:SER:H	1	0.43
(2,76)	1:A:32:SER:HA	1:A:32:SER:H	1	0.43
(2,76)	1:A:32:SER:HB2	1:A:32:SER:H	1	0.43
(2,76)	1:A:32:SER:HB3	1:A:32:SER:H	1	0.43
(2,76)	1:A:33:ASP:HA	1:A:32:SER:H	1	0.43
(2,76)	1:A:35:SER:HB2	1:A:32:SER:H	1	0.43

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,76)	1:A:35:SER:HB3	1:A:32:SER:H	1	0.43
(2,62)	1:A:56:THR:HG1	1:A:56:THR:H	4	0.43
(2,62)	1:A:56:THR:HG1	1:A:56:THR:H	4	0.43
(2,62)	1:A:56:THR:HG21	1:A:56:THR:H	4	0.43
(2,62)	1:A:56:THR:HG21	1:A:56:THR:H	4	0.43
(2,62)	1:A:56:THR:HG22	1:A:56:THR:H	4	0.43
(2,62)	1:A:56:THR:HG22	1:A:56:THR:H	4	0.43
(2,62)	1:A:56:THR:HG23	1:A:56:THR:H	4	0.43
(2,62)	1:A:56:THR:HG23	1:A:56:THR:H	4	0.43
(2,54)	1:A:17:PRO:HB2	1:A:18:SER:H	17	0.43
(2,54)	1:A:17:PRO:HB3	1:A:18:SER:H	17	0.43
(2,54)	1:A:17:PRO:HG2	1:A:18:SER:H	17	0.43
(2,54)	1:A:17:PRO:HG3	1:A:18:SER:H	17	0.43
(2,341)	1:A:78:GLU:HG2	1:A:78:GLU:H	4	0.43
(2,341)	1:A:78:GLU:HG3	1:A:78:GLU:H	4	0.43
(2,341)	1:A:87:PRO:HB2	1:A:78:GLU:H	4	0.43
(2,341)	1:A:87:PRO:HB3	1:A:78:GLU:H	4	0.43
(2,341)	1:A:78:GLU:HG2	1:A:78:GLU:H	7	0.43
(2,341)	1:A:78:GLU:HG3	1:A:78:GLU:H	7	0.43
(2,341)	1:A:87:PRO:HB2	1:A:78:GLU:H	7	0.43
(2,341)	1:A:87:PRO:HB3	1:A:78:GLU:H	7	0.43
(2,321)	1:A:64:ARG:HB2	1:A:67:GLY:H	2	0.43
(2,321)	1:A:64:ARG:HB3	1:A:67:GLY:H	2	0.43
(2,321)	1:A:64:ARG:HG2	1:A:67:GLY:H	2	0.43
(2,321)	1:A:64:ARG:HG3	1:A:67:GLY:H	2	0.43
(2,321)	1:A:68:GLU:HB2	1:A:67:GLY:H	2	0.43
(2,321)	1:A:68:GLU:HB3	1:A:67:GLY:H	2	0.43
(2,321)	1:A:64:ARG:HB2	1:A:67:GLY:H	20	0.43
(2,321)	1:A:64:ARG:HB3	1:A:67:GLY:H	20	0.43
(2,321)	1:A:64:ARG:HG2	1:A:67:GLY:H	20	0.43
(2,321)	1:A:64:ARG:HG3	1:A:67:GLY:H	20	0.43
(2,321)	1:A:68:GLU:HB2	1:A:67:GLY:H	20	0.43
(2,321)	1:A:68:GLU:HB3	1:A:67:GLY:H	20	0.43
(2,306)	1:A:71:CYS:HB2	1:A:77:GLU:H	10	0.43
(2,306)	1:A:71:CYS:HB3	1:A:77:GLU:H	10	0.43
(2,306)	1:A:80:CYS:HB2	1:A:77:GLU:H	10	0.43
(2,306)	1:A:80:CYS:HB3	1:A:77:GLU:H	10	0.43
(2,304)	1:A:11:ASN:HD21	1:A:12:ASN:H	2	0.43
(2,304)	1:A:12:ASN:HD22	1:A:12:ASN:H	2	0.43
(2,302)	1:A:114:SER:HG	1:A:120:ALA:H	5	0.43
(2,302)	1:A:119:CYS:HA	1:A:120:ALA:H	5	0.43
(2,281)	1:A:10:CYS:HA	1:A:11:ASN:HD22	12	0.43

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,281)	1:A:11:ASN:HA	1:A:11:ASN:HD22	12	0.43
(2,208)	1:A:43:THR:HG1	1:A:52:GLY:H	3	0.43
(2,208)	1:A:43:THR:HG1	1:A:52:GLY:H	3	0.43
(2,208)	1:A:43:THR:HG21	1:A:52:GLY:H	3	0.43
(2,208)	1:A:43:THR:HG21	1:A:52:GLY:H	3	0.43
(2,208)	1:A:43:THR:HG22	1:A:52:GLY:H	3	0.43
(2,208)	1:A:43:THR:HG22	1:A:52:GLY:H	3	0.43
(2,208)	1:A:43:THR:HG23	1:A:52:GLY:H	3	0.43
(2,208)	1:A:43:THR:HG23	1:A:52:GLY:H	3	0.43
(2,208)	1:A:53:ALA:HB1	1:A:52:GLY:H	3	0.43
(2,208)	1:A:53:ALA:HB2	1:A:52:GLY:H	3	0.43
(2,208)	1:A:53:ALA:HB3	1:A:52:GLY:H	3	0.43
(2,208)	1:A:56:THR:HG21	1:A:52:GLY:H	3	0.43
(2,208)	1:A:56:THR:HG22	1:A:52:GLY:H	3	0.43
(2,208)	1:A:56:THR:HG23	1:A:52:GLY:H	3	0.43
(2,208)	1:A:43:THR:HG1	1:A:52:GLY:H	16	0.43
(2,208)	1:A:43:THR:HG1	1:A:52:GLY:H	16	0.43
(2,208)	1:A:43:THR:HG21	1:A:52:GLY:H	16	0.43
(2,208)	1:A:43:THR:HG21	1:A:52:GLY:H	16	0.43
(2,208)	1:A:43:THR:HG22	1:A:52:GLY:H	16	0.43
(2,208)	1:A:43:THR:HG22	1:A:52:GLY:H	16	0.43
(2,208)	1:A:43:THR:HG23	1:A:52:GLY:H	16	0.43
(2,208)	1:A:43:THR:HG23	1:A:52:GLY:H	16	0.43
(2,208)	1:A:53:ALA:HB1	1:A:52:GLY:H	16	0.43
(2,208)	1:A:53:ALA:HB2	1:A:52:GLY:H	16	0.43
(2,208)	1:A:53:ALA:HB3	1:A:52:GLY:H	16	0.43
(2,208)	1:A:56:THR:HG21	1:A:52:GLY:H	16	0.43
(2,208)	1:A:56:THR:HG22	1:A:52:GLY:H	16	0.43
(2,208)	1:A:56:THR:HG23	1:A:52:GLY:H	16	0.43
(2,208)	1:A:43:THR:HG1	1:A:52:GLY:H	17	0.43
(2,208)	1:A:43:THR:HG1	1:A:52:GLY:H	17	0.43
(2,208)	1:A:43:THR:HG21	1:A:52:GLY:H	17	0.43
(2,208)	1:A:43:THR:HG21	1:A:52:GLY:H	17	0.43
(2,208)	1:A:43:THR:HG22	1:A:52:GLY:H	17	0.43
(2,208)	1:A:43:THR:HG22	1:A:52:GLY:H	17	0.43
(2,208)	1:A:43:THR:HG23	1:A:52:GLY:H	17	0.43
(2,208)	1:A:43:THR:HG23	1:A:52:GLY:H	17	0.43
(2,208)	1:A:53:ALA:HB1	1:A:52:GLY:H	17	0.43
(2,208)	1:A:53:ALA:HB2	1:A:52:GLY:H	17	0.43
(2,208)	1:A:53:ALA:HB3	1:A:52:GLY:H	17	0.43
(2,208)	1:A:56:THR:HG21	1:A:52:GLY:H	17	0.43
(2,208)	1:A:56:THR:HG22	1:A:52:GLY:H	17	0.43

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,208)	1:A:56:THR:HG23	1:A:52:GLY:H	17	0.43
(2,208)	1:A:43:THR:HG1	1:A:52:GLY:H	20	0.43
(2,208)	1:A:43:THR:HG1	1:A:52:GLY:H	20	0.43
(2,208)	1:A:43:THR:HG21	1:A:52:GLY:H	20	0.43
(2,208)	1:A:43:THR:HG21	1:A:52:GLY:H	20	0.43
(2,208)	1:A:43:THR:HG22	1:A:52:GLY:H	20	0.43
(2,208)	1:A:43:THR:HG22	1:A:52:GLY:H	20	0.43
(2,208)	1:A:43:THR:HG23	1:A:52:GLY:H	20	0.43
(2,208)	1:A:43:THR:HG23	1:A:52:GLY:H	20	0.43
(2,208)	1:A:53:ALA:HB1	1:A:52:GLY:H	20	0.43
(2,208)	1:A:53:ALA:HB2	1:A:52:GLY:H	20	0.43
(2,208)	1:A:53:ALA:HB3	1:A:52:GLY:H	20	0.43
(2,208)	1:A:56:THR:HG21	1:A:52:GLY:H	20	0.43
(2,208)	1:A:56:THR:HG22	1:A:52:GLY:H	20	0.43
(2,208)	1:A:56:THR:HG23	1:A:52:GLY:H	20	0.43
(2,207)	1:A:79:ASN:HB2	1:A:79:ASN:HD22	3	0.43
(2,207)	1:A:97:CYS:HB2	1:A:79:ASN:HD22	3	0.43
(2,190)	1:A:55:SER:HA	1:A:57:GLN:H	4	0.43
(2,190)	1:A:56:THR:HA	1:A:57:GLN:H	4	0.43
(2,190)	1:A:55:SER:HA	1:A:57:GLN:H	18	0.43
(2,190)	1:A:56:THR:HA	1:A:57:GLN:H	18	0.43
(2,18)	1:A:111:SER:HA	1:A:113:GLY:H	6	0.43
(2,18)	1:A:113:GLY:HA2	1:A:113:GLY:H	6	0.43
(2,18)	1:A:113:GLY:HA3	1:A:113:GLY:H	6	0.43
(2,137)	1:A:116:GLU:HB2	1:A:117:LEU:H	9	0.43
(2,137)	1:A:116:GLU:HB3	1:A:117:LEU:H	9	0.43
(2,137)	1:A:117:LEU:HB2	1:A:117:LEU:H	9	0.43
(2,137)	1:A:117:LEU:HB3	1:A:117:LEU:H	9	0.43
(2,137)	1:A:116:GLU:HB2	1:A:117:LEU:H	10	0.43
(2,137)	1:A:116:GLU:HB3	1:A:117:LEU:H	10	0.43
(2,137)	1:A:117:LEU:HB2	1:A:117:LEU:H	10	0.43
(2,137)	1:A:117:LEU:HB3	1:A:117:LEU:H	10	0.43
(2,114)	1:A:16:VAL:HG11	1:A:16:VAL:H	18	0.43
(2,114)	1:A:16:VAL:HG12	1:A:16:VAL:H	18	0.43
(2,114)	1:A:16:VAL:HG13	1:A:16:VAL:H	18	0.43
(2,114)	1:A:16:VAL:HG21	1:A:16:VAL:H	18	0.43
(2,114)	1:A:16:VAL:HG21	1:A:16:VAL:H	18	0.43
(2,114)	1:A:16:VAL:HG22	1:A:16:VAL:H	18	0.43
(2,114)	1:A:16:VAL:HG22	1:A:16:VAL:H	18	0.43
(2,114)	1:A:16:VAL:HG23	1:A:16:VAL:H	18	0.43
(2,114)	1:A:16:VAL:HG23	1:A:16:VAL:H	18	0.43
(1,97)	1:A:98:ILE:HD11	1:A:99:SER:H	5	0.43

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,97)	1:A:98:ILE:HD12	1:A:99:SER:H	5	0.43
(1,97)	1:A:98:ILE:HD13	1:A:99:SER:H	5	0.43
(1,93)	1:A:8:PHE:H	1:A:7:ASP:HA	14	0.43
(1,92)	1:A:7:ASP:HB2	1:A:8:PHE:H	19	0.43
(1,92)	1:A:7:ASP:HB3	1:A:8:PHE:H	19	0.43
(1,888)	1:A:49:ILE:HA	1:A:61:VAL:H	1	0.43
(1,862)	1:A:21:LYS:HE2	1:A:19:ARG:H	15	0.43
(1,862)	1:A:21:LYS:HE3	1:A:19:ARG:H	15	0.43
(1,862)	1:A:21:LYS:HE2	1:A:19:ARG:H	20	0.43
(1,862)	1:A:21:LYS:HE3	1:A:19:ARG:H	20	0.43
(1,859)	1:A:3:CYS:HB2	1:A:18:SER:H	3	0.43
(1,859)	1:A:3:CYS:HB3	1:A:18:SER:H	3	0.43
(1,859)	1:A:3:CYS:HB2	1:A:18:SER:H	4	0.43
(1,859)	1:A:3:CYS:HB3	1:A:18:SER:H	4	0.43
(1,853)	1:A:10:CYS:HB2	1:A:12:ASN:H	20	0.43
(1,853)	1:A:10:CYS:HB3	1:A:12:ASN:H	20	0.43
(1,850)	1:A:12:ASN:H	1:A:11:ASN:HD22	16	0.43
(1,81)	1:A:28:CYS:HA	1:A:33:ASP:H	12	0.43
(1,794)	1:A:82:ASN:HD22	1:A:94:SER:H	13	0.43
(1,772)	1:A:68:GLU:H	1:A:64:ARG:H	11	0.43
(1,750)	1:A:57:GLN:HB2	1:A:52:GLY:H	18	0.43
(1,750)	1:A:57:GLN:HB2	1:A:52:GLY:H	18	0.43
(1,750)	1:A:57:GLN:HB3	1:A:52:GLY:H	18	0.43
(1,750)	1:A:57:GLN:HB3	1:A:52:GLY:H	18	0.43
(1,744)	1:A:48:GLU:H	1:A:47:HIS:H	14	0.43
(1,735)	1:A:28:CYS:HB2	1:A:33:ASP:H	14	0.43
(1,735)	1:A:28:CYS:HB3	1:A:33:ASP:H	14	0.43
(1,732)	1:A:31:GLY:HA2	1:A:32:SER:H	7	0.43
(1,732)	1:A:31:GLY:HA3	1:A:32:SER:H	7	0.43
(1,73)	1:A:65:CYS:HB2	1:A:65:CYS:H	3	0.43
(1,73)	1:A:65:CYS:HB3	1:A:65:CYS:H	3	0.43
(1,724)	1:A:34:GLU:HB2	1:A:25:ASP:H	14	0.43
(1,724)	1:A:34:GLU:HB3	1:A:25:ASP:H	14	0.43
(1,706)	1:A:45:ARG:HB2	1:A:45:ARG:H	10	0.43
(1,706)	1:A:45:ARG:HB3	1:A:45:ARG:H	10	0.43
(1,704)	1:A:100:ARG:HG2	1:A:100:ARG:H	19	0.43
(1,704)	1:A:100:ARG:HG2	1:A:100:ARG:H	19	0.43
(1,704)	1:A:100:ARG:HG3	1:A:100:ARG:H	19	0.43
(1,704)	1:A:100:ARG:HG3	1:A:100:ARG:H	19	0.43
(1,696)	1:A:44:CYS:HB2	1:A:34:GLU:H	6	0.43
(1,696)	1:A:44:CYS:HB3	1:A:34:GLU:H	6	0.43
(1,688)	1:A:69:ASN:H	1:A:69:ASN:HD22	12	0.43

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,681)	1:A:79:ASN:HD21	1:A:87:PRO:HD2	3	0.43
(1,681)	1:A:79:ASN:HD21	1:A:87:PRO:HD3	3	0.43
(1,679)	1:A:78:GLU:HG2	1:A:79:ASN:HD22	4	0.43
(1,679)	1:A:78:GLU:HG3	1:A:79:ASN:HD22	4	0.43
(1,670)	1:A:107:GLN:HB2	1:A:105:ASN:HD22	4	0.43
(1,670)	1:A:107:GLN:HB2	1:A:105:ASN:HD22	4	0.43
(1,670)	1:A:107:GLN:HB3	1:A:105:ASN:HD22	4	0.43
(1,670)	1:A:107:GLN:HB3	1:A:105:ASN:HD22	4	0.43
(1,667)	1:A:107:GLN:HG2	1:A:105:ASN:HD22	1	0.43
(1,667)	1:A:107:GLN:HG2	1:A:105:ASN:HD22	1	0.43
(1,667)	1:A:107:GLN:HG3	1:A:105:ASN:HD22	1	0.43
(1,667)	1:A:107:GLN:HG3	1:A:105:ASN:HD22	1	0.43
(1,667)	1:A:107:GLN:HG2	1:A:105:ASN:HD22	5	0.43
(1,667)	1:A:107:GLN:HG2	1:A:105:ASN:HD22	5	0.43
(1,667)	1:A:107:GLN:HG3	1:A:105:ASN:HD22	5	0.43
(1,667)	1:A:107:GLN:HG3	1:A:105:ASN:HD22	5	0.43
(1,667)	1:A:107:GLN:HG2	1:A:105:ASN:HD22	7	0.43
(1,667)	1:A:107:GLN:HG2	1:A:105:ASN:HD22	7	0.43
(1,667)	1:A:107:GLN:HG3	1:A:105:ASN:HD22	7	0.43
(1,667)	1:A:107:GLN:HG3	1:A:105:ASN:HD22	7	0.43
(1,667)	1:A:107:GLN:HG2	1:A:105:ASN:HD22	19	0.43
(1,667)	1:A:107:GLN:HG2	1:A:105:ASN:HD22	19	0.43
(1,667)	1:A:107:GLN:HG3	1:A:105:ASN:HD22	19	0.43
(1,667)	1:A:107:GLN:HG3	1:A:105:ASN:HD22	19	0.43
(1,657)	1:A:105:ASN:HA	1:A:105:ASN:HD22	5	0.43
(1,657)	1:A:105:ASN:HA	1:A:105:ASN:HD22	11	0.43
(1,654)	1:A:107:GLN:HB2	1:A:107:GLN:HE22	1	0.43
(1,654)	1:A:107:GLN:HB2	1:A:107:GLN:HE22	1	0.43
(1,654)	1:A:107:GLN:HB3	1:A:107:GLN:HE22	1	0.43
(1,654)	1:A:107:GLN:HB3	1:A:107:GLN:HE22	1	0.43
(1,654)	1:A:107:GLN:HB2	1:A:107:GLN:HE22	8	0.43
(1,654)	1:A:107:GLN:HB2	1:A:107:GLN:HE22	8	0.43
(1,654)	1:A:107:GLN:HB3	1:A:107:GLN:HE22	8	0.43
(1,654)	1:A:107:GLN:HB3	1:A:107:GLN:HE22	8	0.43
(1,643)	1:A:82:ASN:HB2	1:A:82:ASN:HD21	4	0.43
(1,643)	1:A:82:ASN:HB2	1:A:82:ASN:HD21	4	0.43
(1,643)	1:A:82:ASN:HB3	1:A:82:ASN:HD21	4	0.43
(1,643)	1:A:82:ASN:HB3	1:A:82:ASN:HD21	4	0.43
(1,643)	1:A:82:ASN:HB2	1:A:82:ASN:HD21	19	0.43
(1,643)	1:A:82:ASN:HB2	1:A:82:ASN:HD21	19	0.43
(1,643)	1:A:82:ASN:HB3	1:A:82:ASN:HD21	19	0.43
(1,643)	1:A:82:ASN:HB3	1:A:82:ASN:HD21	19	0.43

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,608)	1:A:14:GLN:HG2	1:A:14:GLN:HE21	20	0.43
(1,608)	1:A:14:GLN:HG3	1:A:14:GLN:HE21	20	0.43
(1,60)	1:A:56:THR:H	1:A:57:GLN:H	6	0.43
(1,587)	1:A:14:GLN:H	1:A:12:ASN:H	2	0.43
(1,587)	1:A:14:GLN:H	1:A:12:ASN:H	7	0.43
(1,587)	1:A:14:GLN:H	1:A:12:ASN:H	13	0.43
(1,531)	1:A:71:CYS:HB2	1:A:71:CYS:H	2	0.43
(1,531)	1:A:71:CYS:HB3	1:A:71:CYS:H	2	0.43
(1,529)	1:A:59:ILE:HD11	1:A:70:ASP:H	4	0.43
(1,529)	1:A:59:ILE:HD12	1:A:70:ASP:H	4	0.43
(1,529)	1:A:59:ILE:HD13	1:A:70:ASP:H	4	0.43
(1,504)	1:A:39:CYS:HB2	1:A:39:CYS:H	18	0.43
(1,504)	1:A:39:CYS:HB3	1:A:39:CYS:H	18	0.43
(1,466)	1:A:80:CYS:HA	1:A:79:ASN:H	15	0.43
(1,447)	1:A:71:CYS:HA	1:A:74:GLY:H	3	0.43
(1,447)	1:A:71:CYS:HA	1:A:74:GLY:H	16	0.43
(1,390)	1:A:51:CYS:HB2	1:A:52:GLY:H	6	0.43
(1,390)	1:A:51:CYS:HB3	1:A:52:GLY:H	6	0.43
(1,346)	1:A:32:SER:H	1:A:31:GLY:H	11	0.43
(1,327)	1:A:22:CYS:HB2	1:A:22:CYS:H	4	0.43
(1,327)	1:A:22:CYS:HB3	1:A:22:CYS:H	4	0.43
(1,327)	1:A:22:CYS:HB2	1:A:22:CYS:H	16	0.43
(1,327)	1:A:22:CYS:HB3	1:A:22:CYS:H	16	0.43
(1,323)	1:A:64:ARG:H	1:A:80:CYS:HB2	9	0.43
(1,323)	1:A:64:ARG:H	1:A:80:CYS:HB3	9	0.43
(1,248)	1:A:83:ILE:HB	1:A:84:THR:H	12	0.43
(1,224)	1:A:92:CYS:HA	1:A:94:SER:H	20	0.43
(1,212)	1:A:96:ARG:H	1:A:92:CYS:HA	4	0.43
(1,212)	1:A:96:ARG:H	1:A:92:CYS:HA	14	0.43
(1,212)	1:A:96:ARG:H	1:A:92:CYS:HA	15	0.43
(1,212)	1:A:96:ARG:H	1:A:92:CYS:HA	17	0.43
(1,174)	1:A:103:VAL:H	1:A:101:ASN:HB2	4	0.43
(1,174)	1:A:103:VAL:H	1:A:101:ASN:HB3	4	0.43
(1,158)	1:A:104:CYS:HA	1:A:105:ASN:H	16	0.43
(1,140)	1:A:108:ASP:H	1:A:108:ASP:HB2	2	0.43
(1,140)	1:A:108:ASP:H	1:A:108:ASP:HB3	2	0.43
(1,140)	1:A:108:ASP:H	1:A:108:ASP:HB2	5	0.43
(1,140)	1:A:108:ASP:H	1:A:108:ASP:HB3	5	0.43
(1,140)	1:A:108:ASP:H	1:A:108:ASP:HB2	9	0.43
(1,140)	1:A:108:ASP:H	1:A:108:ASP:HB3	9	0.43
(1,140)	1:A:108:ASP:H	1:A:108:ASP:HB2	13	0.43
(1,140)	1:A:108:ASP:H	1:A:108:ASP:HB3	13	0.43

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,140)	1:A:108:ASP:H	1:A:108:ASP:HB2	19	0.43
(1,140)	1:A:108:ASP:H	1:A:108:ASP:HB3	19	0.43
(1,125)	1:A:114:SER:H	1:A:113:GLY:HA2	9	0.43
(1,125)	1:A:114:SER:H	1:A:113:GLY:HA3	9	0.43
(4,8)	1:A:8:PHE:O	1:A:16:VAL:H	1	0.42
(4,8)	1:A:8:PHE:O	1:A:16:VAL:H	5	0.42
(4,8)	1:A:8:PHE:O	1:A:16:VAL:H	6	0.42
(2,89)	1:A:107:GLN:HB2	1:A:108:ASP:H	17	0.42
(2,89)	1:A:107:GLN:HB3	1:A:108:ASP:H	17	0.42
(2,64)	1:A:45:ARG:HB2	1:A:46:ILE:H	13	0.42
(2,64)	1:A:45:ARG:HB3	1:A:46:ILE:H	13	0.42
(2,64)	1:A:46:ILE:HG12	1:A:46:ILE:H	13	0.42
(2,64)	1:A:46:ILE:HG13	1:A:46:ILE:H	13	0.42
(2,54)	1:A:17:PRO:HB2	1:A:18:SER:H	1	0.42
(2,54)	1:A:17:PRO:HB3	1:A:18:SER:H	1	0.42
(2,54)	1:A:17:PRO:HG2	1:A:18:SER:H	1	0.42
(2,54)	1:A:17:PRO:HG3	1:A:18:SER:H	1	0.42
(2,390)	1:A:17:PRO:HB2	1:A:19:ARG:H	9	0.42
(2,390)	1:A:17:PRO:HB3	1:A:19:ARG:H	9	0.42
(2,390)	1:A:17:PRO:HG2	1:A:19:ARG:H	9	0.42
(2,390)	1:A:17:PRO:HG3	1:A:19:ARG:H	9	0.42
(2,331)	1:A:2:THR:H	1:A:99:SER:H	17	0.42
(2,331)	1:A:3:CYS:H	1:A:99:SER:H	17	0.42
(2,331)	1:A:80:CYS:H	1:A:99:SER:H	17	0.42
(2,331)	1:A:81:GLY:H	1:A:99:SER:H	17	0.42
(2,331)	1:A:101:ASN:H	1:A:99:SER:H	17	0.42
(2,306)	1:A:71:CYS:HB2	1:A:77:GLU:H	6	0.42
(2,306)	1:A:71:CYS:HB3	1:A:77:GLU:H	6	0.42
(2,306)	1:A:80:CYS:HB2	1:A:77:GLU:H	6	0.42
(2,306)	1:A:80:CYS:HB3	1:A:77:GLU:H	6	0.42
(2,303)	1:A:75:GLU:HB2	1:A:77:GLU:H	16	0.42
(2,303)	1:A:75:GLU:HB3	1:A:77:GLU:H	16	0.42
(2,303)	1:A:77:GLU:HG2	1:A:77:GLU:H	16	0.42
(2,303)	1:A:77:GLU:HG3	1:A:77:GLU:H	16	0.42
(2,303)	1:A:78:GLU:HB2	1:A:77:GLU:H	16	0.42
(2,303)	1:A:78:GLU:HB3	1:A:77:GLU:H	16	0.42
(2,303)	1:A:87:PRO:HG2	1:A:77:GLU:H	16	0.42
(2,303)	1:A:87:PRO:HG3	1:A:77:GLU:H	16	0.42
(2,285)	1:A:109:ASP:HB2	1:A:112:ASP:H	3	0.42
(2,285)	1:A:109:ASP:HB3	1:A:112:ASP:H	3	0.42
(2,285)	1:A:112:ASP:HB2	1:A:112:ASP:H	3	0.42
(2,285)	1:A:112:ASP:HB3	1:A:112:ASP:H	3	0.42

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,281)	1:A:10:CYS:HA	1:A:11:ASN:HD22	4	0.42
(2,281)	1:A:11:ASN:HA	1:A:11:ASN:HD22	4	0.42
(2,239)	1:A:64:ARG:HB2	1:A:69:ASN:H	2	0.42
(2,239)	1:A:64:ARG:HB3	1:A:69:ASN:H	2	0.42
(2,239)	1:A:64:ARG:HG2	1:A:69:ASN:H	2	0.42
(2,239)	1:A:64:ARG:HG3	1:A:69:ASN:H	2	0.42
(2,239)	1:A:68:GLU:HB2	1:A:69:ASN:H	2	0.42
(2,239)	1:A:68:GLU:HB3	1:A:69:ASN:H	2	0.42
(2,208)	1:A:43:THR:HG1	1:A:52:GLY:H	1	0.42
(2,208)	1:A:43:THR:HG1	1:A:52:GLY:H	1	0.42
(2,208)	1:A:43:THR:HG21	1:A:52:GLY:H	1	0.42
(2,208)	1:A:43:THR:HG21	1:A:52:GLY:H	1	0.42
(2,208)	1:A:43:THR:HG22	1:A:52:GLY:H	1	0.42
(2,208)	1:A:43:THR:HG22	1:A:52:GLY:H	1	0.42
(2,208)	1:A:43:THR:HG23	1:A:52:GLY:H	1	0.42
(2,208)	1:A:43:THR:HG23	1:A:52:GLY:H	1	0.42
(2,208)	1:A:53:ALA:HB1	1:A:52:GLY:H	1	0.42
(2,208)	1:A:53:ALA:HB2	1:A:52:GLY:H	1	0.42
(2,208)	1:A:53:ALA:HB3	1:A:52:GLY:H	1	0.42
(2,208)	1:A:56:THR:HG21	1:A:52:GLY:H	1	0.42
(2,208)	1:A:56:THR:HG22	1:A:52:GLY:H	1	0.42
(2,208)	1:A:56:THR:HG23	1:A:52:GLY:H	1	0.42
(2,207)	1:A:79:ASN:HB2	1:A:79:ASN:HD22	11	0.42
(2,207)	1:A:97:CYS:HB2	1:A:79:ASN:HD22	11	0.42
(2,190)	1:A:55:SER:HA	1:A:57:GLN:H	20	0.42
(2,190)	1:A:56:THR:HA	1:A:57:GLN:H	20	0.42
(2,184)	1:A:16:VAL:HG11	1:A:15:CYS:H	3	0.42
(2,184)	1:A:16:VAL:HG11	1:A:15:CYS:H	3	0.42
(2,184)	1:A:16:VAL:HG11	1:A:15:CYS:H	3	0.42
(2,184)	1:A:16:VAL:HG12	1:A:15:CYS:H	3	0.42
(2,184)	1:A:16:VAL:HG12	1:A:15:CYS:H	3	0.42
(2,184)	1:A:16:VAL:HG12	1:A:15:CYS:H	3	0.42
(2,184)	1:A:16:VAL:HG13	1:A:15:CYS:H	3	0.42
(2,184)	1:A:16:VAL:HG13	1:A:15:CYS:H	3	0.42
(2,184)	1:A:16:VAL:HG13	1:A:15:CYS:H	3	0.42
(2,184)	1:A:16:VAL:HG21	1:A:15:CYS:H	3	0.42
(2,184)	1:A:16:VAL:HG21	1:A:15:CYS:H	3	0.42
(2,184)	1:A:16:VAL:HG21	1:A:15:CYS:H	3	0.42
(2,184)	1:A:16:VAL:HG22	1:A:15:CYS:H	3	0.42
(2,184)	1:A:16:VAL:HG22	1:A:15:CYS:H	3	0.42
(2,184)	1:A:16:VAL:HG22	1:A:15:CYS:H	3	0.42
(2,184)	1:A:16:VAL:HG23	1:A:15:CYS:H	3	0.42

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,184)	1:A:16:VAL:HG23	1:A:15:CYS:H	3	0.42
(2,184)	1:A:16:VAL:HG23	1:A:15:CYS:H	3	0.42
(2,137)	1:A:116:GLU:HB2	1:A:117:LEU:H	16	0.42
(2,137)	1:A:116:GLU:HB3	1:A:117:LEU:H	16	0.42
(2,137)	1:A:117:LEU:HB2	1:A:117:LEU:H	16	0.42
(2,137)	1:A:117:LEU:HB3	1:A:117:LEU:H	16	0.42
(2,13)	1:A:110:CYS:HB2	1:A:113:GLY:H	3	0.42
(2,13)	1:A:110:CYS:HB3	1:A:113:GLY:H	3	0.42
(2,13)	1:A:111:SER:HB2	1:A:113:GLY:H	3	0.42
(2,13)	1:A:111:SER:HB3	1:A:113:GLY:H	3	0.42
(2,13)	1:A:113:GLY:HA2	1:A:113:GLY:H	3	0.42
(2,13)	1:A:113:GLY:HA3	1:A:113:GLY:H	3	0.42
(2,114)	1:A:16:VAL:HG11	1:A:16:VAL:H	3	0.42
(2,114)	1:A:16:VAL:HG12	1:A:16:VAL:H	3	0.42
(2,114)	1:A:16:VAL:HG13	1:A:16:VAL:H	3	0.42
(2,114)	1:A:16:VAL:HG21	1:A:16:VAL:H	3	0.42
(2,114)	1:A:16:VAL:HG21	1:A:16:VAL:H	3	0.42
(2,114)	1:A:16:VAL:HG22	1:A:16:VAL:H	3	0.42
(2,114)	1:A:16:VAL:HG22	1:A:16:VAL:H	3	0.42
(2,114)	1:A:16:VAL:HG23	1:A:16:VAL:H	3	0.42
(2,114)	1:A:16:VAL:HG23	1:A:16:VAL:H	3	0.42
(2,114)	1:A:16:VAL:HG11	1:A:16:VAL:H	16	0.42
(2,114)	1:A:16:VAL:HG12	1:A:16:VAL:H	16	0.42
(2,114)	1:A:16:VAL:HG13	1:A:16:VAL:H	16	0.42
(2,114)	1:A:16:VAL:HG21	1:A:16:VAL:H	16	0.42
(2,114)	1:A:16:VAL:HG21	1:A:16:VAL:H	16	0.42
(2,114)	1:A:16:VAL:HG22	1:A:16:VAL:H	16	0.42
(2,114)	1:A:16:VAL:HG22	1:A:16:VAL:H	16	0.42
(2,114)	1:A:16:VAL:HG23	1:A:16:VAL:H	16	0.42
(2,114)	1:A:16:VAL:HG23	1:A:16:VAL:H	16	0.42
(1,99)	1:A:98:ILE:HG12	1:A:99:SER:H	18	0.42
(1,99)	1:A:98:ILE:HG13	1:A:99:SER:H	18	0.42
(1,97)	1:A:98:ILE:HD11	1:A:99:SER:H	4	0.42
(1,97)	1:A:98:ILE:HD12	1:A:99:SER:H	4	0.42
(1,97)	1:A:98:ILE:HD13	1:A:99:SER:H	4	0.42
(1,911)	1:A:57:GLN:HE21	1:A:71:CYS:H	5	0.42
(1,862)	1:A:21:LYS:HE2	1:A:19:ARG:H	3	0.42
(1,862)	1:A:21:LYS:HE3	1:A:19:ARG:H	3	0.42
(1,853)	1:A:10:CYS:HB2	1:A:12:ASN:H	11	0.42
(1,853)	1:A:10:CYS:HB3	1:A:12:ASN:H	11	0.42
(1,850)	1:A:12:ASN:H	1:A:11:ASN:HD22	11	0.42
(1,849)	1:A:33:ASP:H	1:A:11:ASN:H	12	0.42

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,849)	1:A:33:ASP:H	1:A:11:ASN:H	14	0.42
(1,819)	1:A:112:ASP:HB2	1:A:115:ASP:H	14	0.42
(1,819)	1:A:112:ASP:HB3	1:A:115:ASP:H	14	0.42
(1,81)	1:A:28:CYS:HA	1:A:33:ASP:H	4	0.42
(1,81)	1:A:28:CYS:HA	1:A:33:ASP:H	6	0.42
(1,81)	1:A:28:CYS:HA	1:A:33:ASP:H	15	0.42
(1,806)	1:A:101:ASN:HD21	1:A:102:PHE:H	19	0.42
(1,803)	1:A:101:ASN:HD21	1:A:99:SER:H	8	0.42
(1,788)	1:A:80:CYS:H	1:A:78:GLU:H	12	0.42
(1,745)	1:A:48:GLU:HB2	1:A:49:ILE:H	14	0.42
(1,745)	1:A:48:GLU:HB3	1:A:49:ILE:H	14	0.42
(1,735)	1:A:28:CYS:HB2	1:A:33:ASP:H	3	0.42
(1,735)	1:A:28:CYS:HB3	1:A:33:ASP:H	3	0.42
(1,735)	1:A:28:CYS:HB2	1:A:33:ASP:H	15	0.42
(1,735)	1:A:28:CYS:HB3	1:A:33:ASP:H	15	0.42
(1,732)	1:A:31:GLY:HA2	1:A:32:SER:H	8	0.42
(1,732)	1:A:31:GLY:HA3	1:A:32:SER:H	8	0.42
(1,710)	1:A:8:PHE:H	1:A:21:LYS:HD2	16	0.42
(1,710)	1:A:8:PHE:H	1:A:21:LYS:HD3	16	0.42
(1,693)	1:A:21:LYS:HD2	1:A:21:LYS:H	8	0.42
(1,693)	1:A:21:LYS:HD3	1:A:21:LYS:H	8	0.42
(1,681)	1:A:79:ASN:HD21	1:A:87:PRO:HD2	6	0.42
(1,681)	1:A:79:ASN:HD21	1:A:87:PRO:HD3	6	0.42
(1,681)	1:A:79:ASN:HD21	1:A:87:PRO:HD2	9	0.42
(1,681)	1:A:79:ASN:HD21	1:A:87:PRO:HD3	9	0.42
(1,643)	1:A:82:ASN:HB2	1:A:82:ASN:HD21	15	0.42
(1,643)	1:A:82:ASN:HB2	1:A:82:ASN:HD21	15	0.42
(1,643)	1:A:82:ASN:HB3	1:A:82:ASN:HD21	15	0.42
(1,643)	1:A:82:ASN:HB3	1:A:82:ASN:HD21	15	0.42
(1,643)	1:A:82:ASN:HB2	1:A:82:ASN:HD21	20	0.42
(1,643)	1:A:82:ASN:HB2	1:A:82:ASN:HD21	20	0.42
(1,643)	1:A:82:ASN:HB3	1:A:82:ASN:HD21	20	0.42
(1,643)	1:A:82:ASN:HB3	1:A:82:ASN:HD21	20	0.42
(1,634)	1:A:79:ASN:HD22	1:A:79:ASN:HA	18	0.42
(1,60)	1:A:56:THR:H	1:A:57:GLN:H	7	0.42
(1,60)	1:A:56:THR:H	1:A:57:GLN:H	16	0.42
(1,60)	1:A:56:THR:H	1:A:57:GLN:H	20	0.42
(1,596)	1:A:74:GLY:HA2	1:A:69:ASN:HD21	14	0.42
(1,596)	1:A:74:GLY:HA3	1:A:69:ASN:HD21	14	0.42
(1,587)	1:A:14:GLN:H	1:A:12:ASN:H	1	0.42
(1,555)	1:A:103:VAL:HG11	1:A:104:CYS:H	6	0.42
(1,555)	1:A:103:VAL:HG12	1:A:104:CYS:H	6	0.42

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,555)	1:A:103:VAL:HG13	1:A:104:CYS:H	6	0.42
(1,555)	1:A:103:VAL:HG21	1:A:104:CYS:H	6	0.42
(1,555)	1:A:103:VAL:HG22	1:A:104:CYS:H	6	0.42
(1,555)	1:A:103:VAL:HG23	1:A:104:CYS:H	6	0.42
(1,531)	1:A:71:CYS:HB2	1:A:71:CYS:H	6	0.42
(1,531)	1:A:71:CYS:HB3	1:A:71:CYS:H	6	0.42
(1,531)	1:A:71:CYS:HB2	1:A:71:CYS:H	7	0.42
(1,531)	1:A:71:CYS:HB3	1:A:71:CYS:H	7	0.42
(1,517)	1:A:59:ILE:HG12	1:A:59:ILE:H	7	0.42
(1,517)	1:A:59:ILE:HG12	1:A:59:ILE:H	7	0.42
(1,517)	1:A:59:ILE:HG13	1:A:59:ILE:H	7	0.42
(1,517)	1:A:59:ILE:HG13	1:A:59:ILE:H	7	0.42
(1,517)	1:A:59:ILE:HG12	1:A:59:ILE:H	9	0.42
(1,517)	1:A:59:ILE:HG12	1:A:59:ILE:H	9	0.42
(1,517)	1:A:59:ILE:HG13	1:A:59:ILE:H	9	0.42
(1,517)	1:A:59:ILE:HG13	1:A:59:ILE:H	9	0.42
(1,466)	1:A:80:CYS:HA	1:A:79:ASN:H	4	0.42
(1,466)	1:A:80:CYS:HA	1:A:79:ASN:H	10	0.42
(1,447)	1:A:71:CYS:HA	1:A:74:GLY:H	17	0.42
(1,437)	1:A:72:ASP:H	1:A:71:CYS:H	6	0.42
(1,436)	1:A:73:SER:H	1:A:72:ASP:H	2	0.42
(1,346)	1:A:32:SER:H	1:A:31:GLY:H	13	0.42
(1,346)	1:A:32:SER:H	1:A:31:GLY:H	16	0.42
(1,346)	1:A:32:SER:H	1:A:31:GLY:H	20	0.42
(1,327)	1:A:22:CYS:HB2	1:A:22:CYS:H	3	0.42
(1,327)	1:A:22:CYS:HB3	1:A:22:CYS:H	3	0.42
(1,327)	1:A:22:CYS:HB2	1:A:22:CYS:H	5	0.42
(1,327)	1:A:22:CYS:HB3	1:A:22:CYS:H	5	0.42
(1,327)	1:A:22:CYS:HB2	1:A:22:CYS:H	6	0.42
(1,327)	1:A:22:CYS:HB3	1:A:22:CYS:H	6	0.42
(1,327)	1:A:22:CYS:HB2	1:A:22:CYS:H	19	0.42
(1,327)	1:A:22:CYS:HB3	1:A:22:CYS:H	19	0.42
(1,323)	1:A:64:ARG:H	1:A:80:CYS:HB2	20	0.42
(1,323)	1:A:64:ARG:H	1:A:80:CYS:HB3	20	0.42
(1,298)	1:A:14:GLN:H	1:A:11:ASN:H	11	0.42
(1,289)	1:A:8:PHE:HA	1:A:8:PHE:H	17	0.42
(1,224)	1:A:92:CYS:HA	1:A:94:SER:H	15	0.42
(1,212)	1:A:96:ARG:H	1:A:92:CYS:HA	18	0.42
(1,125)	1:A:114:SER:H	1:A:113:GLY:HA2	16	0.42
(1,125)	1:A:114:SER:H	1:A:113:GLY:HA3	16	0.42
(1,118)	1:A:115:ASP:H	1:A:113:GLY:H	2	0.42
(4,8)	1:A:8:PHE:O	1:A:16:VAL:H	3	0.41

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(4,8)	1:A:8:PHE:O	1:A:16:VAL:H	19	0.41
(2,8)	1:A:24:GLY:HA2	1:A:46:ILE:H	20	0.41
(2,8)	1:A:24:GLY:HA3	1:A:46:ILE:H	20	0.41
(2,8)	1:A:45:ARG:HA	1:A:46:ILE:H	20	0.41
(2,76)	1:A:28:CYS:HB2	1:A:32:SER:H	13	0.41
(2,76)	1:A:28:CYS:HB3	1:A:32:SER:H	13	0.41
(2,76)	1:A:29:GLU:HA	1:A:32:SER:H	13	0.41
(2,76)	1:A:32:SER:HA	1:A:32:SER:H	13	0.41
(2,76)	1:A:32:SER:HB2	1:A:32:SER:H	13	0.41
(2,76)	1:A:32:SER:HB3	1:A:32:SER:H	13	0.41
(2,76)	1:A:33:ASP:HA	1:A:32:SER:H	13	0.41
(2,76)	1:A:35:SER:HB2	1:A:32:SER:H	13	0.41
(2,76)	1:A:35:SER:HB3	1:A:32:SER:H	13	0.41
(2,62)	1:A:56:THR:HG1	1:A:56:THR:H	15	0.41
(2,62)	1:A:56:THR:HG1	1:A:56:THR:H	15	0.41
(2,62)	1:A:56:THR:HG21	1:A:56:THR:H	15	0.41
(2,62)	1:A:56:THR:HG21	1:A:56:THR:H	15	0.41
(2,62)	1:A:56:THR:HG22	1:A:56:THR:H	15	0.41
(2,62)	1:A:56:THR:HG22	1:A:56:THR:H	15	0.41
(2,62)	1:A:56:THR:HG23	1:A:56:THR:H	15	0.41
(2,62)	1:A:56:THR:HG23	1:A:56:THR:H	15	0.41
(2,390)	1:A:17:PRO:HB2	1:A:19:ARG:H	6	0.41
(2,390)	1:A:17:PRO:HB3	1:A:19:ARG:H	6	0.41
(2,390)	1:A:17:PRO:HG2	1:A:19:ARG:H	6	0.41
(2,390)	1:A:17:PRO:HG3	1:A:19:ARG:H	6	0.41
(2,375)	1:A:48:GLU:HB2	1:A:61:VAL:H	11	0.41
(2,375)	1:A:48:GLU:HB3	1:A:61:VAL:H	11	0.41
(2,375)	1:A:60:PRO:HD3	1:A:61:VAL:H	11	0.41
(2,341)	1:A:78:GLU:HG2	1:A:78:GLU:H	9	0.41
(2,341)	1:A:78:GLU:HG3	1:A:78:GLU:H	9	0.41
(2,341)	1:A:87:PRO:HB2	1:A:78:GLU:H	9	0.41
(2,341)	1:A:87:PRO:HB3	1:A:78:GLU:H	9	0.41
(2,302)	1:A:114:SER:HG	1:A:120:ALA:H	14	0.41
(2,302)	1:A:119:CYS:HA	1:A:120:ALA:H	14	0.41
(2,285)	1:A:109:ASP:HB2	1:A:112:ASP:H	1	0.41
(2,285)	1:A:109:ASP:HB3	1:A:112:ASP:H	1	0.41
(2,285)	1:A:112:ASP:HB2	1:A:112:ASP:H	1	0.41
(2,285)	1:A:112:ASP:HB3	1:A:112:ASP:H	1	0.41
(2,285)	1:A:109:ASP:HB2	1:A:112:ASP:H	4	0.41
(2,285)	1:A:109:ASP:HB3	1:A:112:ASP:H	4	0.41
(2,285)	1:A:112:ASP:HB2	1:A:112:ASP:H	4	0.41
(2,285)	1:A:112:ASP:HB3	1:A:112:ASP:H	4	0.41

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,285)	1:A:109:ASP:HB2	1:A:112:ASP:H	8	0.41
(2,285)	1:A:109:ASP:HB3	1:A:112:ASP:H	8	0.41
(2,285)	1:A:112:ASP:HB2	1:A:112:ASP:H	8	0.41
(2,285)	1:A:112:ASP:HB3	1:A:112:ASP:H	8	0.41
(2,285)	1:A:109:ASP:HB2	1:A:112:ASP:H	10	0.41
(2,285)	1:A:109:ASP:HB3	1:A:112:ASP:H	10	0.41
(2,285)	1:A:112:ASP:HB2	1:A:112:ASP:H	10	0.41
(2,285)	1:A:112:ASP:HB3	1:A:112:ASP:H	10	0.41
(2,257)	1:A:32:SER:HB2	1:A:38:GLN:HE22	13	0.41
(2,257)	1:A:32:SER:HB3	1:A:38:GLN:HE22	13	0.41
(2,257)	1:A:33:ASP:HA	1:A:38:GLN:HE22	13	0.41
(2,257)	1:A:35:SER:HB2	1:A:38:GLN:HE22	13	0.41
(2,257)	1:A:35:SER:HB3	1:A:38:GLN:HE22	13	0.41
(2,207)	1:A:79:ASN:HB2	1:A:79:ASN:HD22	7	0.41
(2,207)	1:A:97:CYS:HB2	1:A:79:ASN:HD22	7	0.41
(2,137)	1:A:116:GLU:HB2	1:A:117:LEU:H	19	0.41
(2,137)	1:A:116:GLU:HB3	1:A:117:LEU:H	19	0.41
(2,137)	1:A:117:LEU:HB2	1:A:117:LEU:H	19	0.41
(2,137)	1:A:117:LEU:HB3	1:A:117:LEU:H	19	0.41
(2,13)	1:A:110:CYS:HB2	1:A:113:GLY:H	4	0.41
(2,13)	1:A:110:CYS:HB3	1:A:113:GLY:H	4	0.41
(2,13)	1:A:111:SER:HB2	1:A:113:GLY:H	4	0.41
(2,13)	1:A:111:SER:HB3	1:A:113:GLY:H	4	0.41
(2,13)	1:A:113:GLY:HA2	1:A:113:GLY:H	4	0.41
(2,13)	1:A:113:GLY:HA3	1:A:113:GLY:H	4	0.41
(2,13)	1:A:110:CYS:HB2	1:A:113:GLY:H	7	0.41
(2,13)	1:A:110:CYS:HB3	1:A:113:GLY:H	7	0.41
(2,13)	1:A:111:SER:HB2	1:A:113:GLY:H	7	0.41
(2,13)	1:A:111:SER:HB3	1:A:113:GLY:H	7	0.41
(2,13)	1:A:113:GLY:HA2	1:A:113:GLY:H	7	0.41
(2,13)	1:A:113:GLY:HA3	1:A:113:GLY:H	7	0.41
(2,114)	1:A:16:VAL:HG11	1:A:16:VAL:H	5	0.41
(2,114)	1:A:16:VAL:HG12	1:A:16:VAL:H	5	0.41
(2,114)	1:A:16:VAL:HG13	1:A:16:VAL:H	5	0.41
(2,114)	1:A:16:VAL:HG21	1:A:16:VAL:H	5	0.41
(2,114)	1:A:16:VAL:HG21	1:A:16:VAL:H	5	0.41
(2,114)	1:A:16:VAL:HG22	1:A:16:VAL:H	5	0.41
(2,114)	1:A:16:VAL:HG22	1:A:16:VAL:H	5	0.41
(2,114)	1:A:16:VAL:HG23	1:A:16:VAL:H	5	0.41
(2,114)	1:A:16:VAL:HG23	1:A:16:VAL:H	5	0.41
(2,11)	1:A:108:ASP:HA	1:A:113:GLY:H	11	0.41
(2,11)	1:A:109:ASP:HA	1:A:113:GLY:H	11	0.41

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,11)	1:A:110:CYS:HA	1:A:113:GLY:H	11	0.41
(2,11)	1:A:114:SER:HG	1:A:113:GLY:H	11	0.41
(1,99)	1:A:98:ILE:HG12	1:A:99:SER:H	11	0.41
(1,99)	1:A:98:ILE:HG13	1:A:99:SER:H	11	0.41
(1,97)	1:A:98:ILE:HD11	1:A:99:SER:H	19	0.41
(1,97)	1:A:98:ILE:HD12	1:A:99:SER:H	19	0.41
(1,97)	1:A:98:ILE:HD13	1:A:99:SER:H	19	0.41
(1,93)	1:A:8:PHE:H	1:A:7:ASP:HA	4	0.41
(1,93)	1:A:8:PHE:H	1:A:7:ASP:HA	11	0.41
(1,923)	1:A:8:PHE:HB2	1:A:16:VAL:HA	12	0.41
(1,92)	1:A:7:ASP:HB2	1:A:8:PHE:H	8	0.41
(1,92)	1:A:7:ASP:HB3	1:A:8:PHE:H	8	0.41
(1,911)	1:A:57:GLN:HE21	1:A:71:CYS:H	17	0.41
(1,897)	1:A:77:GLU:HB2	1:A:69:ASN:HD22	13	0.41
(1,897)	1:A:77:GLU:HB3	1:A:69:ASN:HD22	13	0.41
(1,862)	1:A:21:LYS:HE2	1:A:19:ARG:H	7	0.41
(1,862)	1:A:21:LYS:HE3	1:A:19:ARG:H	7	0.41
(1,856)	1:A:14:GLN:H	1:A:12:ASN:HD22	8	0.41
(1,850)	1:A:12:ASN:H	1:A:11:ASN:HD22	17	0.41
(1,85)	1:A:21:LYS:HG2	1:A:22:CYS:H	8	0.41
(1,85)	1:A:21:LYS:HG3	1:A:22:CYS:H	8	0.41
(1,833)	1:A:42:ARG:HG2	1:A:41:MET:H	11	0.41
(1,833)	1:A:42:ARG:HG2	1:A:41:MET:H	11	0.41
(1,833)	1:A:42:ARG:HG3	1:A:41:MET:H	11	0.41
(1,833)	1:A:42:ARG:HG3	1:A:41:MET:H	11	0.41
(1,81)	1:A:28:CYS:HA	1:A:33:ASP:H	1	0.41
(1,801)	1:A:102:PHE:HB2	1:A:98:ILE:H	18	0.41
(1,801)	1:A:102:PHE:HB3	1:A:98:ILE:H	18	0.41
(1,799)	1:A:85:CYS:HA	1:A:97:CYS:H	1	0.41
(1,799)	1:A:85:CYS:HA	1:A:97:CYS:H	17	0.41
(1,794)	1:A:82:ASN:HD22	1:A:94:SER:H	15	0.41
(1,783)	1:A:71:CYS:HB2	1:A:74:GLY:H	16	0.41
(1,783)	1:A:71:CYS:HB3	1:A:74:GLY:H	16	0.41
(1,761)	1:A:72:ASP:H	1:A:57:GLN:HE21	2	0.41
(1,750)	1:A:57:GLN:HB2	1:A:52:GLY:H	8	0.41
(1,750)	1:A:57:GLN:HB2	1:A:52:GLY:H	8	0.41
(1,750)	1:A:57:GLN:HB3	1:A:52:GLY:H	8	0.41
(1,750)	1:A:57:GLN:HB3	1:A:52:GLY:H	8	0.41
(1,745)	1:A:48:GLU:HB2	1:A:49:ILE:H	2	0.41
(1,745)	1:A:48:GLU:HB3	1:A:49:ILE:H	2	0.41
(1,745)	1:A:48:GLU:HB2	1:A:49:ILE:H	6	0.41
(1,745)	1:A:48:GLU:HB3	1:A:49:ILE:H	6	0.41

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,735)	1:A:28:CYS:HB2	1:A:33:ASP:H	4	0.41
(1,735)	1:A:28:CYS:HB3	1:A:33:ASP:H	4	0.41
(1,735)	1:A:28:CYS:HB2	1:A:33:ASP:H	5	0.41
(1,735)	1:A:28:CYS:HB3	1:A:33:ASP:H	5	0.41
(1,735)	1:A:28:CYS:HB2	1:A:33:ASP:H	17	0.41
(1,735)	1:A:28:CYS:HB3	1:A:33:ASP:H	17	0.41
(1,732)	1:A:31:GLY:HA2	1:A:32:SER:H	4	0.41
(1,732)	1:A:31:GLY:HA3	1:A:32:SER:H	4	0.41
(1,732)	1:A:31:GLY:HA2	1:A:32:SER:H	5	0.41
(1,732)	1:A:31:GLY:HA3	1:A:32:SER:H	5	0.41
(1,732)	1:A:31:GLY:HA2	1:A:32:SER:H	12	0.41
(1,732)	1:A:31:GLY:HA3	1:A:32:SER:H	12	0.41
(1,73)	1:A:65:CYS:HB2	1:A:65:CYS:H	19	0.41
(1,73)	1:A:65:CYS:HB3	1:A:65:CYS:H	19	0.41
(1,706)	1:A:45:ARG:HB2	1:A:45:ARG:H	17	0.41
(1,706)	1:A:45:ARG:HB3	1:A:45:ARG:H	17	0.41
(1,696)	1:A:44:CYS:HB2	1:A:34:GLU:H	7	0.41
(1,696)	1:A:44:CYS:HB3	1:A:34:GLU:H	7	0.41
(1,691)	1:A:49:ILE:HG12	1:A:49:ILE:H	8	0.41
(1,691)	1:A:49:ILE:HG13	1:A:49:ILE:H	8	0.41
(1,686)	1:A:74:GLY:H	1:A:69:ASN:HD22	12	0.41
(1,681)	1:A:79:ASN:HD21	1:A:87:PRO:HD2	5	0.41
(1,681)	1:A:79:ASN:HD21	1:A:87:PRO:HD3	5	0.41
(1,681)	1:A:79:ASN:HD21	1:A:87:PRO:HD2	11	0.41
(1,681)	1:A:79:ASN:HD21	1:A:87:PRO:HD3	11	0.41
(1,670)	1:A:107:GLN:HB2	1:A:105:ASN:HD22	7	0.41
(1,670)	1:A:107:GLN:HB2	1:A:105:ASN:HD22	7	0.41
(1,670)	1:A:107:GLN:HB3	1:A:105:ASN:HD22	7	0.41
(1,670)	1:A:107:GLN:HB3	1:A:105:ASN:HD22	7	0.41
(1,667)	1:A:107:GLN:HG2	1:A:105:ASN:HD22	2	0.41
(1,667)	1:A:107:GLN:HG2	1:A:105:ASN:HD22	2	0.41
(1,667)	1:A:107:GLN:HG3	1:A:105:ASN:HD22	2	0.41
(1,667)	1:A:107:GLN:HG3	1:A:105:ASN:HD22	2	0.41
(1,66)	1:A:23:ASP:H	1:A:24:GLY:H	15	0.41
(1,657)	1:A:105:ASN:HA	1:A:105:ASN:HD22	20	0.41
(1,654)	1:A:107:GLN:HB2	1:A:107:GLN:HE22	15	0.41
(1,654)	1:A:107:GLN:HB2	1:A:107:GLN:HE22	15	0.41
(1,654)	1:A:107:GLN:HB3	1:A:107:GLN:HE22	15	0.41
(1,654)	1:A:107:GLN:HB3	1:A:107:GLN:HE22	15	0.41
(1,643)	1:A:82:ASN:HB2	1:A:82:ASN:HD21	16	0.41
(1,643)	1:A:82:ASN:HB2	1:A:82:ASN:HD21	16	0.41
(1,643)	1:A:82:ASN:HB3	1:A:82:ASN:HD21	16	0.41

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,643)	1:A:82:ASN:HB3	1:A:82:ASN:HD21	16	0.41
(1,643)	1:A:82:ASN:HB2	1:A:82:ASN:HD21	17	0.41
(1,643)	1:A:82:ASN:HB2	1:A:82:ASN:HD21	17	0.41
(1,643)	1:A:82:ASN:HB3	1:A:82:ASN:HD21	17	0.41
(1,643)	1:A:82:ASN:HB3	1:A:82:ASN:HD21	17	0.41
(1,642)	1:A:82:ASN:HA	1:A:82:ASN:HD22	7	0.41
(1,642)	1:A:82:ASN:HA	1:A:82:ASN:HD22	13	0.41
(1,642)	1:A:82:ASN:HA	1:A:82:ASN:HD22	16	0.41
(1,642)	1:A:82:ASN:HA	1:A:82:ASN:HD22	19	0.41
(1,636)	1:A:78:GLU:HB2	1:A:79:ASN:HD22	15	0.41
(1,636)	1:A:78:GLU:HB2	1:A:79:ASN:HD22	15	0.41
(1,636)	1:A:78:GLU:HB3	1:A:79:ASN:HD22	15	0.41
(1,636)	1:A:78:GLU:HB3	1:A:79:ASN:HD22	15	0.41
(1,636)	1:A:78:GLU:HB2	1:A:79:ASN:HD22	17	0.41
(1,636)	1:A:78:GLU:HB2	1:A:79:ASN:HD22	17	0.41
(1,636)	1:A:78:GLU:HB2	1:A:79:ASN:HD22	17	0.41
(1,636)	1:A:78:GLU:HB3	1:A:79:ASN:HD22	17	0.41
(1,636)	1:A:78:GLU:HB3	1:A:79:ASN:HD22	17	0.41
(1,60)	1:A:56:THR:H	1:A:57:GLN:H	8	0.41
(1,60)	1:A:56:THR:H	1:A:57:GLN:H	9	0.41
(1,596)	1:A:74:GLY:HA2	1:A:69:ASN:HD21	13	0.41
(1,596)	1:A:74:GLY:HA3	1:A:69:ASN:HD21	13	0.41
(1,555)	1:A:103:VAL:HG11	1:A:104:CYS:H	3	0.41
(1,555)	1:A:103:VAL:HG12	1:A:104:CYS:H	3	0.41
(1,555)	1:A:103:VAL:HG13	1:A:104:CYS:H	3	0.41
(1,555)	1:A:103:VAL:HG21	1:A:104:CYS:H	3	0.41
(1,555)	1:A:103:VAL:HG22	1:A:104:CYS:H	3	0.41
(1,555)	1:A:103:VAL:HG23	1:A:104:CYS:H	3	0.41
(1,553)	1:A:115:ASP:HB2	1:A:104:CYS:H	15	0.41
(1,553)	1:A:115:ASP:HB3	1:A:104:CYS:H	15	0.41
(1,534)	1:A:77:GLU:HB2	1:A:77:GLU:H	17	0.41
(1,534)	1:A:77:GLU:HB3	1:A:77:GLU:H	17	0.41
(1,529)	1:A:59:ILE:HD11	1:A:70:ASP:H	14	0.41
(1,529)	1:A:59:ILE:HD12	1:A:70:ASP:H	14	0.41
(1,529)	1:A:59:ILE:HD13	1:A:70:ASP:H	14	0.41
(1,526)	1:A:64:ARG:H	1:A:67:GLY:H	19	0.41
(1,504)	1:A:39:CYS:HB2	1:A:39:CYS:H	2	0.41
(1,504)	1:A:39:CYS:HB3	1:A:39:CYS:H	2	0.41
(1,486)	1:A:7:ASP:HA	1:A:19:ARG:H	2	0.41
(1,483)	1:A:10:CYS:HB2	1:A:14:GLN:H	1	0.41
(1,483)	1:A:10:CYS:HB3	1:A:14:GLN:H	1	0.41
(1,483)	1:A:10:CYS:HB2	1:A:14:GLN:H	2	0.41
(1,483)	1:A:10:CYS:HB3	1:A:14:GLN:H	2	0.41

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,457)	1:A:74:GLY:HA2	1:A:76:ASP:H	6	0.41
(1,457)	1:A:74:GLY:HA3	1:A:76:ASP:H	6	0.41
(1,436)	1:A:73:SER:H	1:A:72:ASP:H	13	0.41
(1,375)	1:A:48:GLU:HA	1:A:49:ILE:H	17	0.41
(1,371)	1:A:44:CYS:HA	1:A:45:ARG:H	8	0.41
(1,371)	1:A:44:CYS:HA	1:A:45:ARG:H	19	0.41
(1,366)	1:A:42:ARG:HB2	1:A:43:THR:H	10	0.41
(1,366)	1:A:42:ARG:HB2	1:A:43:THR:H	10	0.41
(1,366)	1:A:42:ARG:HB3	1:A:43:THR:H	10	0.41
(1,366)	1:A:42:ARG:HB3	1:A:43:THR:H	10	0.41
(1,366)	1:A:42:ARG:HB2	1:A:43:THR:H	15	0.41
(1,366)	1:A:42:ARG:HB2	1:A:43:THR:H	15	0.41
(1,366)	1:A:42:ARG:HB3	1:A:43:THR:H	15	0.41
(1,366)	1:A:42:ARG:HB3	1:A:43:THR:H	15	0.41
(1,365)	1:A:43:THR:HB	1:A:43:THR:H	14	0.41
(1,365)	1:A:43:THR:HB	1:A:43:THR:H	18	0.41
(1,327)	1:A:22:CYS:HB2	1:A:22:CYS:H	1	0.41
(1,327)	1:A:22:CYS:HB3	1:A:22:CYS:H	1	0.41
(1,327)	1:A:22:CYS:HB2	1:A:22:CYS:H	17	0.41
(1,327)	1:A:22:CYS:HB3	1:A:22:CYS:H	17	0.41
(1,323)	1:A:64:ARG:H	1:A:80:CYS:HB2	3	0.41
(1,323)	1:A:64:ARG:H	1:A:80:CYS:HB3	3	0.41
(1,323)	1:A:64:ARG:H	1:A:80:CYS:HB2	5	0.41
(1,323)	1:A:64:ARG:H	1:A:80:CYS:HB3	5	0.41
(1,298)	1:A:14:GLN:H	1:A:11:ASN:H	13	0.41
(1,298)	1:A:14:GLN:H	1:A:11:ASN:H	20	0.41
(1,289)	1:A:8:PHE:HA	1:A:8:PHE:H	8	0.41
(1,289)	1:A:8:PHE:HA	1:A:8:PHE:H	13	0.41
(1,224)	1:A:92:CYS:HA	1:A:94:SER:H	18	0.41
(1,158)	1:A:104:CYS:HA	1:A:105:ASN:H	2	0.41
(1,109)	1:A:119:CYS:H	1:A:117:LEU:HG	11	0.41
(1,109)	1:A:119:CYS:H	1:A:117:LEU:HG	13	0.41
(2,98)	1:A:28:CYS:HB2	1:A:11:ASN:H	14	0.4
(2,98)	1:A:28:CYS:HB3	1:A:11:ASN:H	14	0.4
(2,98)	1:A:32:SER:HB2	1:A:11:ASN:H	14	0.4
(2,98)	1:A:32:SER:HB3	1:A:11:ASN:H	14	0.4
(2,80)	1:A:41:MET:HA	1:A:56:THR:H	3	0.4
(2,80)	1:A:42:ARG:HA	1:A:56:THR:H	3	0.4
(2,80)	1:A:56:THR:HB	1:A:56:THR:H	3	0.4
(2,8)	1:A:24:GLY:HA2	1:A:46:ILE:H	11	0.4
(2,8)	1:A:24:GLY:HA3	1:A:46:ILE:H	11	0.4
(2,8)	1:A:45:ARG:HA	1:A:46:ILE:H	11	0.4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,62)	1:A:56:THR:HG1	1:A:56:THR:H	19	0.4
(2,62)	1:A:56:THR:HG1	1:A:56:THR:H	19	0.4
(2,62)	1:A:56:THR:HG21	1:A:56:THR:H	19	0.4
(2,62)	1:A:56:THR:HG21	1:A:56:THR:H	19	0.4
(2,62)	1:A:56:THR:HG22	1:A:56:THR:H	19	0.4
(2,62)	1:A:56:THR:HG22	1:A:56:THR:H	19	0.4
(2,62)	1:A:56:THR:HG23	1:A:56:THR:H	19	0.4
(2,62)	1:A:56:THR:HG23	1:A:56:THR:H	19	0.4
(2,54)	1:A:17:PRO:HB2	1:A:18:SER:H	4	0.4
(2,54)	1:A:17:PRO:HB3	1:A:18:SER:H	4	0.4
(2,54)	1:A:17:PRO:HG2	1:A:18:SER:H	4	0.4
(2,54)	1:A:17:PRO:HG3	1:A:18:SER:H	4	0.4
(2,54)	1:A:17:PRO:HB2	1:A:18:SER:H	6	0.4
(2,54)	1:A:17:PRO:HB3	1:A:18:SER:H	6	0.4
(2,54)	1:A:17:PRO:HG2	1:A:18:SER:H	6	0.4
(2,54)	1:A:17:PRO:HG3	1:A:18:SER:H	6	0.4
(2,377)	1:A:33:ASP:HB2	1:A:33:ASP:H	8	0.4
(2,377)	1:A:33:ASP:HB3	1:A:33:ASP:H	8	0.4
(2,377)	1:A:34:GLU:HB2	1:A:33:ASP:H	8	0.4
(2,377)	1:A:34:GLU:HB3	1:A:33:ASP:H	8	0.4
(2,377)	1:A:33:ASP:HB2	1:A:33:ASP:H	9	0.4
(2,377)	1:A:33:ASP:HB3	1:A:33:ASP:H	9	0.4
(2,377)	1:A:34:GLU:HB2	1:A:33:ASP:H	9	0.4
(2,377)	1:A:34:GLU:HB3	1:A:33:ASP:H	9	0.4
(2,377)	1:A:33:ASP:HB2	1:A:33:ASP:H	14	0.4
(2,377)	1:A:33:ASP:HB3	1:A:33:ASP:H	14	0.4
(2,377)	1:A:34:GLU:HB2	1:A:33:ASP:H	14	0.4
(2,377)	1:A:34:GLU:HB3	1:A:33:ASP:H	14	0.4
(2,375)	1:A:48:GLU:HB2	1:A:61:VAL:H	5	0.4
(2,375)	1:A:48:GLU:HB3	1:A:61:VAL:H	5	0.4
(2,375)	1:A:60:PRO:HD3	1:A:61:VAL:H	5	0.4
(2,306)	1:A:71:CYS:HB2	1:A:77:GLU:H	11	0.4
(2,306)	1:A:71:CYS:HB3	1:A:77:GLU:H	11	0.4
(2,306)	1:A:80:CYS:HB2	1:A:77:GLU:H	11	0.4
(2,306)	1:A:80:CYS:HB3	1:A:77:GLU:H	11	0.4
(2,305)	1:A:72:ASP:HB2	1:A:72:ASP:H	15	0.4
(2,305)	1:A:72:ASP:HB3	1:A:72:ASP:H	15	0.4
(2,305)	1:A:72:ASP:HB3	1:A:72:ASP:H	15	0.4
(2,305)	1:A:76:ASP:HB2	1:A:72:ASP:H	15	0.4
(2,305)	1:A:76:ASP:HB2	1:A:72:ASP:H	15	0.4
(2,305)	1:A:76:ASP:HB3	1:A:72:ASP:H	15	0.4
(2,281)	1:A:10:CYS:HA	1:A:11:ASN:HD22	8	0.4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,281)	1:A:11:ASN:HA	1:A:11:ASN:HD22	8	0.4
(2,277)	1:A:19:ARG:HG2	1:A:19:ARG:H	19	0.4
(2,277)	1:A:19:ARG:HG2	1:A:19:ARG:H	19	0.4
(2,277)	1:A:19:ARG:HG3	1:A:19:ARG:H	19	0.4
(2,277)	1:A:19:ARG:HG3	1:A:19:ARG:H	19	0.4
(2,277)	1:A:21:LYS:HD2	1:A:19:ARG:H	19	0.4
(2,276)	1:A:42:ARG:HA	1:A:57:GLN:H	18	0.4
(2,276)	1:A:43:THR:HA	1:A:57:GLN:H	18	0.4
(2,276)	1:A:56:THR:HB	1:A:57:GLN:H	18	0.4
(2,239)	1:A:64:ARG:HB2	1:A:69:ASN:H	9	0.4
(2,239)	1:A:64:ARG:HB3	1:A:69:ASN:H	9	0.4
(2,239)	1:A:64:ARG:HG2	1:A:69:ASN:H	9	0.4
(2,239)	1:A:64:ARG:HG3	1:A:69:ASN:H	9	0.4
(2,239)	1:A:68:GLU:HB2	1:A:69:ASN:H	9	0.4
(2,239)	1:A:68:GLU:HB3	1:A:69:ASN:H	9	0.4
(2,223)	1:A:45:ARG:HG2	1:A:45:ARG:H	15	0.4
(2,223)	1:A:45:ARG:HG3	1:A:45:ARG:H	15	0.4
(2,223)	1:A:46:ILE:HB	1:A:45:ARG:H	15	0.4
(2,223)	1:A:45:ARG:HG2	1:A:45:ARG:H	16	0.4
(2,223)	1:A:45:ARG:HG3	1:A:45:ARG:H	16	0.4
(2,223)	1:A:46:ILE:HB	1:A:45:ARG:H	16	0.4
(2,212)	1:A:88:ASP:H	1:A:86:SER:H	16	0.4
(2,207)	1:A:79:ASN:HB2	1:A:79:ASN:HD22	13	0.4
(2,207)	1:A:97:CYS:HB2	1:A:79:ASN:HD22	13	0.4
(2,20)	1:A:82:ASN:H	1:A:83:ILE:H	8	0.4
(2,20)	1:A:85:CYS:H	1:A:83:ILE:H	8	0.4
(2,184)	1:A:16:VAL:HG11	1:A:15:CYS:H	13	0.4
(2,184)	1:A:16:VAL:HG11	1:A:15:CYS:H	13	0.4
(2,184)	1:A:16:VAL:HG11	1:A:15:CYS:H	13	0.4
(2,184)	1:A:16:VAL:HG12	1:A:15:CYS:H	13	0.4
(2,184)	1:A:16:VAL:HG12	1:A:15:CYS:H	13	0.4
(2,184)	1:A:16:VAL:HG12	1:A:15:CYS:H	13	0.4
(2,184)	1:A:16:VAL:HG13	1:A:15:CYS:H	13	0.4
(2,184)	1:A:16:VAL:HG13	1:A:15:CYS:H	13	0.4
(2,184)	1:A:16:VAL:HG13	1:A:15:CYS:H	13	0.4
(2,184)	1:A:16:VAL:HG21	1:A:15:CYS:H	13	0.4
(2,184)	1:A:16:VAL:HG21	1:A:15:CYS:H	13	0.4
(2,184)	1:A:16:VAL:HG21	1:A:15:CYS:H	13	0.4
(2,184)	1:A:16:VAL:HG22	1:A:15:CYS:H	13	0.4
(2,184)	1:A:16:VAL:HG22	1:A:15:CYS:H	13	0.4
(2,184)	1:A:16:VAL:HG22	1:A:15:CYS:H	13	0.4
(2,184)	1:A:16:VAL:HG23	1:A:15:CYS:H	13	0.4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,184)	1:A:16:VAL:HG23	1:A:15:CYS:H	13	0.4
(2,184)	1:A:16:VAL:HG23	1:A:15:CYS:H	13	0.4
(2,184)	1:A:16:VAL:HG11	1:A:15:CYS:H	18	0.4
(2,184)	1:A:16:VAL:HG11	1:A:15:CYS:H	18	0.4
(2,184)	1:A:16:VAL:HG11	1:A:15:CYS:H	18	0.4
(2,184)	1:A:16:VAL:HG12	1:A:15:CYS:H	18	0.4
(2,184)	1:A:16:VAL:HG12	1:A:15:CYS:H	18	0.4
(2,184)	1:A:16:VAL:HG12	1:A:15:CYS:H	18	0.4
(2,184)	1:A:16:VAL:HG12	1:A:15:CYS:H	18	0.4
(2,184)	1:A:16:VAL:HG13	1:A:15:CYS:H	18	0.4
(2,184)	1:A:16:VAL:HG13	1:A:15:CYS:H	18	0.4
(2,184)	1:A:16:VAL:HG13	1:A:15:CYS:H	18	0.4
(2,184)	1:A:16:VAL:HG21	1:A:15:CYS:H	18	0.4
(2,184)	1:A:16:VAL:HG21	1:A:15:CYS:H	18	0.4
(2,184)	1:A:16:VAL:HG21	1:A:15:CYS:H	18	0.4
(2,184)	1:A:16:VAL:HG22	1:A:15:CYS:H	18	0.4
(2,184)	1:A:16:VAL:HG22	1:A:15:CYS:H	18	0.4
(2,184)	1:A:16:VAL:HG22	1:A:15:CYS:H	18	0.4
(2,184)	1:A:16:VAL:HG23	1:A:15:CYS:H	18	0.4
(2,184)	1:A:16:VAL:HG23	1:A:15:CYS:H	18	0.4
(2,184)	1:A:16:VAL:HG23	1:A:15:CYS:H	18	0.4
(2,180)	1:A:10:CYS:HA	1:A:11:ASN:HD21	11	0.4
(2,180)	1:A:11:ASN:HA	1:A:11:ASN:HD21	11	0.4
(2,180)	1:A:10:CYS:HA	1:A:11:ASN:HD21	16	0.4
(2,180)	1:A:11:ASN:HA	1:A:11:ASN:HD21	16	0.4
(2,162)	1:A:50:SER:HA	1:A:59:ILE:H	10	0.4
(2,162)	1:A:59:ILE:HA	1:A:59:ILE:H	10	0.4
(2,160)	1:A:43:THR:HG1	1:A:43:THR:H	11	0.4
(2,160)	1:A:43:THR:HG1	1:A:43:THR:H	11	0.4
(2,160)	1:A:43:THR:HG21	1:A:43:THR:H	11	0.4
(2,160)	1:A:43:THR:HG21	1:A:43:THR:H	11	0.4
(2,160)	1:A:43:THR:HG22	1:A:43:THR:H	11	0.4
(2,160)	1:A:43:THR:HG22	1:A:43:THR:H	11	0.4
(2,160)	1:A:43:THR:HG23	1:A:43:THR:H	11	0.4
(2,160)	1:A:43:THR:HG23	1:A:43:THR:H	11	0.4
(2,160)	1:A:56:THR:HG1	1:A:43:THR:H	11	0.4
(2,160)	1:A:56:THR:HG21	1:A:43:THR:H	11	0.4
(2,160)	1:A:56:THR:HG22	1:A:43:THR:H	11	0.4
(2,160)	1:A:56:THR:HG23	1:A:43:THR:H	11	0.4
(2,160)	1:A:43:THR:HG1	1:A:43:THR:H	19	0.4
(2,160)	1:A:43:THR:HG1	1:A:43:THR:H	19	0.4
(2,160)	1:A:43:THR:HG21	1:A:43:THR:H	19	0.4
(2,160)	1:A:43:THR:HG21	1:A:43:THR:H	19	0.4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,160)	1:A:43:THR:HG22	1:A:43:THR:H	19	0.4
(2,160)	1:A:43:THR:HG22	1:A:43:THR:H	19	0.4
(2,160)	1:A:43:THR:HG23	1:A:43:THR:H	19	0.4
(2,160)	1:A:43:THR:HG23	1:A:43:THR:H	19	0.4
(2,160)	1:A:56:THR:HG1	1:A:43:THR:H	19	0.4
(2,160)	1:A:56:THR:HG21	1:A:43:THR:H	19	0.4
(2,160)	1:A:56:THR:HG22	1:A:43:THR:H	19	0.4
(2,160)	1:A:56:THR:HG23	1:A:43:THR:H	19	0.4
(2,149)	1:A:49:ILE:HG21	1:A:59:ILE:H	15	0.4
(2,149)	1:A:49:ILE:HG22	1:A:59:ILE:H	15	0.4
(2,149)	1:A:49:ILE:HG23	1:A:59:ILE:H	15	0.4
(2,149)	1:A:59:ILE:HD11	1:A:59:ILE:H	15	0.4
(2,149)	1:A:59:ILE:HD12	1:A:59:ILE:H	15	0.4
(2,149)	1:A:59:ILE:HD13	1:A:59:ILE:H	15	0.4
(2,149)	1:A:59:ILE:HG21	1:A:59:ILE:H	15	0.4
(2,149)	1:A:59:ILE:HG22	1:A:59:ILE:H	15	0.4
(2,149)	1:A:59:ILE:HG23	1:A:59:ILE:H	15	0.4
(2,131)	1:A:25:ASP:HB2	1:A:27:ASP:H	20	0.4
(2,131)	1:A:25:ASP:HB3	1:A:27:ASP:H	20	0.4
(2,131)	1:A:33:ASP:HB2	1:A:27:ASP:H	20	0.4
(2,131)	1:A:34:GLU:HB3	1:A:27:ASP:H	20	0.4
(2,116)	1:A:37:GLU:HB2	1:A:38:GLN:HE22	17	0.4
(2,116)	1:A:37:GLU:HB3	1:A:38:GLN:HE22	17	0.4
(2,116)	1:A:37:GLU:HB3	1:A:38:GLN:HE22	17	0.4
(2,116)	1:A:38:GLN:HB2	1:A:38:GLN:HE22	17	0.4
(2,116)	1:A:38:GLN:HB2	1:A:38:GLN:HE22	17	0.4
(2,116)	1:A:38:GLN:HB3	1:A:38:GLN:HE22	17	0.4
(1,93)	1:A:8:PHE:H	1:A:7:ASP:HA	10	0.4
(1,911)	1:A:57:GLN:HE21	1:A:71:CYS:H	9	0.4
(1,911)	1:A:57:GLN:HE21	1:A:71:CYS:H	11	0.4
(1,909)	1:A:43:THR:HG1	1:A:46:ILE:H	19	0.4
(1,909)	1:A:43:THR:HG21	1:A:46:ILE:H	19	0.4
(1,909)	1:A:43:THR:HG22	1:A:46:ILE:H	19	0.4
(1,909)	1:A:43:THR:HG23	1:A:46:ILE:H	19	0.4
(1,896)	1:A:64:ARG:H	1:A:66:ASP:H	12	0.4
(1,891)	1:A:64:ARG:H	1:A:80:CYS:HB2	12	0.4
(1,891)	1:A:64:ARG:H	1:A:80:CYS:HB3	12	0.4
(1,888)	1:A:49:ILE:HA	1:A:61:VAL:H	5	0.4
(1,862)	1:A:21:LYS:HE2	1:A:19:ARG:H	4	0.4
(1,862)	1:A:21:LYS:HE3	1:A:19:ARG:H	4	0.4
(1,862)	1:A:21:LYS:HE2	1:A:19:ARG:H	12	0.4
(1,862)	1:A:21:LYS:HE3	1:A:19:ARG:H	12	0.4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,859)	1:A:3:CYS:HB2	1:A:18:SER:H	10	0.4
(1,859)	1:A:3:CYS:HB3	1:A:18:SER:H	10	0.4
(1,837)	1:A:50:SER:H	1:A:45:ARG:HD2	13	0.4
(1,837)	1:A:50:SER:H	1:A:45:ARG:HD3	13	0.4
(1,833)	1:A:42:ARG:HG2	1:A:41:MET:H	6	0.4
(1,833)	1:A:42:ARG:HG2	1:A:41:MET:H	6	0.4
(1,833)	1:A:42:ARG:HG3	1:A:41:MET:H	6	0.4
(1,833)	1:A:42:ARG:HG3	1:A:41:MET:H	6	0.4
(1,81)	1:A:28:CYS:HA	1:A:33:ASP:H	18	0.4
(1,796)	1:A:96:ARG:H	1:A:83:ILE:HG21	12	0.4
(1,796)	1:A:96:ARG:H	1:A:83:ILE:HG22	12	0.4
(1,796)	1:A:96:ARG:H	1:A:83:ILE:HG23	12	0.4
(1,783)	1:A:71:CYS:HB2	1:A:74:GLY:H	1	0.4
(1,783)	1:A:71:CYS:HB3	1:A:74:GLY:H	1	0.4
(1,772)	1:A:68:GLU:H	1:A:64:ARG:H	20	0.4
(1,746)	1:A:50:SER:H	1:A:49:ILE:HG12	12	0.4
(1,746)	1:A:50:SER:H	1:A:49:ILE:HG13	12	0.4
(1,745)	1:A:48:GLU:HB2	1:A:49:ILE:H	3	0.4
(1,745)	1:A:48:GLU:HB3	1:A:49:ILE:H	3	0.4
(1,735)	1:A:28:CYS:HB2	1:A:33:ASP:H	8	0.4
(1,735)	1:A:28:CYS:HB3	1:A:33:ASP:H	8	0.4
(1,735)	1:A:28:CYS:HB2	1:A:33:ASP:H	11	0.4
(1,735)	1:A:28:CYS:HB3	1:A:33:ASP:H	11	0.4
(1,733)	1:A:32:SER:H	1:A:28:CYS:H	3	0.4
(1,733)	1:A:32:SER:H	1:A:28:CYS:H	18	0.4
(1,732)	1:A:31:GLY:HA2	1:A:32:SER:H	2	0.4
(1,732)	1:A:31:GLY:HA3	1:A:32:SER:H	2	0.4
(1,732)	1:A:31:GLY:HA2	1:A:32:SER:H	6	0.4
(1,732)	1:A:31:GLY:HA3	1:A:32:SER:H	6	0.4
(1,732)	1:A:31:GLY:HA2	1:A:32:SER:H	9	0.4
(1,732)	1:A:31:GLY:HA3	1:A:32:SER:H	9	0.4
(1,732)	1:A:31:GLY:HA2	1:A:32:SER:H	15	0.4
(1,732)	1:A:31:GLY:HA3	1:A:32:SER:H	15	0.4
(1,73)	1:A:65:CYS:HB2	1:A:65:CYS:H	6	0.4
(1,73)	1:A:65:CYS:HB3	1:A:65:CYS:H	6	0.4
(1,73)	1:A:65:CYS:HB2	1:A:65:CYS:H	7	0.4
(1,73)	1:A:65:CYS:HB3	1:A:65:CYS:H	7	0.4
(1,73)	1:A:65:CYS:HB2	1:A:65:CYS:H	12	0.4
(1,73)	1:A:65:CYS:HB3	1:A:65:CYS:H	12	0.4
(1,73)	1:A:65:CYS:HB2	1:A:65:CYS:H	14	0.4
(1,73)	1:A:65:CYS:HB3	1:A:65:CYS:H	14	0.4
(1,73)	1:A:65:CYS:HB2	1:A:65:CYS:H	18	0.4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,73)	1:A:65:CYS:HB3	1:A:65:CYS:H	18	0.4
(1,729)	1:A:32:SER:H	1:A:28:CYS:H	3	0.4
(1,729)	1:A:32:SER:H	1:A:28:CYS:H	18	0.4
(1,710)	1:A:8:PHE:H	1:A:21:LYS:HD2	7	0.4
(1,710)	1:A:8:PHE:H	1:A:21:LYS:HD3	7	0.4
(1,705)	1:A:100:ARG:H	1:A:100:ARG:HD2	19	0.4
(1,705)	1:A:100:ARG:H	1:A:100:ARG:HD3	19	0.4
(1,704)	1:A:100:ARG:HG2	1:A:100:ARG:H	9	0.4
(1,704)	1:A:100:ARG:HG2	1:A:100:ARG:H	9	0.4
(1,704)	1:A:100:ARG:HG3	1:A:100:ARG:H	9	0.4
(1,704)	1:A:100:ARG:HG3	1:A:100:ARG:H	9	0.4
(1,688)	1:A:69:ASN:H	1:A:69:ASN:HD22	19	0.4
(1,685)	1:A:107:GLN:HG2	1:A:107:GLN:HE21	12	0.4
(1,685)	1:A:107:GLN:HG2	1:A:107:GLN:HE21	12	0.4
(1,685)	1:A:107:GLN:HG3	1:A:107:GLN:HE21	12	0.4
(1,685)	1:A:107:GLN:HG3	1:A:107:GLN:HE21	12	0.4
(1,681)	1:A:79:ASN:HD21	1:A:87:PRO:HD2	13	0.4
(1,681)	1:A:79:ASN:HD21	1:A:87:PRO:HD3	13	0.4
(1,667)	1:A:107:GLN:HG2	1:A:105:ASN:HD22	6	0.4
(1,667)	1:A:107:GLN:HG2	1:A:105:ASN:HD22	6	0.4
(1,667)	1:A:107:GLN:HG3	1:A:105:ASN:HD22	6	0.4
(1,667)	1:A:107:GLN:HG3	1:A:105:ASN:HD22	6	0.4
(1,66)	1:A:23:ASP:H	1:A:24:GLY:H	12	0.4
(1,657)	1:A:105:ASN:HA	1:A:105:ASN:HD22	12	0.4
(1,657)	1:A:105:ASN:HA	1:A:105:ASN:HD22	13	0.4
(1,657)	1:A:105:ASN:HA	1:A:105:ASN:HD22	15	0.4
(1,657)	1:A:105:ASN:HA	1:A:105:ASN:HD22	18	0.4
(1,654)	1:A:107:GLN:HB2	1:A:107:GLN:HE22	14	0.4
(1,654)	1:A:107:GLN:HB2	1:A:107:GLN:HE22	14	0.4
(1,654)	1:A:107:GLN:HB3	1:A:107:GLN:HE22	14	0.4
(1,654)	1:A:107:GLN:HB3	1:A:107:GLN:HE22	14	0.4
(1,643)	1:A:82:ASN:HB2	1:A:82:ASN:HD21	1	0.4
(1,643)	1:A:82:ASN:HB2	1:A:82:ASN:HD21	1	0.4
(1,643)	1:A:82:ASN:HB3	1:A:82:ASN:HD21	1	0.4
(1,643)	1:A:82:ASN:HB3	1:A:82:ASN:HD21	1	0.4
(1,643)	1:A:82:ASN:HB2	1:A:82:ASN:HD21	2	0.4
(1,643)	1:A:82:ASN:HB2	1:A:82:ASN:HD21	2	0.4
(1,643)	1:A:82:ASN:HB3	1:A:82:ASN:HD21	2	0.4
(1,643)	1:A:82:ASN:HB3	1:A:82:ASN:HD21	2	0.4
(1,643)	1:A:82:ASN:HB2	1:A:82:ASN:HD21	13	0.4
(1,643)	1:A:82:ASN:HB2	1:A:82:ASN:HD21	13	0.4
(1,643)	1:A:82:ASN:HB3	1:A:82:ASN:HD21	13	0.4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,643)	1:A:82:ASN:HB3	1:A:82:ASN:HD21	13	0.4
(1,60)	1:A:56:THR:H	1:A:57:GLN:H	4	0.4
(1,596)	1:A:74:GLY:HA2	1:A:69:ASN:HD21	18	0.4
(1,596)	1:A:74:GLY:HA3	1:A:69:ASN:HD21	18	0.4
(1,543)	1:A:112:ASP:HB2	1:A:114:SER:H	19	0.4
(1,543)	1:A:112:ASP:HB3	1:A:114:SER:H	19	0.4
(1,534)	1:A:77:GLU:HB2	1:A:77:GLU:H	15	0.4
(1,534)	1:A:77:GLU:HB3	1:A:77:GLU:H	15	0.4
(1,517)	1:A:59:ILE:HG12	1:A:59:ILE:H	16	0.4
(1,517)	1:A:59:ILE:HG12	1:A:59:ILE:H	16	0.4
(1,517)	1:A:59:ILE:HG13	1:A:59:ILE:H	16	0.4
(1,517)	1:A:59:ILE:HG13	1:A:59:ILE:H	16	0.4
(1,447)	1:A:71:CYS:HA	1:A:74:GLY:H	5	0.4
(1,436)	1:A:73:SER:H	1:A:72:ASP:H	3	0.4
(1,398)	1:A:54:HIS:HB2	1:A:54:HIS:H	6	0.4
(1,398)	1:A:54:HIS:HB3	1:A:54:HIS:H	6	0.4
(1,398)	1:A:54:HIS:HB2	1:A:54:HIS:H	17	0.4
(1,398)	1:A:54:HIS:HB3	1:A:54:HIS:H	17	0.4
(1,398)	1:A:54:HIS:HB2	1:A:54:HIS:H	19	0.4
(1,398)	1:A:54:HIS:HB3	1:A:54:HIS:H	19	0.4
(1,398)	1:A:54:HIS:HB2	1:A:54:HIS:H	20	0.4
(1,398)	1:A:54:HIS:HB3	1:A:54:HIS:H	20	0.4
(1,390)	1:A:51:CYS:HB2	1:A:52:GLY:H	2	0.4
(1,390)	1:A:51:CYS:HB3	1:A:52:GLY:H	2	0.4
(1,376)	1:A:49:ILE:HA	1:A:49:ILE:H	3	0.4
(1,339)	1:A:25:ASP:H	1:A:20:TRP:HB2	12	0.4
(1,339)	1:A:25:ASP:H	1:A:20:TRP:HB3	12	0.4
(1,323)	1:A:64:ARG:H	1:A:80:CYS:HB2	19	0.4
(1,323)	1:A:64:ARG:H	1:A:80:CYS:HB3	19	0.4
(1,320)	1:A:7:ASP:HA	1:A:18:SER:H	1	0.4
(1,320)	1:A:7:ASP:HA	1:A:18:SER:H	5	0.4
(1,320)	1:A:7:ASP:HA	1:A:18:SER:H	8	0.4
(1,289)	1:A:8:PHE:HA	1:A:8:PHE:H	1	0.4
(1,289)	1:A:8:PHE:HA	1:A:8:PHE:H	3	0.4
(1,289)	1:A:8:PHE:HA	1:A:8:PHE:H	5	0.4
(1,289)	1:A:8:PHE:HA	1:A:8:PHE:H	15	0.4
(1,289)	1:A:8:PHE:HA	1:A:8:PHE:H	18	0.4
(1,289)	1:A:8:PHE:HA	1:A:8:PHE:H	20	0.4
(1,252)	1:A:82:ASN:HB2	1:A:83:ILE:H	4	0.4
(1,252)	1:A:82:ASN:HB2	1:A:83:ILE:H	4	0.4
(1,252)	1:A:82:ASN:HB3	1:A:83:ILE:H	4	0.4
(1,252)	1:A:82:ASN:HB3	1:A:83:ILE:H	4	0.4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,224)	1:A:92:CYS:HA	1:A:94:SER:H	13	0.4
(1,174)	1:A:103:VAL:H	1:A:101:ASN:HB2	3	0.4
(1,174)	1:A:103:VAL:H	1:A:101:ASN:HB3	3	0.4
(1,158)	1:A:104:CYS:HA	1:A:105:ASN:H	19	0.4
(1,140)	1:A:108:ASP:H	1:A:108:ASP:HB2	16	0.4
(1,140)	1:A:108:ASP:H	1:A:108:ASP:HB3	16	0.4
(1,14)	1:A:110:CYS:H	1:A:109:ASP:H	13	0.4
(1,118)	1:A:115:ASP:H	1:A:113:GLY:H	11	0.4
(1,109)	1:A:119:CYS:H	1:A:117:LEU:HG	18	0.4
(2,80)	1:A:41:MET:HA	1:A:56:THR:H	12	0.39
(2,80)	1:A:42:ARG:HA	1:A:56:THR:H	12	0.39
(2,80)	1:A:56:THR:HB	1:A:56:THR:H	12	0.39
(2,8)	1:A:24:GLY:HA2	1:A:46:ILE:H	9	0.39
(2,8)	1:A:24:GLY:HA3	1:A:46:ILE:H	9	0.39
(2,8)	1:A:45:ARG:HA	1:A:46:ILE:H	9	0.39
(2,390)	1:A:17:PRO:HB2	1:A:19:ARG:H	13	0.39
(2,390)	1:A:17:PRO:HB3	1:A:19:ARG:H	13	0.39
(2,390)	1:A:17:PRO:HG2	1:A:19:ARG:H	13	0.39
(2,390)	1:A:17:PRO:HG3	1:A:19:ARG:H	13	0.39
(2,341)	1:A:78:GLU:HG2	1:A:78:GLU:H	14	0.39
(2,341)	1:A:78:GLU:HG3	1:A:78:GLU:H	14	0.39
(2,341)	1:A:87:PRO:HB2	1:A:78:GLU:H	14	0.39
(2,341)	1:A:87:PRO:HB3	1:A:78:GLU:H	14	0.39
(2,305)	1:A:72:ASP:HB2	1:A:72:ASP:H	2	0.39
(2,305)	1:A:72:ASP:HB3	1:A:72:ASP:H	2	0.39
(2,305)	1:A:72:ASP:HB3	1:A:72:ASP:H	2	0.39
(2,305)	1:A:76:ASP:HB2	1:A:72:ASP:H	2	0.39
(2,305)	1:A:76:ASP:HB2	1:A:72:ASP:H	2	0.39
(2,305)	1:A:76:ASP:HB3	1:A:72:ASP:H	2	0.39
(2,305)	1:A:72:ASP:HB2	1:A:72:ASP:H	4	0.39
(2,305)	1:A:72:ASP:HB3	1:A:72:ASP:H	4	0.39
(2,305)	1:A:72:ASP:HB3	1:A:72:ASP:H	4	0.39
(2,305)	1:A:76:ASP:HB2	1:A:72:ASP:H	4	0.39
(2,305)	1:A:76:ASP:HB2	1:A:72:ASP:H	4	0.39
(2,305)	1:A:76:ASP:HB3	1:A:72:ASP:H	4	0.39
(2,293)	1:A:18:SER:HA	1:A:8:PHE:H	7	0.39
(2,293)	1:A:18:SER:HB2	1:A:8:PHE:H	7	0.39
(2,293)	1:A:18:SER:HB3	1:A:8:PHE:H	7	0.39
(2,208)	1:A:43:THR:HG1	1:A:52:GLY:H	12	0.39
(2,208)	1:A:43:THR:HG1	1:A:52:GLY:H	12	0.39
(2,208)	1:A:43:THR:HG21	1:A:52:GLY:H	12	0.39
(2,208)	1:A:43:THR:HG21	1:A:52:GLY:H	12	0.39

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,208)	1:A:43:THR:HG22	1:A:52:GLY:H	12	0.39
(2,208)	1:A:43:THR:HG22	1:A:52:GLY:H	12	0.39
(2,208)	1:A:43:THR:HG23	1:A:52:GLY:H	12	0.39
(2,208)	1:A:43:THR:HG23	1:A:52:GLY:H	12	0.39
(2,208)	1:A:53:ALA:HB1	1:A:52:GLY:H	12	0.39
(2,208)	1:A:53:ALA:HB2	1:A:52:GLY:H	12	0.39
(2,208)	1:A:53:ALA:HB3	1:A:52:GLY:H	12	0.39
(2,208)	1:A:56:THR:HG21	1:A:52:GLY:H	12	0.39
(2,208)	1:A:56:THR:HG22	1:A:52:GLY:H	12	0.39
(2,208)	1:A:56:THR:HG23	1:A:52:GLY:H	12	0.39
(2,190)	1:A:55:SER:HA	1:A:57:GLN:H	6	0.39
(2,190)	1:A:56:THR:HA	1:A:57:GLN:H	6	0.39
(2,190)	1:A:55:SER:HA	1:A:57:GLN:H	8	0.39
(2,190)	1:A:56:THR:HA	1:A:57:GLN:H	8	0.39
(2,190)	1:A:55:SER:HA	1:A:57:GLN:H	15	0.39
(2,190)	1:A:56:THR:HA	1:A:57:GLN:H	15	0.39
(2,180)	1:A:10:CYS:HA	1:A:11:ASN:HD21	20	0.39
(2,180)	1:A:11:ASN:HA	1:A:11:ASN:HD21	20	0.39
(2,160)	1:A:43:THR:HG1	1:A:43:THR:H	16	0.39
(2,160)	1:A:43:THR:HG1	1:A:43:THR:H	16	0.39
(2,160)	1:A:43:THR:HG21	1:A:43:THR:H	16	0.39
(2,160)	1:A:43:THR:HG21	1:A:43:THR:H	16	0.39
(2,160)	1:A:43:THR:HG22	1:A:43:THR:H	16	0.39
(2,160)	1:A:43:THR:HG22	1:A:43:THR:H	16	0.39
(2,160)	1:A:43:THR:HG23	1:A:43:THR:H	16	0.39
(2,160)	1:A:43:THR:HG23	1:A:43:THR:H	16	0.39
(2,160)	1:A:56:THR:HG1	1:A:43:THR:H	16	0.39
(2,160)	1:A:56:THR:HG21	1:A:43:THR:H	16	0.39
(2,160)	1:A:56:THR:HG22	1:A:43:THR:H	16	0.39
(2,160)	1:A:56:THR:HG23	1:A:43:THR:H	16	0.39
(2,137)	1:A:116:GLU:HB2	1:A:117:LEU:H	13	0.39
(2,137)	1:A:116:GLU:HB3	1:A:117:LEU:H	13	0.39
(2,137)	1:A:117:LEU:HB2	1:A:117:LEU:H	13	0.39
(2,137)	1:A:117:LEU:HB3	1:A:117:LEU:H	13	0.39
(2,131)	1:A:25:ASP:HB2	1:A:27:ASP:H	15	0.39
(2,131)	1:A:25:ASP:HB3	1:A:27:ASP:H	15	0.39
(2,131)	1:A:33:ASP:HB2	1:A:27:ASP:H	15	0.39
(2,131)	1:A:34:GLU:HB3	1:A:27:ASP:H	15	0.39
(2,13)	1:A:110:CYS:HB2	1:A:113:GLY:H	6	0.39
(2,13)	1:A:110:CYS:HB3	1:A:113:GLY:H	6	0.39
(2,13)	1:A:111:SER:HB2	1:A:113:GLY:H	6	0.39
(2,13)	1:A:111:SER:HB3	1:A:113:GLY:H	6	0.39

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,13)	1:A:113:GLY:HA2	1:A:113:GLY:H	6	0.39
(2,13)	1:A:113:GLY:HA3	1:A:113:GLY:H	6	0.39
(2,124)	1:A:43:THR:HG1	1:A:57:GLN:H	15	0.39
(2,124)	1:A:43:THR:HG1	1:A:57:GLN:H	15	0.39
(2,124)	1:A:43:THR:HG21	1:A:57:GLN:H	15	0.39
(2,124)	1:A:43:THR:HG21	1:A:57:GLN:H	15	0.39
(2,124)	1:A:43:THR:HG22	1:A:57:GLN:H	15	0.39
(2,124)	1:A:43:THR:HG22	1:A:57:GLN:H	15	0.39
(2,124)	1:A:43:THR:HG23	1:A:57:GLN:H	15	0.39
(2,124)	1:A:43:THR:HG23	1:A:57:GLN:H	15	0.39
(2,124)	1:A:56:THR:HG1	1:A:57:GLN:H	15	0.39
(2,124)	1:A:56:THR:HG21	1:A:57:GLN:H	15	0.39
(2,124)	1:A:56:THR:HG21	1:A:57:GLN:H	15	0.39
(2,124)	1:A:56:THR:HG22	1:A:57:GLN:H	15	0.39
(2,124)	1:A:56:THR:HG22	1:A:57:GLN:H	15	0.39
(2,124)	1:A:56:THR:HG23	1:A:57:GLN:H	15	0.39
(2,124)	1:A:56:THR:HG23	1:A:57:GLN:H	15	0.39
(2,116)	1:A:37:GLU:HB2	1:A:38:GLN:HE22	16	0.39
(2,116)	1:A:37:GLU:HB3	1:A:38:GLN:HE22	16	0.39
(2,116)	1:A:37:GLU:HB3	1:A:38:GLN:HE22	16	0.39
(2,116)	1:A:38:GLN:HB2	1:A:38:GLN:HE22	16	0.39
(2,116)	1:A:38:GLN:HB2	1:A:38:GLN:HE22	16	0.39
(2,116)	1:A:38:GLN:HB3	1:A:38:GLN:HE22	16	0.39
(1,93)	1:A:8:PHE:H	1:A:7:ASP:HA	9	0.39
(1,896)	1:A:64:ARG:H	1:A:66:ASP:H	13	0.39
(1,895)	1:A:77:GLU:HG2	1:A:66:ASP:H	15	0.39
(1,895)	1:A:77:GLU:HG3	1:A:66:ASP:H	15	0.39
(1,894)	1:A:66:ASP:H	1:A:77:GLU:HG2	15	0.39
(1,894)	1:A:66:ASP:H	1:A:77:GLU:HG3	15	0.39
(1,881)	1:A:48:GLU:H	1:A:45:ARG:H	15	0.39
(1,879)	1:A:48:GLU:H	1:A:45:ARG:H	15	0.39
(1,862)	1:A:21:LYS:HE2	1:A:19:ARG:H	2	0.39
(1,862)	1:A:21:LYS:HE3	1:A:19:ARG:H	2	0.39
(1,860)	1:A:16:VAL:HB	1:A:19:ARG:H	9	0.39
(1,859)	1:A:3:CYS:HB2	1:A:18:SER:H	2	0.39
(1,859)	1:A:3:CYS:HB3	1:A:18:SER:H	2	0.39
(1,853)	1:A:10:CYS:HB2	1:A:12:ASN:H	16	0.39
(1,853)	1:A:10:CYS:HB3	1:A:12:ASN:H	16	0.39
(1,831)	1:A:73:SER:H	1:A:75:GLU:H	10	0.39
(1,81)	1:A:28:CYS:HA	1:A:33:ASP:H	10	0.39
(1,807)	1:A:98:ILE:HG12	1:A:103:VAL:H	20	0.39
(1,807)	1:A:98:ILE:HG13	1:A:103:VAL:H	20	0.39

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,791)	1:A:85:CYS:HB2	1:A:89:GLU:H	7	0.39
(1,791)	1:A:85:CYS:HB3	1:A:89:GLU:H	7	0.39
(1,791)	1:A:85:CYS:HB2	1:A:89:GLU:H	9	0.39
(1,791)	1:A:85:CYS:HB3	1:A:89:GLU:H	9	0.39
(1,788)	1:A:80:CYS:H	1:A:78:GLU:H	14	0.39
(1,783)	1:A:71:CYS:HB2	1:A:74:GLY:H	3	0.39
(1,783)	1:A:71:CYS:HB3	1:A:74:GLY:H	3	0.39
(1,783)	1:A:71:CYS:HB2	1:A:74:GLY:H	9	0.39
(1,783)	1:A:71:CYS:HB3	1:A:74:GLY:H	9	0.39
(1,783)	1:A:71:CYS:HB2	1:A:74:GLY:H	10	0.39
(1,783)	1:A:71:CYS:HB3	1:A:74:GLY:H	10	0.39
(1,733)	1:A:32:SER:H	1:A:28:CYS:H	14	0.39
(1,733)	1:A:32:SER:H	1:A:28:CYS:H	15	0.39
(1,732)	1:A:31:GLY:HA2	1:A:32:SER:H	1	0.39
(1,732)	1:A:31:GLY:HA3	1:A:32:SER:H	1	0.39
(1,732)	1:A:31:GLY:HA2	1:A:32:SER:H	3	0.39
(1,732)	1:A:31:GLY:HA3	1:A:32:SER:H	3	0.39
(1,732)	1:A:31:GLY:HA2	1:A:32:SER:H	10	0.39
(1,732)	1:A:31:GLY:HA3	1:A:32:SER:H	10	0.39
(1,732)	1:A:31:GLY:HA2	1:A:32:SER:H	17	0.39
(1,732)	1:A:31:GLY:HA3	1:A:32:SER:H	17	0.39
(1,732)	1:A:31:GLY:HA2	1:A:32:SER:H	18	0.39
(1,732)	1:A:31:GLY:HA3	1:A:32:SER:H	18	0.39
(1,73)	1:A:65:CYS:HB2	1:A:65:CYS:H	2	0.39
(1,73)	1:A:65:CYS:HB3	1:A:65:CYS:H	2	0.39
(1,73)	1:A:65:CYS:HB2	1:A:65:CYS:H	4	0.39
(1,73)	1:A:65:CYS:HB3	1:A:65:CYS:H	4	0.39
(1,73)	1:A:65:CYS:HB2	1:A:65:CYS:H	9	0.39
(1,73)	1:A:65:CYS:HB3	1:A:65:CYS:H	9	0.39
(1,729)	1:A:32:SER:H	1:A:28:CYS:H	14	0.39
(1,729)	1:A:32:SER:H	1:A:28:CYS:H	15	0.39
(1,710)	1:A:8:PHE:H	1:A:21:LYS:HD2	4	0.39
(1,710)	1:A:8:PHE:H	1:A:21:LYS:HD3	4	0.39
(1,706)	1:A:45:ARG:HB2	1:A:45:ARG:H	2	0.39
(1,706)	1:A:45:ARG:HB3	1:A:45:ARG:H	2	0.39
(1,696)	1:A:44:CYS:HB2	1:A:34:GLU:H	13	0.39
(1,696)	1:A:44:CYS:HB3	1:A:34:GLU:H	13	0.39
(1,696)	1:A:44:CYS:HB2	1:A:34:GLU:H	18	0.39
(1,696)	1:A:44:CYS:HB3	1:A:34:GLU:H	18	0.39
(1,686)	1:A:74:GLY:H	1:A:69:ASN:HD22	2	0.39
(1,686)	1:A:74:GLY:H	1:A:69:ASN:HD22	8	0.39
(1,685)	1:A:107:GLN:HG2	1:A:107:GLN:HE21	16	0.39

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,685)	1:A:107:GLN:HG2	1:A:107:GLN:HE21	16	0.39
(1,685)	1:A:107:GLN:HG3	1:A:107:GLN:HE21	16	0.39
(1,685)	1:A:107:GLN:HG3	1:A:107:GLN:HE21	16	0.39
(1,685)	1:A:107:GLN:HG2	1:A:107:GLN:HE21	18	0.39
(1,685)	1:A:107:GLN:HG2	1:A:107:GLN:HE21	18	0.39
(1,685)	1:A:107:GLN:HG3	1:A:107:GLN:HE21	18	0.39
(1,685)	1:A:107:GLN:HG3	1:A:107:GLN:HE21	18	0.39
(1,643)	1:A:82:ASN:HB2	1:A:82:ASN:HD21	5	0.39
(1,643)	1:A:82:ASN:HB2	1:A:82:ASN:HD21	5	0.39
(1,643)	1:A:82:ASN:HB3	1:A:82:ASN:HD21	5	0.39
(1,643)	1:A:82:ASN:HB3	1:A:82:ASN:HD21	5	0.39
(1,643)	1:A:82:ASN:HB2	1:A:82:ASN:HD21	6	0.39
(1,643)	1:A:82:ASN:HB2	1:A:82:ASN:HD21	6	0.39
(1,643)	1:A:82:ASN:HB3	1:A:82:ASN:HD21	6	0.39
(1,643)	1:A:82:ASN:HB3	1:A:82:ASN:HD21	6	0.39
(1,643)	1:A:82:ASN:HB2	1:A:82:ASN:HD21	10	0.39
(1,643)	1:A:82:ASN:HB2	1:A:82:ASN:HD21	10	0.39
(1,643)	1:A:82:ASN:HB3	1:A:82:ASN:HD21	10	0.39
(1,643)	1:A:82:ASN:HB3	1:A:82:ASN:HD21	10	0.39
(1,643)	1:A:82:ASN:HB2	1:A:82:ASN:HD21	14	0.39
(1,643)	1:A:82:ASN:HB2	1:A:82:ASN:HD21	14	0.39
(1,643)	1:A:82:ASN:HB3	1:A:82:ASN:HD21	14	0.39
(1,643)	1:A:82:ASN:HB3	1:A:82:ASN:HD21	14	0.39
(1,642)	1:A:82:ASN:HA	1:A:82:ASN:HD22	1	0.39
(1,642)	1:A:82:ASN:HA	1:A:82:ASN:HD22	11	0.39
(1,608)	1:A:14:GLN:HG2	1:A:14:GLN:HE21	1	0.39
(1,608)	1:A:14:GLN:HG3	1:A:14:GLN:HE21	1	0.39
(1,596)	1:A:74:GLY:HA2	1:A:69:ASN:HD21	4	0.39
(1,596)	1:A:74:GLY:HA3	1:A:69:ASN:HD21	4	0.39
(1,596)	1:A:74:GLY:HA2	1:A:69:ASN:HD21	9	0.39
(1,596)	1:A:74:GLY:HA3	1:A:69:ASN:HD21	9	0.39
(1,534)	1:A:77:GLU:HB2	1:A:77:GLU:H	12	0.39
(1,534)	1:A:77:GLU:HB3	1:A:77:GLU:H	12	0.39
(1,526)	1:A:64:ARG:H	1:A:67:GLY:H	8	0.39
(1,526)	1:A:64:ARG:H	1:A:67:GLY:H	20	0.39
(1,517)	1:A:59:ILE:HG12	1:A:59:ILE:H	5	0.39
(1,517)	1:A:59:ILE:HG12	1:A:59:ILE:H	5	0.39
(1,517)	1:A:59:ILE:HG13	1:A:59:ILE:H	5	0.39
(1,517)	1:A:59:ILE:HG13	1:A:59:ILE:H	5	0.39
(1,517)	1:A:59:ILE:HG12	1:A:59:ILE:H	14	0.39
(1,517)	1:A:59:ILE:HG12	1:A:59:ILE:H	14	0.39
(1,517)	1:A:59:ILE:HG13	1:A:59:ILE:H	14	0.39

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,517)	1:A:59:ILE:HG13	1:A:59:ILE:H	14	0.39
(1,517)	1:A:59:ILE:HG12	1:A:59:ILE:H	19	0.39
(1,517)	1:A:59:ILE:HG12	1:A:59:ILE:H	19	0.39
(1,517)	1:A:59:ILE:HG13	1:A:59:ILE:H	19	0.39
(1,517)	1:A:59:ILE:HG13	1:A:59:ILE:H	19	0.39
(1,486)	1:A:7:ASP:HA	1:A:19:ARG:H	12	0.39
(1,463)	1:A:71:CYS:HB2	1:A:78:GLU:H	4	0.39
(1,463)	1:A:71:CYS:HB3	1:A:78:GLU:H	4	0.39
(1,431)	1:A:72:ASP:H	1:A:70:ASP:H	8	0.39
(1,398)	1:A:54:HIS:HB2	1:A:54:HIS:H	3	0.39
(1,398)	1:A:54:HIS:HB3	1:A:54:HIS:H	3	0.39
(1,398)	1:A:54:HIS:HB2	1:A:54:HIS:H	4	0.39
(1,398)	1:A:54:HIS:HB3	1:A:54:HIS:H	4	0.39
(1,398)	1:A:54:HIS:HB2	1:A:54:HIS:H	7	0.39
(1,398)	1:A:54:HIS:HB3	1:A:54:HIS:H	7	0.39
(1,398)	1:A:54:HIS:HB2	1:A:54:HIS:H	9	0.39
(1,398)	1:A:54:HIS:HB3	1:A:54:HIS:H	9	0.39
(1,398)	1:A:54:HIS:HB2	1:A:54:HIS:H	12	0.39
(1,398)	1:A:54:HIS:HB3	1:A:54:HIS:H	12	0.39
(1,398)	1:A:54:HIS:HB2	1:A:54:HIS:H	13	0.39
(1,398)	1:A:54:HIS:HB3	1:A:54:HIS:H	13	0.39
(1,398)	1:A:54:HIS:HB2	1:A:54:HIS:H	16	0.39
(1,398)	1:A:54:HIS:HB3	1:A:54:HIS:H	16	0.39
(1,376)	1:A:49:ILE:HA	1:A:49:ILE:H	19	0.39
(1,376)	1:A:49:ILE:HA	1:A:49:ILE:H	20	0.39
(1,375)	1:A:48:GLU:HA	1:A:49:ILE:H	1	0.39
(1,304)	1:A:14:GLN:HB2	1:A:12:ASN:H	17	0.39
(1,304)	1:A:14:GLN:HB2	1:A:12:ASN:H	17	0.39
(1,304)	1:A:14:GLN:HB3	1:A:12:ASN:H	17	0.39
(1,304)	1:A:14:GLN:HB3	1:A:12:ASN:H	17	0.39
(1,298)	1:A:14:GLN:H	1:A:11:ASN:H	4	0.39
(1,224)	1:A:92:CYS:HA	1:A:94:SER:H	12	0.39
(1,224)	1:A:92:CYS:HA	1:A:94:SER:H	14	0.39
(1,174)	1:A:103:VAL:H	1:A:101:ASN:HB2	17	0.39
(1,174)	1:A:103:VAL:H	1:A:101:ASN:HB3	17	0.39
(1,174)	1:A:103:VAL:H	1:A:101:ASN:HB2	19	0.39
(1,174)	1:A:103:VAL:H	1:A:101:ASN:HB3	19	0.39
(1,158)	1:A:104:CYS:HA	1:A:105:ASN:H	3	0.39
(1,158)	1:A:104:CYS:HA	1:A:105:ASN:H	4	0.39
(1,158)	1:A:104:CYS:HA	1:A:105:ASN:H	7	0.39
(1,140)	1:A:108:ASP:H	1:A:108:ASP:HB2	3	0.39
(1,140)	1:A:108:ASP:H	1:A:108:ASP:HB3	3	0.39

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,139)	1:A:109:ASP:H	1:A:109:ASP:HB2	1	0.39
(1,139)	1:A:109:ASP:H	1:A:109:ASP:HB3	1	0.39
(4,2)	1:A:90:PHE:O	1:A:98:ILE:H	7	0.38
(2,89)	1:A:107:GLN:HB2	1:A:108:ASP:H	2	0.38
(2,89)	1:A:107:GLN:HB3	1:A:108:ASP:H	2	0.38
(2,8)	1:A:24:GLY:HA2	1:A:46:ILE:H	16	0.38
(2,8)	1:A:24:GLY:HA3	1:A:46:ILE:H	16	0.38
(2,8)	1:A:45:ARG:HA	1:A:46:ILE:H	16	0.38
(2,76)	1:A:28:CYS:HB2	1:A:32:SER:H	7	0.38
(2,76)	1:A:28:CYS:HB3	1:A:32:SER:H	7	0.38
(2,76)	1:A:29:GLU:HA	1:A:32:SER:H	7	0.38
(2,76)	1:A:32:SER:HA	1:A:32:SER:H	7	0.38
(2,76)	1:A:32:SER:HB2	1:A:32:SER:H	7	0.38
(2,76)	1:A:32:SER:HB3	1:A:32:SER:H	7	0.38
(2,76)	1:A:33:ASP:HA	1:A:32:SER:H	7	0.38
(2,76)	1:A:35:SER:HB2	1:A:32:SER:H	7	0.38
(2,76)	1:A:35:SER:HB3	1:A:32:SER:H	7	0.38
(2,76)	1:A:28:CYS:HB2	1:A:32:SER:H	12	0.38
(2,76)	1:A:28:CYS:HB3	1:A:32:SER:H	12	0.38
(2,76)	1:A:29:GLU:HA	1:A:32:SER:H	12	0.38
(2,76)	1:A:32:SER:HA	1:A:32:SER:H	12	0.38
(2,76)	1:A:32:SER:HB2	1:A:32:SER:H	12	0.38
(2,76)	1:A:32:SER:HB3	1:A:32:SER:H	12	0.38
(2,76)	1:A:33:ASP:HA	1:A:32:SER:H	12	0.38
(2,76)	1:A:35:SER:HB2	1:A:32:SER:H	12	0.38
(2,76)	1:A:35:SER:HB3	1:A:32:SER:H	12	0.38
(2,64)	1:A:45:ARG:HB2	1:A:46:ILE:H	9	0.38
(2,64)	1:A:45:ARG:HB3	1:A:46:ILE:H	9	0.38
(2,64)	1:A:46:ILE:HG12	1:A:46:ILE:H	9	0.38
(2,64)	1:A:46:ILE:HG13	1:A:46:ILE:H	9	0.38
(2,64)	1:A:45:ARG:HB2	1:A:46:ILE:H	20	0.38
(2,64)	1:A:45:ARG:HB3	1:A:46:ILE:H	20	0.38
(2,64)	1:A:46:ILE:HG12	1:A:46:ILE:H	20	0.38
(2,64)	1:A:46:ILE:HG13	1:A:46:ILE:H	20	0.38
(2,377)	1:A:33:ASP:HB2	1:A:33:ASP:H	7	0.38
(2,377)	1:A:33:ASP:HB3	1:A:33:ASP:H	7	0.38
(2,377)	1:A:34:GLU:HB2	1:A:33:ASP:H	7	0.38
(2,377)	1:A:34:GLU:HB3	1:A:33:ASP:H	7	0.38
(2,377)	1:A:33:ASP:HB2	1:A:33:ASP:H	19	0.38
(2,377)	1:A:33:ASP:HB3	1:A:33:ASP:H	19	0.38
(2,377)	1:A:34:GLU:HB2	1:A:33:ASP:H	19	0.38
(2,377)	1:A:34:GLU:HB3	1:A:33:ASP:H	19	0.38

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,342)	1:A:17:PRO:HB2	1:A:20:TRP:HE1	4	0.38
(2,342)	1:A:17:PRO:HB3	1:A:20:TRP:HE1	4	0.38
(2,342)	1:A:19:ARG:HB2	1:A:20:TRP:HE1	4	0.38
(2,342)	1:A:19:ARG:HB3	1:A:20:TRP:HE1	4	0.38
(2,306)	1:A:71:CYS:HB2	1:A:77:GLU:H	5	0.38
(2,306)	1:A:71:CYS:HB3	1:A:77:GLU:H	5	0.38
(2,306)	1:A:80:CYS:HB2	1:A:77:GLU:H	5	0.38
(2,306)	1:A:80:CYS:HB3	1:A:77:GLU:H	5	0.38
(2,302)	1:A:114:SER:HG	1:A:120:ALA:H	18	0.38
(2,302)	1:A:119:CYS:HA	1:A:120:ALA:H	18	0.38
(2,266)	1:A:31:GLY:HA2	1:A:32:SER:H	8	0.38
(2,266)	1:A:31:GLY:HA3	1:A:32:SER:H	8	0.38
(2,266)	1:A:32:SER:HB2	1:A:32:SER:H	8	0.38
(2,266)	1:A:32:SER:HB3	1:A:32:SER:H	8	0.38
(2,25)	1:A:79:ASN:HD22	1:A:80:CYS:HA	17	0.38
(2,25)	1:A:86:SER:HA	1:A:80:CYS:HA	17	0.38
(2,239)	1:A:64:ARG:HB2	1:A:69:ASN:H	10	0.38
(2,239)	1:A:64:ARG:HB3	1:A:69:ASN:H	10	0.38
(2,239)	1:A:64:ARG:HG2	1:A:69:ASN:H	10	0.38
(2,239)	1:A:64:ARG:HG3	1:A:69:ASN:H	10	0.38
(2,239)	1:A:68:GLU:HB2	1:A:69:ASN:H	10	0.38
(2,239)	1:A:68:GLU:HB3	1:A:69:ASN:H	10	0.38
(2,239)	1:A:64:ARG:HB2	1:A:69:ASN:H	13	0.38
(2,239)	1:A:64:ARG:HB3	1:A:69:ASN:H	13	0.38
(2,239)	1:A:64:ARG:HG2	1:A:69:ASN:H	13	0.38
(2,239)	1:A:64:ARG:HG3	1:A:69:ASN:H	13	0.38
(2,239)	1:A:68:GLU:HB2	1:A:69:ASN:H	13	0.38
(2,239)	1:A:68:GLU:HB3	1:A:69:ASN:H	13	0.38
(2,228)	1:A:28:CYS:HB2	1:A:28:CYS:H	2	0.38
(2,228)	1:A:28:CYS:HB3	1:A:28:CYS:H	2	0.38
(2,228)	1:A:29:GLU:HA	1:A:28:CYS:H	2	0.38
(2,228)	1:A:32:SER:HA	1:A:28:CYS:H	2	0.38
(2,223)	1:A:45:ARG:HG2	1:A:45:ARG:H	9	0.38
(2,223)	1:A:45:ARG:HG3	1:A:45:ARG:H	9	0.38
(2,223)	1:A:46:ILE:HB	1:A:45:ARG:H	9	0.38
(2,212)	1:A:88:ASP:H	1:A:86:SER:H	20	0.38
(2,190)	1:A:55:SER:HA	1:A:57:GLN:H	1	0.38
(2,190)	1:A:56:THR:HA	1:A:57:GLN:H	1	0.38
(2,190)	1:A:55:SER:HA	1:A:57:GLN:H	2	0.38
(2,190)	1:A:56:THR:HA	1:A:57:GLN:H	2	0.38
(2,190)	1:A:55:SER:HA	1:A:57:GLN:H	17	0.38
(2,190)	1:A:56:THR:HA	1:A:57:GLN:H	17	0.38

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,180)	1:A:10:CYS:HA	1:A:11:ASN:HD21	13	0.38
(2,180)	1:A:11:ASN:HA	1:A:11:ASN:HD21	13	0.38
(2,180)	1:A:10:CYS:HA	1:A:11:ASN:HD21	19	0.38
(2,180)	1:A:11:ASN:HA	1:A:11:ASN:HD21	19	0.38
(2,177)	1:A:22:CYS:HB2	1:A:44:CYS:H	20	0.38
(2,177)	1:A:22:CYS:HB3	1:A:44:CYS:H	20	0.38
(2,177)	1:A:44:CYS:HB2	1:A:44:CYS:H	20	0.38
(2,177)	1:A:44:CYS:HB3	1:A:44:CYS:H	20	0.38
(2,160)	1:A:43:THR:HG1	1:A:43:THR:H	9	0.38
(2,160)	1:A:43:THR:HG1	1:A:43:THR:H	9	0.38
(2,160)	1:A:43:THR:HG21	1:A:43:THR:H	9	0.38
(2,160)	1:A:43:THR:HG21	1:A:43:THR:H	9	0.38
(2,160)	1:A:43:THR:HG22	1:A:43:THR:H	9	0.38
(2,160)	1:A:43:THR:HG22	1:A:43:THR:H	9	0.38
(2,160)	1:A:43:THR:HG23	1:A:43:THR:H	9	0.38
(2,160)	1:A:43:THR:HG23	1:A:43:THR:H	9	0.38
(2,160)	1:A:56:THR:HG1	1:A:43:THR:H	9	0.38
(2,160)	1:A:56:THR:HG21	1:A:43:THR:H	9	0.38
(2,160)	1:A:56:THR:HG22	1:A:43:THR:H	9	0.38
(2,160)	1:A:56:THR:HG23	1:A:43:THR:H	9	0.38
(2,131)	1:A:25:ASP:HB2	1:A:27:ASP:H	1	0.38
(2,131)	1:A:25:ASP:HB3	1:A:27:ASP:H	1	0.38
(2,131)	1:A:33:ASP:HB2	1:A:27:ASP:H	1	0.38
(2,131)	1:A:34:GLU:HB3	1:A:27:ASP:H	1	0.38
(2,124)	1:A:43:THR:HG1	1:A:57:GLN:H	5	0.38
(2,124)	1:A:43:THR:HG1	1:A:57:GLN:H	5	0.38
(2,124)	1:A:43:THR:HG21	1:A:57:GLN:H	5	0.38
(2,124)	1:A:43:THR:HG21	1:A:57:GLN:H	5	0.38
(2,124)	1:A:43:THR:HG22	1:A:57:GLN:H	5	0.38
(2,124)	1:A:43:THR:HG22	1:A:57:GLN:H	5	0.38
(2,124)	1:A:43:THR:HG23	1:A:57:GLN:H	5	0.38
(2,124)	1:A:43:THR:HG23	1:A:57:GLN:H	5	0.38
(2,124)	1:A:56:THR:HG1	1:A:57:GLN:H	5	0.38
(2,124)	1:A:56:THR:HG21	1:A:57:GLN:H	5	0.38
(2,124)	1:A:56:THR:HG21	1:A:57:GLN:H	5	0.38
(2,124)	1:A:56:THR:HG22	1:A:57:GLN:H	5	0.38
(2,124)	1:A:56:THR:HG22	1:A:57:GLN:H	5	0.38
(2,124)	1:A:56:THR:HG23	1:A:57:GLN:H	5	0.38
(2,124)	1:A:56:THR:HG23	1:A:57:GLN:H	5	0.38
(1,99)	1:A:98:ILE:HG12	1:A:99:SER:H	13	0.38
(1,99)	1:A:98:ILE:HG13	1:A:99:SER:H	13	0.38
(1,93)	1:A:8:PHE:H	1:A:7:ASP:HA	8	0.38

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,93)	1:A:8:PHE:H	1:A:7:ASP:HA	18	0.38
(1,911)	1:A:57:GLN:HE21	1:A:71:CYS:H	7	0.38
(1,896)	1:A:64:ARG:H	1:A:66:ASP:H	1	0.38
(1,881)	1:A:48:GLU:H	1:A:45:ARG:H	14	0.38
(1,879)	1:A:48:GLU:H	1:A:45:ARG:H	14	0.38
(1,856)	1:A:14:GLN:H	1:A:12:ASN:HD22	13	0.38
(1,853)	1:A:10:CYS:HB2	1:A:12:ASN:H	12	0.38
(1,853)	1:A:10:CYS:HB3	1:A:12:ASN:H	12	0.38
(1,853)	1:A:10:CYS:HB2	1:A:12:ASN:H	13	0.38
(1,853)	1:A:10:CYS:HB3	1:A:12:ASN:H	13	0.38
(1,85)	1:A:21:LYS:HG2	1:A:22:CYS:H	5	0.38
(1,85)	1:A:21:LYS:HG3	1:A:22:CYS:H	5	0.38
(1,849)	1:A:33:ASP:H	1:A:11:ASN:H	18	0.38
(1,831)	1:A:73:SER:H	1:A:75:GLU:H	9	0.38
(1,831)	1:A:73:SER:H	1:A:75:GLU:H	20	0.38
(1,81)	1:A:28:CYS:HA	1:A:33:ASP:H	2	0.38
(1,81)	1:A:28:CYS:HA	1:A:33:ASP:H	16	0.38
(1,806)	1:A:101:ASN:HD21	1:A:102:PHE:H	5	0.38
(1,806)	1:A:101:ASN:HD21	1:A:102:PHE:H	17	0.38
(1,803)	1:A:101:ASN:HD21	1:A:99:SER:H	3	0.38
(1,794)	1:A:82:ASN:HD22	1:A:94:SER:H	1	0.38
(1,794)	1:A:82:ASN:HD22	1:A:94:SER:H	12	0.38
(1,789)	1:A:85:CYS:H	1:A:84:THR:HB	7	0.38
(1,784)	1:A:71:CYS:HB2	1:A:76:ASP:H	10	0.38
(1,784)	1:A:71:CYS:HB3	1:A:76:ASP:H	10	0.38
(1,777)	1:A:77:GLU:HB2	1:A:70:ASP:H	4	0.38
(1,777)	1:A:77:GLU:HB3	1:A:70:ASP:H	4	0.38
(1,772)	1:A:68:GLU:H	1:A:64:ARG:H	16	0.38
(1,770)	1:A:63:TRP:H	1:A:77:GLU:HG2	1	0.38
(1,770)	1:A:63:TRP:H	1:A:77:GLU:HG3	1	0.38
(1,766)	1:A:48:GLU:HB2	1:A:58:CYS:H	17	0.38
(1,766)	1:A:48:GLU:HB3	1:A:58:CYS:H	17	0.38
(1,756)	1:A:57:GLN:HB2	1:A:57:GLN:HE21	16	0.38
(1,756)	1:A:57:GLN:HB2	1:A:57:GLN:HE21	16	0.38
(1,756)	1:A:57:GLN:HB3	1:A:57:GLN:HE21	16	0.38
(1,756)	1:A:57:GLN:HB3	1:A:57:GLN:HE21	16	0.38
(1,745)	1:A:48:GLU:HB2	1:A:49:ILE:H	8	0.38
(1,745)	1:A:48:GLU:HB3	1:A:49:ILE:H	8	0.38
(1,735)	1:A:28:CYS:HB2	1:A:33:ASP:H	10	0.38
(1,735)	1:A:28:CYS:HB3	1:A:33:ASP:H	10	0.38
(1,735)	1:A:28:CYS:HB2	1:A:33:ASP:H	16	0.38
(1,735)	1:A:28:CYS:HB3	1:A:33:ASP:H	16	0.38

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,733)	1:A:32:SER:H	1:A:28:CYS:H	4	0.38
(1,732)	1:A:31:GLY:HA2	1:A:32:SER:H	14	0.38
(1,732)	1:A:31:GLY:HA3	1:A:32:SER:H	14	0.38
(1,732)	1:A:31:GLY:HA2	1:A:32:SER:H	19	0.38
(1,732)	1:A:31:GLY:HA3	1:A:32:SER:H	19	0.38
(1,729)	1:A:32:SER:H	1:A:28:CYS:H	4	0.38
(1,706)	1:A:45:ARG:HB2	1:A:45:ARG:H	1	0.38
(1,706)	1:A:45:ARG:HB3	1:A:45:ARG:H	1	0.38
(1,706)	1:A:45:ARG:HB2	1:A:45:ARG:H	4	0.38
(1,706)	1:A:45:ARG:HB3	1:A:45:ARG:H	4	0.38
(1,706)	1:A:45:ARG:HB2	1:A:45:ARG:H	7	0.38
(1,706)	1:A:45:ARG:HB3	1:A:45:ARG:H	7	0.38
(1,706)	1:A:45:ARG:HB2	1:A:45:ARG:H	13	0.38
(1,706)	1:A:45:ARG:HB3	1:A:45:ARG:H	13	0.38
(1,706)	1:A:45:ARG:HB2	1:A:45:ARG:H	14	0.38
(1,706)	1:A:45:ARG:HB3	1:A:45:ARG:H	14	0.38
(1,688)	1:A:69:ASN:H	1:A:69:ASN:HD22	2	0.38
(1,685)	1:A:107:GLN:HG2	1:A:107:GLN:HE21	3	0.38
(1,685)	1:A:107:GLN:HG2	1:A:107:GLN:HE21	3	0.38
(1,685)	1:A:107:GLN:HG3	1:A:107:GLN:HE21	3	0.38
(1,685)	1:A:107:GLN:HG3	1:A:107:GLN:HE21	3	0.38
(1,685)	1:A:107:GLN:HG2	1:A:107:GLN:HE21	6	0.38
(1,685)	1:A:107:GLN:HG2	1:A:107:GLN:HE21	6	0.38
(1,685)	1:A:107:GLN:HG3	1:A:107:GLN:HE21	6	0.38
(1,685)	1:A:107:GLN:HG3	1:A:107:GLN:HE21	6	0.38
(1,685)	1:A:107:GLN:HG2	1:A:107:GLN:HE21	7	0.38
(1,685)	1:A:107:GLN:HG2	1:A:107:GLN:HE21	7	0.38
(1,685)	1:A:107:GLN:HG3	1:A:107:GLN:HE21	7	0.38
(1,685)	1:A:107:GLN:HG3	1:A:107:GLN:HE21	7	0.38
(1,681)	1:A:79:ASN:HD21	1:A:87:PRO:HD2	1	0.38
(1,681)	1:A:79:ASN:HD21	1:A:87:PRO:HD3	1	0.38
(1,66)	1:A:23:ASP:H	1:A:24:GLY:H	3	0.38
(1,66)	1:A:23:ASP:H	1:A:24:GLY:H	4	0.38
(1,643)	1:A:82:ASN:HB2	1:A:82:ASN:HD21	3	0.38
(1,643)	1:A:82:ASN:HB2	1:A:82:ASN:HD21	3	0.38
(1,643)	1:A:82:ASN:HB3	1:A:82:ASN:HD21	3	0.38
(1,643)	1:A:82:ASN:HB3	1:A:82:ASN:HD21	3	0.38
(1,642)	1:A:82:ASN:HA	1:A:82:ASN:HD22	2	0.38
(1,642)	1:A:82:ASN:HA	1:A:82:ASN:HD22	3	0.38
(1,642)	1:A:82:ASN:HA	1:A:82:ASN:HD22	5	0.38
(1,642)	1:A:82:ASN:HA	1:A:82:ASN:HD22	12	0.38
(1,626)	1:A:71:CYS:HA	1:A:57:GLN:HE22	8	0.38

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,608)	1:A:14:GLN:HG2	1:A:14:GLN:HE21	2	0.38
(1,608)	1:A:14:GLN:HG3	1:A:14:GLN:HE21	2	0.38
(1,598)	1:A:74:GLY:HA2	1:A:69:ASN:HD22	2	0.38
(1,598)	1:A:74:GLY:HA3	1:A:69:ASN:HD22	2	0.38
(1,597)	1:A:74:GLY:HA2	1:A:69:ASN:HD22	2	0.38
(1,597)	1:A:74:GLY:HA3	1:A:69:ASN:HD22	2	0.38
(1,592)	1:A:74:GLY:HA2	1:A:69:ASN:HD21	10	0.38
(1,592)	1:A:74:GLY:HA3	1:A:69:ASN:HD21	10	0.38
(1,582)	1:A:46:ILE:H	1:A:45:ARG:H	15	0.38
(1,526)	1:A:64:ARG:H	1:A:67:GLY:H	11	0.38
(1,509)	1:A:46:ILE:HA	1:A:46:ILE:H	10	0.38
(1,486)	1:A:7:ASP:HA	1:A:19:ARG:H	7	0.38
(1,486)	1:A:7:ASP:HA	1:A:19:ARG:H	18	0.38
(1,459)	1:A:70:ASP:HA	1:A:76:ASP:H	14	0.38
(1,436)	1:A:73:SER:H	1:A:72:ASP:H	6	0.38
(1,398)	1:A:54:HIS:HB2	1:A:54:HIS:H	2	0.38
(1,398)	1:A:54:HIS:HB3	1:A:54:HIS:H	2	0.38
(1,398)	1:A:54:HIS:HB2	1:A:54:HIS:H	11	0.38
(1,398)	1:A:54:HIS:HB3	1:A:54:HIS:H	11	0.38
(1,398)	1:A:54:HIS:HB2	1:A:54:HIS:H	14	0.38
(1,398)	1:A:54:HIS:HB3	1:A:54:HIS:H	14	0.38
(1,398)	1:A:54:HIS:HB2	1:A:54:HIS:H	15	0.38
(1,398)	1:A:54:HIS:HB3	1:A:54:HIS:H	15	0.38
(1,376)	1:A:49:ILE:HA	1:A:49:ILE:H	9	0.38
(1,376)	1:A:49:ILE:HA	1:A:49:ILE:H	13	0.38
(1,376)	1:A:49:ILE:HA	1:A:49:ILE:H	16	0.38
(1,351)	1:A:32:SER:H	1:A:33:ASP:H	15	0.38
(1,349)	1:A:32:SER:H	1:A:33:ASP:H	15	0.38
(1,327)	1:A:22:CYS:HB2	1:A:22:CYS:H	8	0.38
(1,327)	1:A:22:CYS:HB3	1:A:22:CYS:H	8	0.38
(1,327)	1:A:22:CYS:HB2	1:A:22:CYS:H	9	0.38
(1,327)	1:A:22:CYS:HB3	1:A:22:CYS:H	9	0.38
(1,323)	1:A:64:ARG:H	1:A:80:CYS:HB2	7	0.38
(1,323)	1:A:64:ARG:H	1:A:80:CYS:HB3	7	0.38
(1,298)	1:A:14:GLN:H	1:A:11:ASN:H	10	0.38
(1,224)	1:A:92:CYS:HA	1:A:94:SER:H	7	0.38
(1,158)	1:A:104:CYS:HA	1:A:105:ASN:H	5	0.38
(1,158)	1:A:104:CYS:HA	1:A:105:ASN:H	17	0.38
(1,118)	1:A:115:ASP:H	1:A:113:GLY:H	19	0.38
(4,8)	1:A:8:PHE:O	1:A:16:VAL:H	17	0.37
(4,2)	1:A:90:PHE:O	1:A:98:ILE:H	20	0.37
(2,8)	1:A:24:GLY:HA2	1:A:46:ILE:H	13	0.37

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,8)	1:A:24:GLY:HA3	1:A:46:ILE:H	13	0.37
(2,8)	1:A:45:ARG:HA	1:A:46:ILE:H	13	0.37
(2,8)	1:A:24:GLY:HA2	1:A:46:ILE:H	17	0.37
(2,8)	1:A:24:GLY:HA3	1:A:46:ILE:H	17	0.37
(2,8)	1:A:45:ARG:HA	1:A:46:ILE:H	17	0.37
(2,76)	1:A:28:CYS:HB2	1:A:32:SER:H	19	0.37
(2,76)	1:A:28:CYS:HB3	1:A:32:SER:H	19	0.37
(2,76)	1:A:29:GLU:HA	1:A:32:SER:H	19	0.37
(2,76)	1:A:32:SER:HA	1:A:32:SER:H	19	0.37
(2,76)	1:A:32:SER:HB2	1:A:32:SER:H	19	0.37
(2,76)	1:A:32:SER:HB3	1:A:32:SER:H	19	0.37
(2,76)	1:A:33:ASP:HA	1:A:32:SER:H	19	0.37
(2,76)	1:A:35:SER:HB2	1:A:32:SER:H	19	0.37
(2,76)	1:A:35:SER:HB3	1:A:32:SER:H	19	0.37
(2,54)	1:A:17:PRO:HB2	1:A:18:SER:H	2	0.37
(2,54)	1:A:17:PRO:HB3	1:A:18:SER:H	2	0.37
(2,54)	1:A:17:PRO:HG2	1:A:18:SER:H	2	0.37
(2,54)	1:A:17:PRO:HG3	1:A:18:SER:H	2	0.37
(2,377)	1:A:33:ASP:HB2	1:A:33:ASP:H	10	0.37
(2,377)	1:A:33:ASP:HB3	1:A:33:ASP:H	10	0.37
(2,377)	1:A:34:GLU:HB2	1:A:33:ASP:H	10	0.37
(2,377)	1:A:34:GLU:HB3	1:A:33:ASP:H	10	0.37
(2,359)	1:A:83:ILE:HD11	1:A:98:ILE:H	19	0.37
(2,359)	1:A:83:ILE:HD12	1:A:98:ILE:H	19	0.37
(2,359)	1:A:83:ILE:HD13	1:A:98:ILE:H	19	0.37
(2,359)	1:A:98:ILE:HD11	1:A:98:ILE:H	19	0.37
(2,359)	1:A:98:ILE:HD12	1:A:98:ILE:H	19	0.37
(2,359)	1:A:98:ILE:HD13	1:A:98:ILE:H	19	0.37
(2,342)	1:A:17:PRO:HB2	1:A:20:TRP:HE1	14	0.37
(2,342)	1:A:17:PRO:HB3	1:A:20:TRP:HE1	14	0.37
(2,342)	1:A:19:ARG:HB2	1:A:20:TRP:HE1	14	0.37
(2,342)	1:A:19:ARG:HB3	1:A:20:TRP:HE1	14	0.37
(2,341)	1:A:78:GLU:HG2	1:A:78:GLU:H	16	0.37
(2,341)	1:A:78:GLU:HG3	1:A:78:GLU:H	16	0.37
(2,341)	1:A:87:PRO:HB2	1:A:78:GLU:H	16	0.37
(2,341)	1:A:87:PRO:HB3	1:A:78:GLU:H	16	0.37
(2,3)	1:A:49:ILE:HD11	1:A:49:ILE:H	18	0.37
(2,3)	1:A:49:ILE:HD12	1:A:49:ILE:H	18	0.37
(2,3)	1:A:49:ILE:HD13	1:A:49:ILE:H	18	0.37
(2,3)	1:A:49:ILE:HG12	1:A:49:ILE:H	18	0.37
(2,3)	1:A:49:ILE:HG13	1:A:49:ILE:H	18	0.37
(2,3)	1:A:49:ILE:HG21	1:A:49:ILE:H	18	0.37

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,3)	1:A:49:ILE:HG22	1:A:49:ILE:H	18	0.37
(2,3)	1:A:49:ILE:HG23	1:A:49:ILE:H	18	0.37
(2,3)	1:A:59:ILE:HD11	1:A:49:ILE:H	18	0.37
(2,3)	1:A:59:ILE:HD12	1:A:49:ILE:H	18	0.37
(2,3)	1:A:59:ILE:HD13	1:A:49:ILE:H	18	0.37
(2,3)	1:A:59:ILE:HG21	1:A:49:ILE:H	18	0.37
(2,3)	1:A:59:ILE:HG22	1:A:49:ILE:H	18	0.37
(2,3)	1:A:59:ILE:HG23	1:A:49:ILE:H	18	0.37
(2,3)	1:A:61:VAL:HG11	1:A:49:ILE:H	18	0.37
(2,3)	1:A:61:VAL:HG12	1:A:49:ILE:H	18	0.37
(2,3)	1:A:61:VAL:HG13	1:A:49:ILE:H	18	0.37
(2,3)	1:A:61:VAL:HG21	1:A:49:ILE:H	18	0.37
(2,3)	1:A:61:VAL:HG21	1:A:49:ILE:H	18	0.37
(2,3)	1:A:61:VAL:HG22	1:A:49:ILE:H	18	0.37
(2,3)	1:A:61:VAL:HG22	1:A:49:ILE:H	18	0.37
(2,3)	1:A:61:VAL:HG23	1:A:49:ILE:H	18	0.37
(2,3)	1:A:61:VAL:HG23	1:A:49:ILE:H	18	0.37
(2,25)	1:A:79:ASN:HD22	1:A:80:CYS:HA	10	0.37
(2,25)	1:A:86:SER:HA	1:A:80:CYS:HA	10	0.37
(2,228)	1:A:28:CYS:HB2	1:A:28:CYS:H	1	0.37
(2,228)	1:A:28:CYS:HB3	1:A:28:CYS:H	1	0.37
(2,228)	1:A:29:GLU:HA	1:A:28:CYS:H	1	0.37
(2,228)	1:A:32:SER:HA	1:A:28:CYS:H	1	0.37
(2,216)	1:A:49:ILE:HD11	1:A:50:SER:H	3	0.37
(2,216)	1:A:49:ILE:HD12	1:A:50:SER:H	3	0.37
(2,216)	1:A:49:ILE:HD13	1:A:50:SER:H	3	0.37
(2,216)	1:A:49:ILE:HG12	1:A:50:SER:H	3	0.37
(2,216)	1:A:49:ILE:HG13	1:A:50:SER:H	3	0.37
(2,216)	1:A:49:ILE:HG21	1:A:50:SER:H	3	0.37
(2,216)	1:A:49:ILE:HG22	1:A:50:SER:H	3	0.37
(2,216)	1:A:49:ILE:HG23	1:A:50:SER:H	3	0.37
(2,212)	1:A:88:ASP:H	1:A:86:SER:H	14	0.37
(2,202)	1:A:22:CYS:HA	1:A:23:ASP:H	10	0.37
(2,202)	1:A:23:ASP:HA	1:A:23:ASP:H	10	0.37
(2,190)	1:A:55:SER:HA	1:A:57:GLN:H	5	0.37
(2,190)	1:A:56:THR:HA	1:A:57:GLN:H	5	0.37
(2,180)	1:A:10:CYS:HA	1:A:11:ASN:HD21	7	0.37
(2,180)	1:A:11:ASN:HA	1:A:11:ASN:HD21	7	0.37
(2,18)	1:A:111:SER:HA	1:A:113:GLY:H	9	0.37
(2,18)	1:A:113:GLY:HA2	1:A:113:GLY:H	9	0.37
(2,18)	1:A:113:GLY:HA3	1:A:113:GLY:H	9	0.37
(2,160)	1:A:43:THR:HG1	1:A:43:THR:H	20	0.37

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,160)	1:A:43:THR:HG1	1:A:43:THR:H	20	0.37
(2,160)	1:A:43:THR:HG21	1:A:43:THR:H	20	0.37
(2,160)	1:A:43:THR:HG21	1:A:43:THR:H	20	0.37
(2,160)	1:A:43:THR:HG22	1:A:43:THR:H	20	0.37
(2,160)	1:A:43:THR:HG22	1:A:43:THR:H	20	0.37
(2,160)	1:A:43:THR:HG23	1:A:43:THR:H	20	0.37
(2,160)	1:A:43:THR:HG23	1:A:43:THR:H	20	0.37
(2,160)	1:A:56:THR:HG1	1:A:43:THR:H	20	0.37
(2,160)	1:A:56:THR:HG21	1:A:43:THR:H	20	0.37
(2,160)	1:A:56:THR:HG22	1:A:43:THR:H	20	0.37
(2,160)	1:A:56:THR:HG23	1:A:43:THR:H	20	0.37
(2,137)	1:A:116:GLU:HB2	1:A:117:LEU:H	3	0.37
(2,137)	1:A:116:GLU:HB3	1:A:117:LEU:H	3	0.37
(2,137)	1:A:117:LEU:HB2	1:A:117:LEU:H	3	0.37
(2,137)	1:A:117:LEU:HB3	1:A:117:LEU:H	3	0.37
(2,131)	1:A:25:ASP:HB2	1:A:27:ASP:H	12	0.37
(2,131)	1:A:25:ASP:HB3	1:A:27:ASP:H	12	0.37
(2,131)	1:A:33:ASP:HB2	1:A:27:ASP:H	12	0.37
(2,131)	1:A:34:GLU:HB3	1:A:27:ASP:H	12	0.37
(2,13)	1:A:110:CYS:HB2	1:A:113:GLY:H	9	0.37
(2,13)	1:A:110:CYS:HB3	1:A:113:GLY:H	9	0.37
(2,13)	1:A:111:SER:HB2	1:A:113:GLY:H	9	0.37
(2,13)	1:A:111:SER:HB3	1:A:113:GLY:H	9	0.37
(2,13)	1:A:113:GLY:HA2	1:A:113:GLY:H	9	0.37
(2,13)	1:A:113:GLY:HA3	1:A:113:GLY:H	9	0.37
(2,116)	1:A:37:GLU:HB2	1:A:38:GLN:HE22	11	0.37
(2,116)	1:A:37:GLU:HB3	1:A:38:GLN:HE22	11	0.37
(2,116)	1:A:37:GLU:HB3	1:A:38:GLN:HE22	11	0.37
(2,116)	1:A:38:GLN:HB2	1:A:38:GLN:HE22	11	0.37
(2,116)	1:A:38:GLN:HB2	1:A:38:GLN:HE22	11	0.37
(2,116)	1:A:38:GLN:HB3	1:A:38:GLN:HE22	11	0.37
(2,116)	1:A:37:GLU:HB2	1:A:38:GLN:HE22	19	0.37
(2,116)	1:A:37:GLU:HB3	1:A:38:GLN:HE22	19	0.37
(2,116)	1:A:37:GLU:HB3	1:A:38:GLN:HE22	19	0.37
(2,116)	1:A:38:GLN:HB2	1:A:38:GLN:HE22	19	0.37
(2,116)	1:A:38:GLN:HB2	1:A:38:GLN:HE22	19	0.37
(2,116)	1:A:38:GLN:HB3	1:A:38:GLN:HE22	19	0.37
(2,11)	1:A:108:ASP:HA	1:A:113:GLY:H	13	0.37
(2,11)	1:A:109:ASP:HA	1:A:113:GLY:H	13	0.37
(2,11)	1:A:110:CYS:HA	1:A:113:GLY:H	13	0.37
(2,11)	1:A:114:SER:HG	1:A:113:GLY:H	13	0.37
(1,97)	1:A:98:ILE:HD11	1:A:99:SER:H	8	0.37

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,97)	1:A:98:ILE:HD12	1:A:99:SER:H	8	0.37
(1,97)	1:A:98:ILE:HD13	1:A:99:SER:H	8	0.37
(1,93)	1:A:8:PHE:H	1:A:7:ASP:HA	3	0.37
(1,93)	1:A:8:PHE:H	1:A:7:ASP:HA	7	0.37
(1,916)	1:A:77:GLU:HB2	1:A:77:GLU:H	4	0.37
(1,916)	1:A:77:GLU:HB3	1:A:77:GLU:H	4	0.37
(1,916)	1:A:77:GLU:HB2	1:A:77:GLU:H	10	0.37
(1,916)	1:A:77:GLU:HB3	1:A:77:GLU:H	10	0.37
(1,916)	1:A:77:GLU:HB2	1:A:77:GLU:H	18	0.37
(1,916)	1:A:77:GLU:HB3	1:A:77:GLU:H	18	0.37
(1,898)	1:A:57:GLN:HE22	1:A:71:CYS:H	20	0.37
(1,871)	1:A:30:ASP:HB2	1:A:32:SER:H	15	0.37
(1,871)	1:A:30:ASP:HB3	1:A:32:SER:H	15	0.37
(1,862)	1:A:21:LYS:HE2	1:A:19:ARG:H	19	0.37
(1,862)	1:A:21:LYS:HE3	1:A:19:ARG:H	19	0.37
(1,859)	1:A:3:CYS:HB2	1:A:18:SER:H	9	0.37
(1,859)	1:A:3:CYS:HB3	1:A:18:SER:H	9	0.37
(1,856)	1:A:14:GLN:H	1:A:12:ASN:HD22	10	0.37
(1,856)	1:A:14:GLN:H	1:A:12:ASN:HD22	20	0.37
(1,849)	1:A:33:ASP:H	1:A:11:ASN:H	7	0.37
(1,831)	1:A:73:SER:H	1:A:75:GLU:H	1	0.37
(1,81)	1:A:28:CYS:HA	1:A:33:ASP:H	3	0.37
(1,808)	1:A:116:GLU:HB2	1:A:104:CYS:H	20	0.37
(1,808)	1:A:116:GLU:HB3	1:A:104:CYS:H	20	0.37
(1,801)	1:A:102:PHE:HB2	1:A:98:ILE:H	19	0.37
(1,801)	1:A:102:PHE:HB3	1:A:98:ILE:H	19	0.37
(1,796)	1:A:96:ARG:H	1:A:83:ILE:HG21	5	0.37
(1,796)	1:A:96:ARG:H	1:A:83:ILE:HG22	5	0.37
(1,796)	1:A:96:ARG:H	1:A:83:ILE:HG23	5	0.37
(1,794)	1:A:82:ASN:HD22	1:A:94:SER:H	19	0.37
(1,791)	1:A:85:CYS:HB2	1:A:89:GLU:H	5	0.37
(1,791)	1:A:85:CYS:HB3	1:A:89:GLU:H	5	0.37
(1,789)	1:A:85:CYS:H	1:A:84:THR:HB	19	0.37
(1,783)	1:A:71:CYS:HB2	1:A:74:GLY:H	18	0.37
(1,783)	1:A:71:CYS:HB3	1:A:74:GLY:H	18	0.37
(1,772)	1:A:68:GLU:H	1:A:64:ARG:H	3	0.37
(1,766)	1:A:48:GLU:HB2	1:A:58:CYS:H	7	0.37
(1,766)	1:A:48:GLU:HB3	1:A:58:CYS:H	7	0.37
(1,759)	1:A:57:GLN:HE21	1:A:71:CYS:HA	4	0.37
(1,756)	1:A:57:GLN:HB2	1:A:57:GLN:HE21	9	0.37
(1,756)	1:A:57:GLN:HB2	1:A:57:GLN:HE21	9	0.37
(1,756)	1:A:57:GLN:HB3	1:A:57:GLN:HE21	9	0.37

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,756)	1:A:57:GLN:HB3	1:A:57:GLN:HE21	9	0.37
(1,745)	1:A:48:GLU:HB2	1:A:49:ILE:H	5	0.37
(1,745)	1:A:48:GLU:HB3	1:A:49:ILE:H	5	0.37
(1,744)	1:A:48:GLU:H	1:A:47:HIS:H	1	0.37
(1,733)	1:A:32:SER:H	1:A:28:CYS:H	10	0.37
(1,729)	1:A:32:SER:H	1:A:28:CYS:H	10	0.37
(1,711)	1:A:10:CYS:HB2	1:A:11:ASN:H	6	0.37
(1,711)	1:A:10:CYS:HB3	1:A:11:ASN:H	6	0.37
(1,708)	1:A:44:CYS:HB2	1:A:45:ARG:H	3	0.37
(1,708)	1:A:44:CYS:HB3	1:A:45:ARG:H	3	0.37
(1,706)	1:A:45:ARG:HB2	1:A:45:ARG:H	8	0.37
(1,706)	1:A:45:ARG:HB3	1:A:45:ARG:H	8	0.37
(1,693)	1:A:21:LYS:HD2	1:A:21:LYS:H	4	0.37
(1,693)	1:A:21:LYS:HD3	1:A:21:LYS:H	4	0.37
(1,690)	1:A:61:VAL:HG11	1:A:49:ILE:H	9	0.37
(1,690)	1:A:61:VAL:HG12	1:A:49:ILE:H	9	0.37
(1,690)	1:A:61:VAL:HG13	1:A:49:ILE:H	9	0.37
(1,690)	1:A:61:VAL:HG21	1:A:49:ILE:H	9	0.37
(1,690)	1:A:61:VAL:HG22	1:A:49:ILE:H	9	0.37
(1,690)	1:A:61:VAL:HG23	1:A:49:ILE:H	9	0.37
(1,681)	1:A:79:ASN:HD21	1:A:87:PRO:HD2	12	0.37
(1,681)	1:A:79:ASN:HD21	1:A:87:PRO:HD3	12	0.37
(1,66)	1:A:23:ASP:H	1:A:24:GLY:H	14	0.37
(1,657)	1:A:105:ASN:HA	1:A:105:ASN:HD22	14	0.37
(1,654)	1:A:107:GLN:HB2	1:A:107:GLN:HE22	9	0.37
(1,654)	1:A:107:GLN:HB2	1:A:107:GLN:HE22	9	0.37
(1,654)	1:A:107:GLN:HB3	1:A:107:GLN:HE22	9	0.37
(1,654)	1:A:107:GLN:HB3	1:A:107:GLN:HE22	9	0.37
(1,642)	1:A:82:ASN:HA	1:A:82:ASN:HD22	15	0.37
(1,636)	1:A:78:GLU:HB2	1:A:79:ASN:HD22	8	0.37
(1,636)	1:A:78:GLU:HB2	1:A:79:ASN:HD22	8	0.37
(1,636)	1:A:78:GLU:HB3	1:A:79:ASN:HD22	8	0.37
(1,636)	1:A:78:GLU:HB3	1:A:79:ASN:HD22	8	0.37
(1,627)	1:A:72:ASP:HA	1:A:57:GLN:HE22	8	0.37
(1,608)	1:A:14:GLN:HG2	1:A:14:GLN:HE21	5	0.37
(1,608)	1:A:14:GLN:HG3	1:A:14:GLN:HE21	5	0.37
(1,608)	1:A:14:GLN:HG2	1:A:14:GLN:HE21	17	0.37
(1,608)	1:A:14:GLN:HG3	1:A:14:GLN:HE21	17	0.37
(1,592)	1:A:74:GLY:HA2	1:A:69:ASN:HD21	6	0.37
(1,592)	1:A:74:GLY:HA3	1:A:69:ASN:HD21	6	0.37
(1,585)	1:A:28:CYS:H	1:A:27:ASP:H	11	0.37
(1,585)	1:A:28:CYS:H	1:A:27:ASP:H	19	0.37

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,569)	1:A:85:CYS:H	1:A:84:THR:H	17	0.37
(1,555)	1:A:103:VAL:HG11	1:A:104:CYS:H	10	0.37
(1,555)	1:A:103:VAL:HG12	1:A:104:CYS:H	10	0.37
(1,555)	1:A:103:VAL:HG13	1:A:104:CYS:H	10	0.37
(1,555)	1:A:103:VAL:HG21	1:A:104:CYS:H	10	0.37
(1,555)	1:A:103:VAL:HG22	1:A:104:CYS:H	10	0.37
(1,555)	1:A:103:VAL:HG23	1:A:104:CYS:H	10	0.37
(1,555)	1:A:103:VAL:HG11	1:A:104:CYS:H	19	0.37
(1,555)	1:A:103:VAL:HG12	1:A:104:CYS:H	19	0.37
(1,555)	1:A:103:VAL:HG13	1:A:104:CYS:H	19	0.37
(1,555)	1:A:103:VAL:HG21	1:A:104:CYS:H	19	0.37
(1,555)	1:A:103:VAL:HG22	1:A:104:CYS:H	19	0.37
(1,555)	1:A:103:VAL:HG23	1:A:104:CYS:H	19	0.37
(1,49)	1:A:94:SER:H	1:A:93:SER:H	16	0.37
(1,486)	1:A:7:ASP:HA	1:A:19:ARG:H	3	0.37
(1,486)	1:A:7:ASP:HA	1:A:19:ARG:H	4	0.37
(1,398)	1:A:54:HIS:HB2	1:A:54:HIS:H	5	0.37
(1,398)	1:A:54:HIS:HB3	1:A:54:HIS:H	5	0.37
(1,398)	1:A:54:HIS:HB2	1:A:54:HIS:H	8	0.37
(1,398)	1:A:54:HIS:HB3	1:A:54:HIS:H	8	0.37
(1,398)	1:A:54:HIS:HB2	1:A:54:HIS:H	10	0.37
(1,398)	1:A:54:HIS:HB3	1:A:54:HIS:H	10	0.37
(1,376)	1:A:49:ILE:HA	1:A:49:ILE:H	2	0.37
(1,376)	1:A:49:ILE:HA	1:A:49:ILE:H	5	0.37
(1,376)	1:A:49:ILE:HA	1:A:49:ILE:H	6	0.37
(1,376)	1:A:49:ILE:HA	1:A:49:ILE:H	7	0.37
(1,376)	1:A:49:ILE:HA	1:A:49:ILE:H	17	0.37
(1,366)	1:A:42:ARG:HB2	1:A:43:THR:H	18	0.37
(1,366)	1:A:42:ARG:HB2	1:A:43:THR:H	18	0.37
(1,366)	1:A:42:ARG:HB3	1:A:43:THR:H	18	0.37
(1,366)	1:A:42:ARG:HB3	1:A:43:THR:H	18	0.37
(1,365)	1:A:43:THR:HB	1:A:43:THR:H	10	0.37
(1,348)	1:A:30:ASP:HB2	1:A:31:GLY:H	19	0.37
(1,348)	1:A:30:ASP:HB3	1:A:31:GLY:H	19	0.37
(1,339)	1:A:25:ASP:H	1:A:20:TRP:HB2	15	0.37
(1,339)	1:A:25:ASP:H	1:A:20:TRP:HB3	15	0.37
(1,320)	1:A:7:ASP:HA	1:A:18:SER:H	10	0.37
(1,298)	1:A:14:GLN:H	1:A:11:ASN:H	17	0.37
(1,281)	1:A:5:GLU:HB2	1:A:6:SER:H	18	0.37
(1,281)	1:A:5:GLU:HB2	1:A:6:SER:H	18	0.37
(1,281)	1:A:5:GLU:HB3	1:A:6:SER:H	18	0.37
(1,281)	1:A:5:GLU:HB3	1:A:6:SER:H	18	0.37

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,224)	1:A:92:CYS:HA	1:A:94:SER:H	4	0.37
(1,224)	1:A:92:CYS:HA	1:A:94:SER:H	9	0.37
(1,158)	1:A:104:CYS:HA	1:A:105:ASN:H	6	0.37
(1,139)	1:A:109:ASP:H	1:A:109:ASP:HB2	10	0.37
(1,139)	1:A:109:ASP:H	1:A:109:ASP:HB3	10	0.37
(1,109)	1:A:119:CYS:H	1:A:117:LEU:HG	6	0.37
(1,109)	1:A:119:CYS:H	1:A:117:LEU:HG	14	0.37
(4,2)	1:A:90:PHE:O	1:A:98:ILE:H	15	0.36
(2,9)	1:A:51:CYS:HB2	1:A:72:ASP:H	6	0.36
(2,9)	1:A:51:CYS:HB3	1:A:72:ASP:H	6	0.36
(2,9)	1:A:71:CYS:HB3	1:A:72:ASP:H	6	0.36
(2,8)	1:A:24:GLY:HA2	1:A:46:ILE:H	2	0.36
(2,8)	1:A:24:GLY:HA3	1:A:46:ILE:H	2	0.36
(2,8)	1:A:45:ARG:HA	1:A:46:ILE:H	2	0.36
(2,8)	1:A:24:GLY:HA2	1:A:46:ILE:H	7	0.36
(2,8)	1:A:24:GLY:HA3	1:A:46:ILE:H	7	0.36
(2,8)	1:A:45:ARG:HA	1:A:46:ILE:H	7	0.36
(2,76)	1:A:28:CYS:HB2	1:A:32:SER:H	3	0.36
(2,76)	1:A:28:CYS:HB3	1:A:32:SER:H	3	0.36
(2,76)	1:A:29:GLU:HA	1:A:32:SER:H	3	0.36
(2,76)	1:A:32:SER:HA	1:A:32:SER:H	3	0.36
(2,76)	1:A:32:SER:HB2	1:A:32:SER:H	3	0.36
(2,76)	1:A:32:SER:HB3	1:A:32:SER:H	3	0.36
(2,76)	1:A:33:ASP:HA	1:A:32:SER:H	3	0.36
(2,76)	1:A:35:SER:HB2	1:A:32:SER:H	3	0.36
(2,76)	1:A:35:SER:HB3	1:A:32:SER:H	3	0.36
(2,64)	1:A:45:ARG:HB2	1:A:46:ILE:H	11	0.36
(2,64)	1:A:45:ARG:HB3	1:A:46:ILE:H	11	0.36
(2,64)	1:A:46:ILE:HG12	1:A:46:ILE:H	11	0.36
(2,64)	1:A:46:ILE:HG13	1:A:46:ILE:H	11	0.36
(2,54)	1:A:17:PRO:HB2	1:A:18:SER:H	13	0.36
(2,54)	1:A:17:PRO:HB3	1:A:18:SER:H	13	0.36
(2,54)	1:A:17:PRO:HG2	1:A:18:SER:H	13	0.36
(2,54)	1:A:17:PRO:HG3	1:A:18:SER:H	13	0.36
(2,54)	1:A:17:PRO:HB2	1:A:18:SER:H	14	0.36
(2,54)	1:A:17:PRO:HB3	1:A:18:SER:H	14	0.36
(2,54)	1:A:17:PRO:HG2	1:A:18:SER:H	14	0.36
(2,54)	1:A:17:PRO:HG3	1:A:18:SER:H	14	0.36
(2,43)	1:A:10:CYS:HA	1:A:14:GLN:H	17	0.36
(2,43)	1:A:11:ASN:HA	1:A:14:GLN:H	17	0.36
(2,43)	1:A:13:GLY:HA2	1:A:14:GLN:H	17	0.36
(2,43)	1:A:13:GLY:HA3	1:A:14:GLN:H	17	0.36

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,390)	1:A:17:PRO:HB2	1:A:19:ARG:H	8	0.36
(2,390)	1:A:17:PRO:HB3	1:A:19:ARG:H	8	0.36
(2,390)	1:A:17:PRO:HG2	1:A:19:ARG:H	8	0.36
(2,390)	1:A:17:PRO:HG3	1:A:19:ARG:H	8	0.36
(2,377)	1:A:33:ASP:HB2	1:A:33:ASP:H	12	0.36
(2,377)	1:A:33:ASP:HB3	1:A:33:ASP:H	12	0.36
(2,377)	1:A:34:GLU:HB2	1:A:33:ASP:H	12	0.36
(2,377)	1:A:34:GLU:HB3	1:A:33:ASP:H	12	0.36
(2,359)	1:A:83:ILE:HD11	1:A:98:ILE:H	1	0.36
(2,359)	1:A:83:ILE:HD12	1:A:98:ILE:H	1	0.36
(2,359)	1:A:83:ILE:HD13	1:A:98:ILE:H	1	0.36
(2,359)	1:A:98:ILE:HD11	1:A:98:ILE:H	1	0.36
(2,359)	1:A:98:ILE:HD12	1:A:98:ILE:H	1	0.36
(2,359)	1:A:98:ILE:HD13	1:A:98:ILE:H	1	0.36
(2,341)	1:A:78:GLU:HG2	1:A:78:GLU:H	6	0.36
(2,341)	1:A:78:GLU:HG3	1:A:78:GLU:H	6	0.36
(2,341)	1:A:87:PRO:HB2	1:A:78:GLU:H	6	0.36
(2,341)	1:A:87:PRO:HB3	1:A:78:GLU:H	6	0.36
(2,25)	1:A:79:ASN:HD22	1:A:80:CYS:HA	1	0.36
(2,25)	1:A:86:SER:HA	1:A:80:CYS:HA	1	0.36
(2,25)	1:A:79:ASN:HD22	1:A:80:CYS:HA	9	0.36
(2,25)	1:A:86:SER:HA	1:A:80:CYS:HA	9	0.36
(2,244)	1:A:45:ARG:HA	1:A:47:HIS:H	16	0.36
(2,244)	1:A:60:PRO:HA	1:A:47:HIS:H	16	0.36
(2,208)	1:A:43:THR:HG1	1:A:52:GLY:H	4	0.36
(2,208)	1:A:43:THR:HG1	1:A:52:GLY:H	4	0.36
(2,208)	1:A:43:THR:HG21	1:A:52:GLY:H	4	0.36
(2,208)	1:A:43:THR:HG21	1:A:52:GLY:H	4	0.36
(2,208)	1:A:43:THR:HG22	1:A:52:GLY:H	4	0.36
(2,208)	1:A:43:THR:HG22	1:A:52:GLY:H	4	0.36
(2,208)	1:A:43:THR:HG23	1:A:52:GLY:H	4	0.36
(2,208)	1:A:43:THR:HG23	1:A:52:GLY:H	4	0.36
(2,208)	1:A:53:ALA:HB1	1:A:52:GLY:H	4	0.36
(2,208)	1:A:53:ALA:HB2	1:A:52:GLY:H	4	0.36
(2,208)	1:A:53:ALA:HB3	1:A:52:GLY:H	4	0.36
(2,208)	1:A:56:THR:HG21	1:A:52:GLY:H	4	0.36
(2,208)	1:A:56:THR:HG22	1:A:52:GLY:H	4	0.36
(2,208)	1:A:56:THR:HG23	1:A:52:GLY:H	4	0.36
(2,190)	1:A:55:SER:HA	1:A:57:GLN:H	7	0.36
(2,190)	1:A:56:THR:HA	1:A:57:GLN:H	7	0.36
(2,190)	1:A:55:SER:HA	1:A:57:GLN:H	9	0.36
(2,190)	1:A:56:THR:HA	1:A:57:GLN:H	9	0.36

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,190)	1:A:55:SER:HA	1:A:57:GLN:H	13	0.36
(2,190)	1:A:56:THR:HA	1:A:57:GLN:H	13	0.36
(2,190)	1:A:55:SER:HA	1:A:57:GLN:H	16	0.36
(2,190)	1:A:56:THR:HA	1:A:57:GLN:H	16	0.36
(2,188)	1:A:16:VAL:HG11	1:A:19:ARG:H	7	0.36
(2,188)	1:A:16:VAL:HG12	1:A:19:ARG:H	7	0.36
(2,188)	1:A:16:VAL:HG13	1:A:19:ARG:H	7	0.36
(2,188)	1:A:16:VAL:HG21	1:A:19:ARG:H	7	0.36
(2,188)	1:A:16:VAL:HG22	1:A:19:ARG:H	7	0.36
(2,188)	1:A:16:VAL:HG23	1:A:19:ARG:H	7	0.36
(2,184)	1:A:16:VAL:HG11	1:A:15:CYS:H	7	0.36
(2,184)	1:A:16:VAL:HG11	1:A:15:CYS:H	7	0.36
(2,184)	1:A:16:VAL:HG11	1:A:15:CYS:H	7	0.36
(2,184)	1:A:16:VAL:HG12	1:A:15:CYS:H	7	0.36
(2,184)	1:A:16:VAL:HG12	1:A:15:CYS:H	7	0.36
(2,184)	1:A:16:VAL:HG12	1:A:15:CYS:H	7	0.36
(2,184)	1:A:16:VAL:HG12	1:A:15:CYS:H	7	0.36
(2,184)	1:A:16:VAL:HG13	1:A:15:CYS:H	7	0.36
(2,184)	1:A:16:VAL:HG13	1:A:15:CYS:H	7	0.36
(2,184)	1:A:16:VAL:HG13	1:A:15:CYS:H	7	0.36
(2,184)	1:A:16:VAL:HG21	1:A:15:CYS:H	7	0.36
(2,184)	1:A:16:VAL:HG21	1:A:15:CYS:H	7	0.36
(2,184)	1:A:16:VAL:HG21	1:A:15:CYS:H	7	0.36
(2,184)	1:A:16:VAL:HG22	1:A:15:CYS:H	7	0.36
(2,184)	1:A:16:VAL:HG22	1:A:15:CYS:H	7	0.36
(2,184)	1:A:16:VAL:HG22	1:A:15:CYS:H	7	0.36
(2,184)	1:A:16:VAL:HG23	1:A:15:CYS:H	7	0.36
(2,184)	1:A:16:VAL:HG23	1:A:15:CYS:H	7	0.36
(2,184)	1:A:16:VAL:HG23	1:A:15:CYS:H	7	0.36
(2,18)	1:A:111:SER:HA	1:A:113:GLY:H	16	0.36
(2,18)	1:A:113:GLY:HA2	1:A:113:GLY:H	16	0.36
(2,18)	1:A:113:GLY:HA3	1:A:113:GLY:H	16	0.36
(2,149)	1:A:49:ILE:HG21	1:A:59:ILE:H	12	0.36
(2,149)	1:A:49:ILE:HG22	1:A:59:ILE:H	12	0.36
(2,149)	1:A:49:ILE:HG23	1:A:59:ILE:H	12	0.36
(2,149)	1:A:59:ILE:HD11	1:A:59:ILE:H	12	0.36
(2,149)	1:A:59:ILE:HD12	1:A:59:ILE:H	12	0.36
(2,149)	1:A:59:ILE:HD13	1:A:59:ILE:H	12	0.36
(2,149)	1:A:59:ILE:HG21	1:A:59:ILE:H	12	0.36
(2,149)	1:A:59:ILE:HG22	1:A:59:ILE:H	12	0.36
(2,149)	1:A:59:ILE:HG23	1:A:59:ILE:H	12	0.36
(2,13)	1:A:110:CYS:HB2	1:A:113:GLY:H	16	0.36
(2,13)	1:A:110:CYS:HB3	1:A:113:GLY:H	16	0.36

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,13)	1:A:111:SER:HB2	1:A:113:GLY:H	16	0.36
(2,13)	1:A:111:SER:HB3	1:A:113:GLY:H	16	0.36
(2,13)	1:A:113:GLY:HA2	1:A:113:GLY:H	16	0.36
(2,13)	1:A:113:GLY:HA3	1:A:113:GLY:H	16	0.36
(2,124)	1:A:43:THR:HG1	1:A:57:GLN:H	16	0.36
(2,124)	1:A:43:THR:HG1	1:A:57:GLN:H	16	0.36
(2,124)	1:A:43:THR:HG21	1:A:57:GLN:H	16	0.36
(2,124)	1:A:43:THR:HG21	1:A:57:GLN:H	16	0.36
(2,124)	1:A:43:THR:HG22	1:A:57:GLN:H	16	0.36
(2,124)	1:A:43:THR:HG22	1:A:57:GLN:H	16	0.36
(2,124)	1:A:43:THR:HG23	1:A:57:GLN:H	16	0.36
(2,124)	1:A:43:THR:HG23	1:A:57:GLN:H	16	0.36
(2,124)	1:A:56:THR:HG1	1:A:57:GLN:H	16	0.36
(2,124)	1:A:56:THR:HG21	1:A:57:GLN:H	16	0.36
(2,124)	1:A:56:THR:HG21	1:A:57:GLN:H	16	0.36
(2,124)	1:A:56:THR:HG22	1:A:57:GLN:H	16	0.36
(2,124)	1:A:56:THR:HG22	1:A:57:GLN:H	16	0.36
(2,124)	1:A:56:THR:HG23	1:A:57:GLN:H	16	0.36
(2,124)	1:A:56:THR:HG23	1:A:57:GLN:H	16	0.36
(2,124)	1:A:43:THR:HG1	1:A:57:GLN:H	18	0.36
(2,124)	1:A:43:THR:HG1	1:A:57:GLN:H	18	0.36
(2,124)	1:A:43:THR:HG21	1:A:57:GLN:H	18	0.36
(2,124)	1:A:43:THR:HG21	1:A:57:GLN:H	18	0.36
(2,124)	1:A:43:THR:HG22	1:A:57:GLN:H	18	0.36
(2,124)	1:A:43:THR:HG22	1:A:57:GLN:H	18	0.36
(2,124)	1:A:43:THR:HG23	1:A:57:GLN:H	18	0.36
(2,124)	1:A:43:THR:HG23	1:A:57:GLN:H	18	0.36
(2,124)	1:A:56:THR:HG1	1:A:57:GLN:H	18	0.36
(2,124)	1:A:56:THR:HG21	1:A:57:GLN:H	18	0.36
(2,124)	1:A:56:THR:HG21	1:A:57:GLN:H	18	0.36
(2,124)	1:A:56:THR:HG22	1:A:57:GLN:H	18	0.36
(2,124)	1:A:56:THR:HG22	1:A:57:GLN:H	18	0.36
(2,124)	1:A:56:THR:HG23	1:A:57:GLN:H	18	0.36
(2,124)	1:A:56:THR:HG23	1:A:57:GLN:H	18	0.36
(2,116)	1:A:37:GLU:HB2	1:A:38:GLN:HE22	7	0.36
(2,116)	1:A:37:GLU:HB3	1:A:38:GLN:HE22	7	0.36
(2,116)	1:A:37:GLU:HB3	1:A:38:GLN:HE22	7	0.36
(2,116)	1:A:38:GLN:HB2	1:A:38:GLN:HE22	7	0.36
(2,116)	1:A:38:GLN:HB2	1:A:38:GLN:HE22	7	0.36
(2,116)	1:A:38:GLN:HB3	1:A:38:GLN:HE22	7	0.36
(2,114)	1:A:16:VAL:HG11	1:A:16:VAL:H	13	0.36
(2,114)	1:A:16:VAL:HG12	1:A:16:VAL:H	13	0.36

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,114)	1:A:16:VAL:HG13	1:A:16:VAL:H	13	0.36
(2,114)	1:A:16:VAL:HG21	1:A:16:VAL:H	13	0.36
(2,114)	1:A:16:VAL:HG21	1:A:16:VAL:H	13	0.36
(2,114)	1:A:16:VAL:HG22	1:A:16:VAL:H	13	0.36
(2,114)	1:A:16:VAL:HG22	1:A:16:VAL:H	13	0.36
(2,114)	1:A:16:VAL:HG23	1:A:16:VAL:H	13	0.36
(2,114)	1:A:16:VAL:HG23	1:A:16:VAL:H	13	0.36
(1,99)	1:A:98:ILE:HG12	1:A:99:SER:H	14	0.36
(1,99)	1:A:98:ILE:HG13	1:A:99:SER:H	14	0.36
(1,93)	1:A:8:PHE:H	1:A:7:ASP:HA	2	0.36
(1,93)	1:A:8:PHE:H	1:A:7:ASP:HA	5	0.36
(1,93)	1:A:8:PHE:H	1:A:7:ASP:HA	16	0.36
(1,916)	1:A:77:GLU:HB2	1:A:77:GLU:H	14	0.36
(1,916)	1:A:77:GLU:HB3	1:A:77:GLU:H	14	0.36
(1,911)	1:A:57:GLN:HE21	1:A:71:CYS:H	16	0.36
(1,909)	1:A:43:THR:HG1	1:A:46:ILE:H	9	0.36
(1,909)	1:A:43:THR:HG21	1:A:46:ILE:H	9	0.36
(1,909)	1:A:43:THR:HG22	1:A:46:ILE:H	9	0.36
(1,909)	1:A:43:THR:HG23	1:A:46:ILE:H	9	0.36
(1,896)	1:A:64:ARG:H	1:A:66:ASP:H	2	0.36
(1,888)	1:A:49:ILE:HA	1:A:61:VAL:H	15	0.36
(1,888)	1:A:49:ILE:HA	1:A:61:VAL:H	16	0.36
(1,863)	1:A:17:PRO:HD2	1:A:20:TRP:HE1	15	0.36
(1,863)	1:A:17:PRO:HD3	1:A:20:TRP:HE1	15	0.36
(1,862)	1:A:21:LYS:HE2	1:A:19:ARG:H	18	0.36
(1,862)	1:A:21:LYS:HE3	1:A:19:ARG:H	18	0.36
(1,860)	1:A:16:VAL:HB	1:A:19:ARG:H	2	0.36
(1,859)	1:A:3:CYS:HB2	1:A:18:SER:H	11	0.36
(1,859)	1:A:3:CYS:HB3	1:A:18:SER:H	11	0.36
(1,853)	1:A:10:CYS:HB2	1:A:12:ASN:H	9	0.36
(1,853)	1:A:10:CYS:HB3	1:A:12:ASN:H	9	0.36
(1,819)	1:A:112:ASP:HB2	1:A:115:ASP:H	13	0.36
(1,819)	1:A:112:ASP:HB3	1:A:115:ASP:H	13	0.36
(1,813)	1:A:107:GLN:HE21	1:A:108:ASP:HA	4	0.36
(1,81)	1:A:28:CYS:HA	1:A:33:ASP:H	14	0.36
(1,81)	1:A:28:CYS:HA	1:A:33:ASP:H	17	0.36
(1,807)	1:A:98:ILE:HG12	1:A:103:VAL:H	9	0.36
(1,807)	1:A:98:ILE:HG13	1:A:103:VAL:H	9	0.36
(1,799)	1:A:85:CYS:HA	1:A:97:CYS:H	2	0.36
(1,789)	1:A:85:CYS:H	1:A:84:THR:HB	5	0.36
(1,789)	1:A:85:CYS:H	1:A:84:THR:HB	12	0.36
(1,783)	1:A:71:CYS:HB2	1:A:74:GLY:H	4	0.36

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,783)	1:A:71:CYS:HB3	1:A:74:GLY:H	4	0.36
(1,777)	1:A:77:GLU:HB2	1:A:70:ASP:H	18	0.36
(1,777)	1:A:77:GLU:HB3	1:A:70:ASP:H	18	0.36
(1,766)	1:A:48:GLU:HB2	1:A:58:CYS:H	1	0.36
(1,766)	1:A:48:GLU:HB3	1:A:58:CYS:H	1	0.36
(1,766)	1:A:48:GLU:HB2	1:A:58:CYS:H	3	0.36
(1,766)	1:A:48:GLU:HB3	1:A:58:CYS:H	3	0.36
(1,766)	1:A:48:GLU:HB2	1:A:58:CYS:H	11	0.36
(1,766)	1:A:48:GLU:HB3	1:A:58:CYS:H	11	0.36
(1,766)	1:A:48:GLU:HB2	1:A:58:CYS:H	13	0.36
(1,766)	1:A:48:GLU:HB3	1:A:58:CYS:H	13	0.36
(1,733)	1:A:32:SER:H	1:A:28:CYS:H	5	0.36
(1,729)	1:A:32:SER:H	1:A:28:CYS:H	5	0.36
(1,681)	1:A:79:ASN:HD21	1:A:87:PRO:HD2	2	0.36
(1,681)	1:A:79:ASN:HD21	1:A:87:PRO:HD3	2	0.36
(1,681)	1:A:79:ASN:HD21	1:A:87:PRO:HD2	8	0.36
(1,681)	1:A:79:ASN:HD21	1:A:87:PRO:HD3	8	0.36
(1,667)	1:A:107:GLN:HG2	1:A:105:ASN:HD22	3	0.36
(1,667)	1:A:107:GLN:HG2	1:A:105:ASN:HD22	3	0.36
(1,667)	1:A:107:GLN:HG3	1:A:105:ASN:HD22	3	0.36
(1,667)	1:A:107:GLN:HG3	1:A:105:ASN:HD22	3	0.36
(1,658)	1:A:102:PHE:HA	1:A:105:ASN:HD22	17	0.36
(1,642)	1:A:82:ASN:HA	1:A:82:ASN:HD22	6	0.36
(1,582)	1:A:46:ILE:H	1:A:45:ARG:H	12	0.36
(1,569)	1:A:85:CYS:H	1:A:84:THR:H	15	0.36
(1,56)	1:A:70:ASP:H	1:A:71:CYS:H	4	0.36
(1,555)	1:A:103:VAL:HG11	1:A:104:CYS:H	1	0.36
(1,555)	1:A:103:VAL:HG12	1:A:104:CYS:H	1	0.36
(1,555)	1:A:103:VAL:HG13	1:A:104:CYS:H	1	0.36
(1,555)	1:A:103:VAL:HG21	1:A:104:CYS:H	1	0.36
(1,555)	1:A:103:VAL:HG22	1:A:104:CYS:H	1	0.36
(1,555)	1:A:103:VAL:HG23	1:A:104:CYS:H	1	0.36
(1,555)	1:A:103:VAL:HG11	1:A:104:CYS:H	2	0.36
(1,555)	1:A:103:VAL:HG12	1:A:104:CYS:H	2	0.36
(1,555)	1:A:103:VAL:HG13	1:A:104:CYS:H	2	0.36
(1,555)	1:A:103:VAL:HG21	1:A:104:CYS:H	2	0.36
(1,555)	1:A:103:VAL:HG22	1:A:104:CYS:H	2	0.36
(1,555)	1:A:103:VAL:HG23	1:A:104:CYS:H	2	0.36
(1,555)	1:A:103:VAL:HG11	1:A:104:CYS:H	8	0.36
(1,555)	1:A:103:VAL:HG12	1:A:104:CYS:H	8	0.36
(1,555)	1:A:103:VAL:HG13	1:A:104:CYS:H	8	0.36
(1,555)	1:A:103:VAL:HG21	1:A:104:CYS:H	8	0.36

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,555)	1:A:103:VAL:HG22	1:A:104:CYS:H	8	0.36
(1,555)	1:A:103:VAL:HG23	1:A:104:CYS:H	8	0.36
(1,55)	1:A:71:CYS:H	1:A:70:ASP:H	2	0.36
(1,534)	1:A:77:GLU:HB2	1:A:77:GLU:H	8	0.36
(1,534)	1:A:77:GLU:HB3	1:A:77:GLU:H	8	0.36
(1,526)	1:A:64:ARG:H	1:A:67:GLY:H	16	0.36
(1,49)	1:A:94:SER:H	1:A:93:SER:H	20	0.36
(1,486)	1:A:7:ASP:HA	1:A:19:ARG:H	1	0.36
(1,486)	1:A:7:ASP:HA	1:A:19:ARG:H	16	0.36
(1,483)	1:A:10:CYS:HB2	1:A:14:GLN:H	17	0.36
(1,483)	1:A:10:CYS:HB3	1:A:14:GLN:H	17	0.36
(1,445)	1:A:75:GLU:H	1:A:74:GLY:H	8	0.36
(1,443)	1:A:73:SER:H	1:A:71:CYS:HB2	2	0.36
(1,443)	1:A:73:SER:H	1:A:71:CYS:HB3	2	0.36
(1,436)	1:A:73:SER:H	1:A:72:ASP:H	1	0.36
(1,436)	1:A:73:SER:H	1:A:72:ASP:H	17	0.36
(1,398)	1:A:54:HIS:HB2	1:A:54:HIS:H	1	0.36
(1,398)	1:A:54:HIS:HB3	1:A:54:HIS:H	1	0.36
(1,398)	1:A:54:HIS:HB2	1:A:54:HIS:H	18	0.36
(1,398)	1:A:54:HIS:HB3	1:A:54:HIS:H	18	0.36
(1,376)	1:A:49:ILE:HA	1:A:49:ILE:H	1	0.36
(1,376)	1:A:49:ILE:HA	1:A:49:ILE:H	8	0.36
(1,376)	1:A:49:ILE:HA	1:A:49:ILE:H	11	0.36
(1,376)	1:A:49:ILE:HA	1:A:49:ILE:H	14	0.36
(1,371)	1:A:44:CYS:HA	1:A:45:ARG:H	10	0.36
(1,365)	1:A:43:THR:HB	1:A:43:THR:H	17	0.36
(1,33)	1:A:115:ASP:H	1:A:114:SER:H	3	0.36
(1,33)	1:A:115:ASP:H	1:A:114:SER:H	4	0.36
(1,33)	1:A:115:ASP:H	1:A:114:SER:H	7	0.36
(1,327)	1:A:22:CYS:HB2	1:A:22:CYS:H	10	0.36
(1,327)	1:A:22:CYS:HB3	1:A:22:CYS:H	10	0.36
(1,323)	1:A:64:ARG:H	1:A:80:CYS:HB2	13	0.36
(1,323)	1:A:64:ARG:H	1:A:80:CYS:HB3	13	0.36
(1,320)	1:A:7:ASP:HA	1:A:18:SER:H	9	0.36
(1,286)	1:A:7:ASP:HB2	1:A:7:ASP:H	20	0.36
(1,286)	1:A:7:ASP:HB3	1:A:7:ASP:H	20	0.36
(1,24)	1:A:104:CYS:H	1:A:105:ASN:H	14	0.36
(1,24)	1:A:104:CYS:H	1:A:105:ASN:H	18	0.36
(1,23)	1:A:104:CYS:H	1:A:105:ASN:H	14	0.36
(1,23)	1:A:104:CYS:H	1:A:105:ASN:H	18	0.36
(1,224)	1:A:92:CYS:HA	1:A:94:SER:H	3	0.36
(1,224)	1:A:92:CYS:HA	1:A:94:SER:H	5	0.36

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,224)	1:A:92:CYS:HA	1:A:94:SER:H	6	0.36
(1,224)	1:A:92:CYS:HA	1:A:94:SER:H	11	0.36
(1,224)	1:A:92:CYS:HA	1:A:94:SER:H	17	0.36
(1,205)	1:A:98:ILE:HG12	1:A:98:ILE:H	10	0.36
(1,205)	1:A:98:ILE:HG13	1:A:98:ILE:H	10	0.36
(1,189)	1:A:101:ASN:HB2	1:A:101:ASN:H	6	0.36
(1,189)	1:A:101:ASN:HB3	1:A:101:ASN:H	6	0.36
(1,189)	1:A:101:ASN:HB2	1:A:101:ASN:H	18	0.36
(1,189)	1:A:101:ASN:HB3	1:A:101:ASN:H	18	0.36
(1,158)	1:A:104:CYS:HA	1:A:105:ASN:H	12	0.36
(1,140)	1:A:108:ASP:H	1:A:108:ASP:HB2	6	0.36
(1,140)	1:A:108:ASP:H	1:A:108:ASP:HB3	6	0.36
(2,80)	1:A:41:MET:HA	1:A:56:THR:H	14	0.35
(2,80)	1:A:42:ARG:HA	1:A:56:THR:H	14	0.35
(2,80)	1:A:56:THR:HB	1:A:56:THR:H	14	0.35
(2,8)	1:A:24:GLY:HA2	1:A:46:ILE:H	1	0.35
(2,8)	1:A:24:GLY:HA3	1:A:46:ILE:H	1	0.35
(2,8)	1:A:45:ARG:HA	1:A:46:ILE:H	1	0.35
(2,8)	1:A:24:GLY:HA2	1:A:46:ILE:H	5	0.35
(2,8)	1:A:24:GLY:HA3	1:A:46:ILE:H	5	0.35
(2,8)	1:A:45:ARG:HA	1:A:46:ILE:H	5	0.35
(2,8)	1:A:24:GLY:HA2	1:A:46:ILE:H	8	0.35
(2,8)	1:A:24:GLY:HA3	1:A:46:ILE:H	8	0.35
(2,8)	1:A:45:ARG:HA	1:A:46:ILE:H	8	0.35
(2,66)	1:A:4:ALA:H	1:A:7:ASP:H	20	0.35
(2,66)	1:A:5:GLU:H	1:A:7:ASP:H	20	0.35
(2,54)	1:A:17:PRO:HB2	1:A:18:SER:H	10	0.35
(2,54)	1:A:17:PRO:HB3	1:A:18:SER:H	10	0.35
(2,54)	1:A:17:PRO:HG2	1:A:18:SER:H	10	0.35
(2,54)	1:A:17:PRO:HG3	1:A:18:SER:H	10	0.35
(2,323)	1:A:64:ARG:HG2	1:A:68:GLU:H	3	0.35
(2,323)	1:A:64:ARG:HG3	1:A:68:GLU:H	3	0.35
(2,323)	1:A:68:GLU:HG3	1:A:68:GLU:H	3	0.35
(2,305)	1:A:72:ASP:HB2	1:A:72:ASP:H	18	0.35
(2,305)	1:A:72:ASP:HB3	1:A:72:ASP:H	18	0.35
(2,305)	1:A:72:ASP:HB3	1:A:72:ASP:H	18	0.35
(2,305)	1:A:76:ASP:HB2	1:A:72:ASP:H	18	0.35
(2,305)	1:A:76:ASP:HB2	1:A:72:ASP:H	18	0.35
(2,305)	1:A:76:ASP:HB3	1:A:72:ASP:H	18	0.35
(2,285)	1:A:109:ASP:HB2	1:A:112:ASP:H	17	0.35
(2,285)	1:A:109:ASP:HB3	1:A:112:ASP:H	17	0.35
(2,285)	1:A:112:ASP:HB2	1:A:112:ASP:H	17	0.35

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,285)	1:A:112:ASP:HB3	1:A:112:ASP:H	17	0.35
(2,285)	1:A:109:ASP:HB2	1:A:112:ASP:H	18	0.35
(2,285)	1:A:109:ASP:HB3	1:A:112:ASP:H	18	0.35
(2,285)	1:A:112:ASP:HB2	1:A:112:ASP:H	18	0.35
(2,285)	1:A:112:ASP:HB3	1:A:112:ASP:H	18	0.35
(2,277)	1:A:19:ARG:HG2	1:A:19:ARG:H	4	0.35
(2,277)	1:A:19:ARG:HG2	1:A:19:ARG:H	4	0.35
(2,277)	1:A:19:ARG:HG3	1:A:19:ARG:H	4	0.35
(2,277)	1:A:19:ARG:HG3	1:A:19:ARG:H	4	0.35
(2,277)	1:A:21:LYS:HD2	1:A:19:ARG:H	4	0.35
(2,25)	1:A:79:ASN:HD22	1:A:80:CYS:HA	2	0.35
(2,25)	1:A:86:SER:HA	1:A:80:CYS:HA	2	0.35
(2,227)	1:A:19:ARG:HG2	1:A:21:LYS:H	5	0.35
(2,227)	1:A:19:ARG:HG2	1:A:21:LYS:H	5	0.35
(2,227)	1:A:19:ARG:HG3	1:A:21:LYS:H	5	0.35
(2,227)	1:A:19:ARG:HG3	1:A:21:LYS:H	5	0.35
(2,227)	1:A:21:LYS:HB2	1:A:21:LYS:H	5	0.35
(2,227)	1:A:21:LYS:HB3	1:A:21:LYS:H	5	0.35
(2,227)	1:A:21:LYS:HD2	1:A:21:LYS:H	5	0.35
(2,227)	1:A:21:LYS:HD3	1:A:21:LYS:H	5	0.35
(2,216)	1:A:49:ILE:HD11	1:A:50:SER:H	19	0.35
(2,216)	1:A:49:ILE:HD12	1:A:50:SER:H	19	0.35
(2,216)	1:A:49:ILE:HD13	1:A:50:SER:H	19	0.35
(2,216)	1:A:49:ILE:HG12	1:A:50:SER:H	19	0.35
(2,216)	1:A:49:ILE:HG13	1:A:50:SER:H	19	0.35
(2,216)	1:A:49:ILE:HG21	1:A:50:SER:H	19	0.35
(2,216)	1:A:49:ILE:HG22	1:A:50:SER:H	19	0.35
(2,216)	1:A:49:ILE:HG23	1:A:50:SER:H	19	0.35
(2,211)	1:A:49:ILE:HD11	1:A:49:ILE:H	18	0.35
(2,211)	1:A:49:ILE:HD12	1:A:49:ILE:H	18	0.35
(2,211)	1:A:49:ILE:HD13	1:A:49:ILE:H	18	0.35
(2,211)	1:A:49:ILE:HG12	1:A:49:ILE:H	18	0.35
(2,211)	1:A:49:ILE:HG13	1:A:49:ILE:H	18	0.35
(2,211)	1:A:49:ILE:HG21	1:A:49:ILE:H	18	0.35
(2,211)	1:A:49:ILE:HG22	1:A:49:ILE:H	18	0.35
(2,211)	1:A:49:ILE:HG23	1:A:49:ILE:H	18	0.35
(2,208)	1:A:43:THR:HG1	1:A:52:GLY:H	10	0.35
(2,208)	1:A:43:THR:HG1	1:A:52:GLY:H	10	0.35
(2,208)	1:A:43:THR:HG21	1:A:52:GLY:H	10	0.35
(2,208)	1:A:43:THR:HG21	1:A:52:GLY:H	10	0.35
(2,208)	1:A:43:THR:HG22	1:A:52:GLY:H	10	0.35
(2,208)	1:A:43:THR:HG22	1:A:52:GLY:H	10	0.35

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,208)	1:A:43:THR:HG23	1:A:52:GLY:H	10	0.35
(2,208)	1:A:43:THR:HG23	1:A:52:GLY:H	10	0.35
(2,208)	1:A:53:ALA:HB1	1:A:52:GLY:H	10	0.35
(2,208)	1:A:53:ALA:HB2	1:A:52:GLY:H	10	0.35
(2,208)	1:A:53:ALA:HB3	1:A:52:GLY:H	10	0.35
(2,208)	1:A:56:THR:HG21	1:A:52:GLY:H	10	0.35
(2,208)	1:A:56:THR:HG22	1:A:52:GLY:H	10	0.35
(2,208)	1:A:56:THR:HG23	1:A:52:GLY:H	10	0.35
(2,193)	1:A:98:ILE:HD11	1:A:109:ASP:H	2	0.35
(2,193)	1:A:98:ILE:HD12	1:A:109:ASP:H	2	0.35
(2,193)	1:A:98:ILE:HD13	1:A:109:ASP:H	2	0.35
(2,193)	1:A:117:LEU:HD11	1:A:109:ASP:H	2	0.35
(2,193)	1:A:117:LEU:HD12	1:A:109:ASP:H	2	0.35
(2,193)	1:A:117:LEU:HD13	1:A:109:ASP:H	2	0.35
(2,193)	1:A:117:LEU:HD21	1:A:109:ASP:H	2	0.35
(2,193)	1:A:117:LEU:HD22	1:A:109:ASP:H	2	0.35
(2,193)	1:A:117:LEU:HD23	1:A:109:ASP:H	2	0.35
(2,190)	1:A:55:SER:HA	1:A:57:GLN:H	19	0.35
(2,190)	1:A:56:THR:HA	1:A:57:GLN:H	19	0.35
(2,188)	1:A:16:VAL:HG11	1:A:19:ARG:H	19	0.35
(2,188)	1:A:16:VAL:HG12	1:A:19:ARG:H	19	0.35
(2,188)	1:A:16:VAL:HG13	1:A:19:ARG:H	19	0.35
(2,188)	1:A:16:VAL:HG21	1:A:19:ARG:H	19	0.35
(2,188)	1:A:16:VAL:HG22	1:A:19:ARG:H	19	0.35
(2,188)	1:A:16:VAL:HG23	1:A:19:ARG:H	19	0.35
(2,177)	1:A:22:CYS:HB2	1:A:44:CYS:H	13	0.35
(2,177)	1:A:22:CYS:HB3	1:A:44:CYS:H	13	0.35
(2,177)	1:A:44:CYS:HB2	1:A:44:CYS:H	13	0.35
(2,177)	1:A:44:CYS:HB3	1:A:44:CYS:H	13	0.35
(2,164)	1:A:14:GLN:HB2	1:A:14:GLN:H	5	0.35
(2,164)	1:A:14:GLN:HB3	1:A:14:GLN:H	5	0.35
(2,164)	1:A:14:GLN:HB2	1:A:14:GLN:H	7	0.35
(2,164)	1:A:14:GLN:HB3	1:A:14:GLN:H	7	0.35
(2,163)	1:A:71:CYS:HA	1:A:77:GLU:H	10	0.35
(2,163)	1:A:77:GLU:HA	1:A:77:GLU:H	10	0.35
(2,156)	1:A:51:CYS:HB2	1:A:71:CYS:H	17	0.35
(2,156)	1:A:51:CYS:HB3	1:A:71:CYS:H	17	0.35
(2,156)	1:A:71:CYS:HB2	1:A:71:CYS:H	17	0.35
(2,156)	1:A:71:CYS:HB3	1:A:71:CYS:H	17	0.35
(2,131)	1:A:25:ASP:HB2	1:A:27:ASP:H	13	0.35
(2,131)	1:A:25:ASP:HB3	1:A:27:ASP:H	13	0.35
(2,131)	1:A:33:ASP:HB2	1:A:27:ASP:H	13	0.35

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,131)	1:A:34:GLU:HB3	1:A:27:ASP:H	13	0.35
(2,116)	1:A:37:GLU:HB2	1:A:38:GLN:HE22	1	0.35
(2,116)	1:A:37:GLU:HB3	1:A:38:GLN:HE22	1	0.35
(2,116)	1:A:37:GLU:HB3	1:A:38:GLN:HE22	1	0.35
(2,116)	1:A:38:GLN:HB2	1:A:38:GLN:HE22	1	0.35
(2,116)	1:A:38:GLN:HB2	1:A:38:GLN:HE22	1	0.35
(2,116)	1:A:38:GLN:HB3	1:A:38:GLN:HE22	1	0.35
(2,114)	1:A:16:VAL:HG11	1:A:16:VAL:H	1	0.35
(2,114)	1:A:16:VAL:HG12	1:A:16:VAL:H	1	0.35
(2,114)	1:A:16:VAL:HG13	1:A:16:VAL:H	1	0.35
(2,114)	1:A:16:VAL:HG21	1:A:16:VAL:H	1	0.35
(2,114)	1:A:16:VAL:HG21	1:A:16:VAL:H	1	0.35
(2,114)	1:A:16:VAL:HG22	1:A:16:VAL:H	1	0.35
(2,114)	1:A:16:VAL:HG22	1:A:16:VAL:H	1	0.35
(2,114)	1:A:16:VAL:HG23	1:A:16:VAL:H	1	0.35
(2,114)	1:A:16:VAL:HG23	1:A:16:VAL:H	1	0.35
(2,114)	1:A:16:VAL:HG11	1:A:16:VAL:H	10	0.35
(2,114)	1:A:16:VAL:HG12	1:A:16:VAL:H	10	0.35
(2,114)	1:A:16:VAL:HG13	1:A:16:VAL:H	10	0.35
(2,114)	1:A:16:VAL:HG21	1:A:16:VAL:H	10	0.35
(2,114)	1:A:16:VAL:HG21	1:A:16:VAL:H	10	0.35
(2,114)	1:A:16:VAL:HG22	1:A:16:VAL:H	10	0.35
(2,114)	1:A:16:VAL:HG22	1:A:16:VAL:H	10	0.35
(2,114)	1:A:16:VAL:HG23	1:A:16:VAL:H	10	0.35
(2,114)	1:A:16:VAL:HG23	1:A:16:VAL:H	10	0.35
(2,114)	1:A:16:VAL:HG11	1:A:16:VAL:H	17	0.35
(2,114)	1:A:16:VAL:HG12	1:A:16:VAL:H	17	0.35
(2,114)	1:A:16:VAL:HG13	1:A:16:VAL:H	17	0.35
(2,114)	1:A:16:VAL:HG21	1:A:16:VAL:H	17	0.35
(2,114)	1:A:16:VAL:HG21	1:A:16:VAL:H	17	0.35
(2,114)	1:A:16:VAL:HG22	1:A:16:VAL:H	17	0.35
(2,114)	1:A:16:VAL:HG22	1:A:16:VAL:H	17	0.35
(2,114)	1:A:16:VAL:HG23	1:A:16:VAL:H	17	0.35
(2,114)	1:A:16:VAL:HG23	1:A:16:VAL:H	17	0.35
(2,11)	1:A:108:ASP:HA	1:A:113:GLY:H	9	0.35
(2,11)	1:A:109:ASP:HA	1:A:113:GLY:H	9	0.35
(2,11)	1:A:110:CYS:HA	1:A:113:GLY:H	9	0.35
(2,11)	1:A:114:SER:HG	1:A:113:GLY:H	9	0.35
(1,97)	1:A:98:ILE:HD11	1:A:99:SER:H	2	0.35
(1,97)	1:A:98:ILE:HD12	1:A:99:SER:H	2	0.35
(1,97)	1:A:98:ILE:HD13	1:A:99:SER:H	2	0.35
(1,909)	1:A:43:THR:HG1	1:A:46:ILE:H	14	0.35

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,909)	1:A:43:THR:HG21	1:A:46:ILE:H	14	0.35
(1,909)	1:A:43:THR:HG22	1:A:46:ILE:H	14	0.35
(1,909)	1:A:43:THR:HG23	1:A:46:ILE:H	14	0.35
(1,907)	1:A:39:CYS:H	1:A:41:MET:H	2	0.35
(1,907)	1:A:39:CYS:H	1:A:41:MET:H	19	0.35
(1,897)	1:A:77:GLU:HB2	1:A:69:ASN:HD22	2	0.35
(1,897)	1:A:77:GLU:HB3	1:A:69:ASN:HD22	2	0.35
(1,897)	1:A:77:GLU:HB2	1:A:69:ASN:HD22	19	0.35
(1,897)	1:A:77:GLU:HB3	1:A:69:ASN:HD22	19	0.35
(1,891)	1:A:64:ARG:H	1:A:80:CYS:HB2	11	0.35
(1,891)	1:A:64:ARG:H	1:A:80:CYS:HB3	11	0.35
(1,891)	1:A:64:ARG:H	1:A:80:CYS:HB2	16	0.35
(1,891)	1:A:64:ARG:H	1:A:80:CYS:HB3	16	0.35
(1,888)	1:A:49:ILE:HA	1:A:61:VAL:H	13	0.35
(1,860)	1:A:16:VAL:HB	1:A:19:ARG:H	5	0.35
(1,859)	1:A:3:CYS:HB2	1:A:18:SER:H	7	0.35
(1,859)	1:A:3:CYS:HB3	1:A:18:SER:H	7	0.35
(1,856)	1:A:14:GLN:H	1:A:12:ASN:HD22	7	0.35
(1,856)	1:A:14:GLN:H	1:A:12:ASN:HD22	11	0.35
(1,856)	1:A:14:GLN:H	1:A:12:ASN:HD22	16	0.35
(1,85)	1:A:21:LYS:HG2	1:A:22:CYS:H	9	0.35
(1,85)	1:A:21:LYS:HG3	1:A:22:CYS:H	9	0.35
(1,85)	1:A:21:LYS:HG2	1:A:22:CYS:H	14	0.35
(1,85)	1:A:21:LYS:HG3	1:A:22:CYS:H	14	0.35
(1,85)	1:A:21:LYS:HG2	1:A:22:CYS:H	20	0.35
(1,85)	1:A:21:LYS:HG3	1:A:22:CYS:H	20	0.35
(1,849)	1:A:33:ASP:H	1:A:11:ASN:H	4	0.35
(1,840)	1:A:71:CYS:HB2	1:A:77:GLU:H	17	0.35
(1,840)	1:A:71:CYS:HB3	1:A:77:GLU:H	17	0.35
(1,833)	1:A:42:ARG:HG2	1:A:41:MET:H	20	0.35
(1,833)	1:A:42:ARG:HG2	1:A:41:MET:H	20	0.35
(1,833)	1:A:42:ARG:HG3	1:A:41:MET:H	20	0.35
(1,833)	1:A:42:ARG:HG3	1:A:41:MET:H	20	0.35
(1,831)	1:A:73:SER:H	1:A:75:GLU:H	5	0.35
(1,831)	1:A:73:SER:H	1:A:75:GLU:H	7	0.35
(1,806)	1:A:101:ASN:HD21	1:A:102:PHE:H	10	0.35
(1,791)	1:A:85:CYS:HB2	1:A:89:GLU:H	1	0.35
(1,791)	1:A:85:CYS:HB3	1:A:89:GLU:H	1	0.35
(1,789)	1:A:85:CYS:H	1:A:84:THR:HB	13	0.35
(1,789)	1:A:85:CYS:H	1:A:84:THR:HB	20	0.35
(1,784)	1:A:71:CYS:HB2	1:A:76:ASP:H	2	0.35
(1,784)	1:A:71:CYS:HB3	1:A:76:ASP:H	2	0.35

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,783)	1:A:71:CYS:HB2	1:A:74:GLY:H	13	0.35
(1,783)	1:A:71:CYS:HB3	1:A:74:GLY:H	13	0.35
(1,783)	1:A:71:CYS:HB2	1:A:74:GLY:H	14	0.35
(1,783)	1:A:71:CYS:HB3	1:A:74:GLY:H	14	0.35
(1,772)	1:A:68:GLU:H	1:A:64:ARG:H	5	0.35
(1,747)	1:A:57:GLN:HB2	1:A:51:CYS:H	10	0.35
(1,747)	1:A:57:GLN:HB2	1:A:51:CYS:H	10	0.35
(1,747)	1:A:57:GLN:HB3	1:A:51:CYS:H	10	0.35
(1,747)	1:A:57:GLN:HB3	1:A:51:CYS:H	10	0.35
(1,745)	1:A:48:GLU:HB2	1:A:49:ILE:H	7	0.35
(1,745)	1:A:48:GLU:HB3	1:A:49:ILE:H	7	0.35
(1,745)	1:A:48:GLU:HB2	1:A:49:ILE:H	13	0.35
(1,745)	1:A:48:GLU:HB3	1:A:49:ILE:H	13	0.35
(1,745)	1:A:48:GLU:HB2	1:A:49:ILE:H	19	0.35
(1,745)	1:A:48:GLU:HB3	1:A:49:ILE:H	19	0.35
(1,744)	1:A:48:GLU:H	1:A:47:HIS:H	17	0.35
(1,735)	1:A:28:CYS:HB2	1:A:33:ASP:H	2	0.35
(1,735)	1:A:28:CYS:HB3	1:A:33:ASP:H	2	0.35
(1,735)	1:A:28:CYS:HB2	1:A:33:ASP:H	20	0.35
(1,735)	1:A:28:CYS:HB3	1:A:33:ASP:H	20	0.35
(1,733)	1:A:32:SER:H	1:A:28:CYS:H	2	0.35
(1,73)	1:A:65:CYS:HB2	1:A:65:CYS:H	13	0.35
(1,73)	1:A:65:CYS:HB3	1:A:65:CYS:H	13	0.35
(1,73)	1:A:65:CYS:HB2	1:A:65:CYS:H	15	0.35
(1,73)	1:A:65:CYS:HB3	1:A:65:CYS:H	15	0.35
(1,729)	1:A:32:SER:H	1:A:28:CYS:H	2	0.35
(1,706)	1:A:45:ARG:HB2	1:A:45:ARG:H	19	0.35
(1,706)	1:A:45:ARG:HB3	1:A:45:ARG:H	19	0.35
(1,696)	1:A:44:CYS:HB2	1:A:34:GLU:H	4	0.35
(1,696)	1:A:44:CYS:HB3	1:A:34:GLU:H	4	0.35
(1,681)	1:A:79:ASN:HD21	1:A:87:PRO:HD2	14	0.35
(1,681)	1:A:79:ASN:HD21	1:A:87:PRO:HD3	14	0.35
(1,681)	1:A:79:ASN:HD21	1:A:87:PRO:HD2	17	0.35
(1,681)	1:A:79:ASN:HD21	1:A:87:PRO:HD3	17	0.35
(1,66)	1:A:23:ASP:H	1:A:24:GLY:H	18	0.35
(1,66)	1:A:23:ASP:H	1:A:24:GLY:H	20	0.35
(1,60)	1:A:56:THR:H	1:A:57:GLN:H	11	0.35
(1,585)	1:A:28:CYS:H	1:A:27:ASP:H	16	0.35
(1,583)	1:A:40:HIS:HA	1:A:38:GLN:H	8	0.35
(1,583)	1:A:40:HIS:HA	1:A:38:GLN:H	10	0.35
(1,555)	1:A:103:VAL:HG11	1:A:104:CYS:H	17	0.35
(1,555)	1:A:103:VAL:HG12	1:A:104:CYS:H	17	0.35

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,555)	1:A:103:VAL:HG13	1:A:104:CYS:H	17	0.35
(1,555)	1:A:103:VAL:HG21	1:A:104:CYS:H	17	0.35
(1,555)	1:A:103:VAL:HG22	1:A:104:CYS:H	17	0.35
(1,555)	1:A:103:VAL:HG23	1:A:104:CYS:H	17	0.35
(1,534)	1:A:77:GLU:HB2	1:A:77:GLU:H	13	0.35
(1,534)	1:A:77:GLU:HB3	1:A:77:GLU:H	13	0.35
(1,53)	1:A:77:GLU:H	1:A:76:ASP:H	4	0.35
(1,526)	1:A:64:ARG:H	1:A:67:GLY:H	5	0.35
(1,52)	1:A:76:ASP:H	1:A:77:GLU:H	4	0.35
(1,499)	1:A:33:ASP:HB2	1:A:33:ASP:H	4	0.35
(1,499)	1:A:33:ASP:HB3	1:A:33:ASP:H	4	0.35
(1,49)	1:A:94:SER:H	1:A:93:SER:H	9	0.35
(1,486)	1:A:7:ASP:HA	1:A:19:ARG:H	20	0.35
(1,454)	1:A:78:GLU:HG2	1:A:76:ASP:H	9	0.35
(1,454)	1:A:78:GLU:HG3	1:A:76:ASP:H	9	0.35
(1,454)	1:A:78:GLU:HG2	1:A:76:ASP:H	13	0.35
(1,454)	1:A:78:GLU:HG3	1:A:76:ASP:H	13	0.35
(1,376)	1:A:49:ILE:HA	1:A:49:ILE:H	10	0.35
(1,375)	1:A:48:GLU:HA	1:A:49:ILE:H	9	0.35
(1,375)	1:A:48:GLU:HA	1:A:49:ILE:H	20	0.35
(1,365)	1:A:43:THR:HB	1:A:43:THR:H	1	0.35
(1,365)	1:A:43:THR:HB	1:A:43:THR:H	12	0.35
(1,323)	1:A:64:ARG:H	1:A:80:CYS:HB2	2	0.35
(1,323)	1:A:64:ARG:H	1:A:80:CYS:HB3	2	0.35
(1,319)	1:A:16:VAL:H	1:A:9:VAL:HA	20	0.35
(1,296)	1:A:10:CYS:HB2	1:A:10:CYS:H	5	0.35
(1,296)	1:A:10:CYS:HB3	1:A:10:CYS:H	5	0.35
(1,296)	1:A:10:CYS:HB2	1:A:10:CYS:H	10	0.35
(1,296)	1:A:10:CYS:HB3	1:A:10:CYS:H	10	0.35
(1,296)	1:A:10:CYS:HB2	1:A:10:CYS:H	14	0.35
(1,296)	1:A:10:CYS:HB3	1:A:10:CYS:H	14	0.35
(1,293)	1:A:8:PHE:HB2	1:A:9:VAL:H	11	0.35
(1,293)	1:A:8:PHE:HB3	1:A:9:VAL:H	11	0.35
(1,281)	1:A:5:GLU:HB2	1:A:6:SER:H	2	0.35
(1,281)	1:A:5:GLU:HB2	1:A:6:SER:H	2	0.35
(1,281)	1:A:5:GLU:HB3	1:A:6:SER:H	2	0.35
(1,281)	1:A:5:GLU:HB3	1:A:6:SER:H	2	0.35
(1,281)	1:A:5:GLU:HB2	1:A:6:SER:H	5	0.35
(1,281)	1:A:5:GLU:HB2	1:A:6:SER:H	5	0.35
(1,281)	1:A:5:GLU:HB3	1:A:6:SER:H	5	0.35
(1,281)	1:A:5:GLU:HB3	1:A:6:SER:H	5	0.35
(1,280)	1:A:5:GLU:HG2	1:A:6:SER:H	5	0.35

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,280)	1:A:5:GLU:HG2	1:A:6:SER:H	5	0.35
(1,280)	1:A:5:GLU:HG3	1:A:6:SER:H	5	0.35
(1,280)	1:A:5:GLU:HG3	1:A:6:SER:H	5	0.35
(1,280)	1:A:5:GLU:HG2	1:A:6:SER:H	18	0.35
(1,280)	1:A:5:GLU:HG2	1:A:6:SER:H	18	0.35
(1,280)	1:A:5:GLU:HG3	1:A:6:SER:H	18	0.35
(1,280)	1:A:5:GLU:HG3	1:A:6:SER:H	18	0.35
(1,24)	1:A:104:CYS:H	1:A:105:ASN:H	11	0.35
(1,24)	1:A:104:CYS:H	1:A:105:ASN:H	12	0.35
(1,24)	1:A:104:CYS:H	1:A:105:ASN:H	15	0.35
(1,23)	1:A:104:CYS:H	1:A:105:ASN:H	11	0.35
(1,23)	1:A:104:CYS:H	1:A:105:ASN:H	12	0.35
(1,23)	1:A:104:CYS:H	1:A:105:ASN:H	15	0.35
(1,228)	1:A:92:CYS:HB2	1:A:93:SER:H	15	0.35
(1,228)	1:A:92:CYS:HB3	1:A:93:SER:H	15	0.35
(1,189)	1:A:101:ASN:HB2	1:A:101:ASN:H	8	0.35
(1,189)	1:A:101:ASN:HB3	1:A:101:ASN:H	8	0.35
(1,189)	1:A:101:ASN:HB2	1:A:101:ASN:H	19	0.35
(1,189)	1:A:101:ASN:HB3	1:A:101:ASN:H	19	0.35
(1,174)	1:A:103:VAL:H	1:A:101:ASN:HB2	5	0.35
(1,174)	1:A:103:VAL:H	1:A:101:ASN:HB3	5	0.35
(1,17)	1:A:81:GLY:H	1:A:80:CYS:H	9	0.35
(1,17)	1:A:81:GLY:H	1:A:80:CYS:H	19	0.35
(1,158)	1:A:104:CYS:HA	1:A:105:ASN:H	1	0.35
(1,158)	1:A:104:CYS:HA	1:A:105:ASN:H	20	0.35
(1,14)	1:A:110:CYS:H	1:A:109:ASP:H	11	0.35
(1,14)	1:A:110:CYS:H	1:A:109:ASP:H	12	0.35
(1,134)	1:A:110:CYS:H	1:A:109:ASP:HB2	8	0.35
(1,134)	1:A:110:CYS:H	1:A:109:ASP:HB2	8	0.35
(1,134)	1:A:110:CYS:H	1:A:109:ASP:HB3	8	0.35
(1,134)	1:A:110:CYS:H	1:A:109:ASP:HB3	8	0.35
(1,118)	1:A:115:ASP:H	1:A:113:GLY:H	5	0.35
(4,7)	1:A:8:PHE:H	1:A:16:VAL:O	2	0.34
(2,98)	1:A:28:CYS:HB2	1:A:11:ASN:H	10	0.34
(2,98)	1:A:28:CYS:HB3	1:A:11:ASN:H	10	0.34
(2,98)	1:A:32:SER:HB2	1:A:11:ASN:H	10	0.34
(2,98)	1:A:32:SER:HB3	1:A:11:ASN:H	10	0.34
(2,76)	1:A:28:CYS:HB2	1:A:32:SER:H	18	0.34
(2,76)	1:A:28:CYS:HB3	1:A:32:SER:H	18	0.34
(2,76)	1:A:29:GLU:HA	1:A:32:SER:H	18	0.34
(2,76)	1:A:32:SER:HA	1:A:32:SER:H	18	0.34
(2,76)	1:A:32:SER:HB2	1:A:32:SER:H	18	0.34

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,76)	1:A:32:SER:HB3	1:A:32:SER:H	18	0.34
(2,76)	1:A:33:ASP:HA	1:A:32:SER:H	18	0.34
(2,76)	1:A:35:SER:HB2	1:A:32:SER:H	18	0.34
(2,76)	1:A:35:SER:HB3	1:A:32:SER:H	18	0.34
(2,72)	1:A:110:CYS:HB2	1:A:113:GLY:H	13	0.34
(2,72)	1:A:110:CYS:HB3	1:A:113:GLY:H	13	0.34
(2,72)	1:A:112:ASP:HB2	1:A:113:GLY:H	13	0.34
(2,72)	1:A:112:ASP:HB3	1:A:113:GLY:H	13	0.34
(2,64)	1:A:45:ARG:HB2	1:A:46:ILE:H	16	0.34
(2,64)	1:A:45:ARG:HB3	1:A:46:ILE:H	16	0.34
(2,64)	1:A:46:ILE:HG12	1:A:46:ILE:H	16	0.34
(2,64)	1:A:46:ILE:HG13	1:A:46:ILE:H	16	0.34
(2,388)	1:A:64:ARG:HD2	1:A:68:GLU:H	13	0.34
(2,388)	1:A:64:ARG:HD3	1:A:68:GLU:H	13	0.34
(2,388)	1:A:66:ASP:HB2	1:A:68:GLU:H	13	0.34
(2,388)	1:A:66:ASP:HB3	1:A:68:GLU:H	13	0.34
(2,377)	1:A:33:ASP:HB2	1:A:33:ASP:H	15	0.34
(2,377)	1:A:33:ASP:HB3	1:A:33:ASP:H	15	0.34
(2,377)	1:A:34:GLU:HB2	1:A:33:ASP:H	15	0.34
(2,377)	1:A:34:GLU:HB3	1:A:33:ASP:H	15	0.34
(2,359)	1:A:83:ILE:HD11	1:A:98:ILE:H	5	0.34
(2,359)	1:A:83:ILE:HD12	1:A:98:ILE:H	5	0.34
(2,359)	1:A:83:ILE:HD13	1:A:98:ILE:H	5	0.34
(2,359)	1:A:98:ILE:HD11	1:A:98:ILE:H	5	0.34
(2,359)	1:A:98:ILE:HD12	1:A:98:ILE:H	5	0.34
(2,359)	1:A:98:ILE:HD13	1:A:98:ILE:H	5	0.34
(2,359)	1:A:83:ILE:HD11	1:A:98:ILE:H	17	0.34
(2,359)	1:A:83:ILE:HD12	1:A:98:ILE:H	17	0.34
(2,359)	1:A:83:ILE:HD13	1:A:98:ILE:H	17	0.34
(2,359)	1:A:98:ILE:HD11	1:A:98:ILE:H	17	0.34
(2,359)	1:A:98:ILE:HD12	1:A:98:ILE:H	17	0.34
(2,359)	1:A:98:ILE:HD13	1:A:98:ILE:H	17	0.34
(2,341)	1:A:78:GLU:HG2	1:A:78:GLU:H	17	0.34
(2,341)	1:A:78:GLU:HG3	1:A:78:GLU:H	17	0.34
(2,341)	1:A:87:PRO:HB2	1:A:78:GLU:H	17	0.34
(2,341)	1:A:87:PRO:HB3	1:A:78:GLU:H	17	0.34
(2,306)	1:A:71:CYS:HB2	1:A:77:GLU:H	1	0.34
(2,306)	1:A:71:CYS:HB3	1:A:77:GLU:H	1	0.34
(2,306)	1:A:80:CYS:HB2	1:A:77:GLU:H	1	0.34
(2,306)	1:A:80:CYS:HB3	1:A:77:GLU:H	1	0.34
(2,292)	1:A:3:CYS:HB2	1:A:8:PHE:H	19	0.34
(2,292)	1:A:3:CYS:HB3	1:A:8:PHE:H	19	0.34

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,292)	1:A:7:ASP:HB2	1:A:8:PHE:H	19	0.34
(2,292)	1:A:7:ASP:HB3	1:A:8:PHE:H	19	0.34
(2,292)	1:A:8:PHE:HB2	1:A:8:PHE:H	19	0.34
(2,292)	1:A:8:PHE:HB3	1:A:8:PHE:H	19	0.34
(2,285)	1:A:109:ASP:HB2	1:A:112:ASP:H	11	0.34
(2,285)	1:A:109:ASP:HB3	1:A:112:ASP:H	11	0.34
(2,285)	1:A:112:ASP:HB2	1:A:112:ASP:H	11	0.34
(2,285)	1:A:112:ASP:HB3	1:A:112:ASP:H	11	0.34
(2,285)	1:A:109:ASP:HB2	1:A:112:ASP:H	12	0.34
(2,285)	1:A:109:ASP:HB3	1:A:112:ASP:H	12	0.34
(2,285)	1:A:112:ASP:HB2	1:A:112:ASP:H	12	0.34
(2,285)	1:A:112:ASP:HB3	1:A:112:ASP:H	12	0.34
(2,285)	1:A:109:ASP:HB2	1:A:112:ASP:H	14	0.34
(2,285)	1:A:109:ASP:HB3	1:A:112:ASP:H	14	0.34
(2,285)	1:A:112:ASP:HB2	1:A:112:ASP:H	14	0.34
(2,285)	1:A:112:ASP:HB3	1:A:112:ASP:H	14	0.34
(2,266)	1:A:31:GLY:HA2	1:A:32:SER:H	17	0.34
(2,266)	1:A:31:GLY:HA3	1:A:32:SER:H	17	0.34
(2,266)	1:A:32:SER:HB2	1:A:32:SER:H	17	0.34
(2,266)	1:A:32:SER:HB3	1:A:32:SER:H	17	0.34
(2,262)	1:A:51:CYS:HB2	1:A:74:GLY:H	16	0.34
(2,262)	1:A:51:CYS:HB3	1:A:74:GLY:H	16	0.34
(2,262)	1:A:71:CYS:HB2	1:A:74:GLY:H	16	0.34
(2,262)	1:A:71:CYS:HB3	1:A:74:GLY:H	16	0.34
(2,244)	1:A:45:ARG:HA	1:A:47:HIS:H	17	0.34
(2,244)	1:A:60:PRO:HA	1:A:47:HIS:H	17	0.34
(2,216)	1:A:49:ILE:HD11	1:A:50:SER:H	1	0.34
(2,216)	1:A:49:ILE:HD12	1:A:50:SER:H	1	0.34
(2,216)	1:A:49:ILE:HD13	1:A:50:SER:H	1	0.34
(2,216)	1:A:49:ILE:HG12	1:A:50:SER:H	1	0.34
(2,216)	1:A:49:ILE:HG13	1:A:50:SER:H	1	0.34
(2,216)	1:A:49:ILE:HG21	1:A:50:SER:H	1	0.34
(2,216)	1:A:49:ILE:HG22	1:A:50:SER:H	1	0.34
(2,216)	1:A:49:ILE:HG23	1:A:50:SER:H	1	0.34
(2,216)	1:A:49:ILE:HD11	1:A:50:SER:H	17	0.34
(2,216)	1:A:49:ILE:HD12	1:A:50:SER:H	17	0.34
(2,216)	1:A:49:ILE:HD13	1:A:50:SER:H	17	0.34
(2,216)	1:A:49:ILE:HG12	1:A:50:SER:H	17	0.34
(2,216)	1:A:49:ILE:HG13	1:A:50:SER:H	17	0.34
(2,216)	1:A:49:ILE:HG21	1:A:50:SER:H	17	0.34
(2,216)	1:A:49:ILE:HG22	1:A:50:SER:H	17	0.34
(2,216)	1:A:49:ILE:HG23	1:A:50:SER:H	17	0.34

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,20)	1:A:82:ASN:H	1:A:83:ILE:H	16	0.34
(2,20)	1:A:85:CYS:H	1:A:83:ILE:H	16	0.34
(2,164)	1:A:14:GLN:HB2	1:A:14:GLN:H	1	0.34
(2,164)	1:A:14:GLN:HB3	1:A:14:GLN:H	1	0.34
(2,163)	1:A:71:CYS:HA	1:A:77:GLU:H	4	0.34
(2,163)	1:A:77:GLU:HA	1:A:77:GLU:H	4	0.34
(2,160)	1:A:43:THR:HG1	1:A:43:THR:H	4	0.34
(2,160)	1:A:43:THR:HG1	1:A:43:THR:H	4	0.34
(2,160)	1:A:43:THR:HG21	1:A:43:THR:H	4	0.34
(2,160)	1:A:43:THR:HG21	1:A:43:THR:H	4	0.34
(2,160)	1:A:43:THR:HG22	1:A:43:THR:H	4	0.34
(2,160)	1:A:43:THR:HG22	1:A:43:THR:H	4	0.34
(2,160)	1:A:43:THR:HG23	1:A:43:THR:H	4	0.34
(2,160)	1:A:43:THR:HG23	1:A:43:THR:H	4	0.34
(2,160)	1:A:56:THR:HG1	1:A:43:THR:H	4	0.34
(2,160)	1:A:56:THR:HG21	1:A:43:THR:H	4	0.34
(2,160)	1:A:56:THR:HG22	1:A:43:THR:H	4	0.34
(2,160)	1:A:56:THR:HG23	1:A:43:THR:H	4	0.34
(2,160)	1:A:43:THR:HG1	1:A:43:THR:H	15	0.34
(2,160)	1:A:43:THR:HG1	1:A:43:THR:H	15	0.34
(2,160)	1:A:43:THR:HG21	1:A:43:THR:H	15	0.34
(2,160)	1:A:43:THR:HG21	1:A:43:THR:H	15	0.34
(2,160)	1:A:43:THR:HG22	1:A:43:THR:H	15	0.34
(2,160)	1:A:43:THR:HG22	1:A:43:THR:H	15	0.34
(2,160)	1:A:43:THR:HG23	1:A:43:THR:H	15	0.34
(2,160)	1:A:43:THR:HG23	1:A:43:THR:H	15	0.34
(2,160)	1:A:56:THR:HG1	1:A:43:THR:H	15	0.34
(2,160)	1:A:56:THR:HG21	1:A:43:THR:H	15	0.34
(2,160)	1:A:56:THR:HG22	1:A:43:THR:H	15	0.34
(2,160)	1:A:56:THR:HG23	1:A:43:THR:H	15	0.34
(2,137)	1:A:116:GLU:HB2	1:A:117:LEU:H	7	0.34
(2,137)	1:A:116:GLU:HB3	1:A:117:LEU:H	7	0.34
(2,137)	1:A:117:LEU:HB2	1:A:117:LEU:H	7	0.34
(2,137)	1:A:117:LEU:HB3	1:A:117:LEU:H	7	0.34
(2,124)	1:A:43:THR:HG1	1:A:57:GLN:H	11	0.34
(2,124)	1:A:43:THR:HG1	1:A:57:GLN:H	11	0.34
(2,124)	1:A:43:THR:HG21	1:A:57:GLN:H	11	0.34
(2,124)	1:A:43:THR:HG21	1:A:57:GLN:H	11	0.34
(2,124)	1:A:43:THR:HG22	1:A:57:GLN:H	11	0.34
(2,124)	1:A:43:THR:HG22	1:A:57:GLN:H	11	0.34
(2,124)	1:A:43:THR:HG23	1:A:57:GLN:H	11	0.34
(2,124)	1:A:43:THR:HG23	1:A:57:GLN:H	11	0.34

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,124)	1:A:56:THR:HG1	1:A:57:GLN:H	11	0.34
(2,124)	1:A:56:THR:HG21	1:A:57:GLN:H	11	0.34
(2,124)	1:A:56:THR:HG21	1:A:57:GLN:H	11	0.34
(2,124)	1:A:56:THR:HG22	1:A:57:GLN:H	11	0.34
(2,124)	1:A:56:THR:HG22	1:A:57:GLN:H	11	0.34
(2,124)	1:A:56:THR:HG23	1:A:57:GLN:H	11	0.34
(2,124)	1:A:56:THR:HG23	1:A:57:GLN:H	11	0.34
(1,98)	1:A:98:ILE:HG12	1:A:99:SER:H	12	0.34
(1,98)	1:A:98:ILE:HG13	1:A:99:SER:H	12	0.34
(1,907)	1:A:39:CYS:H	1:A:41:MET:H	5	0.34
(1,907)	1:A:39:CYS:H	1:A:41:MET:H	11	0.34
(1,907)	1:A:39:CYS:H	1:A:41:MET:H	13	0.34
(1,907)	1:A:39:CYS:H	1:A:41:MET:H	18	0.34
(1,898)	1:A:57:GLN:HE22	1:A:71:CYS:H	8	0.34
(1,898)	1:A:57:GLN:HE22	1:A:71:CYS:H	18	0.34
(1,888)	1:A:49:ILE:HA	1:A:61:VAL:H	11	0.34
(1,884)	1:A:50:SER:H	1:A:59:ILE:H	1	0.34
(1,881)	1:A:48:GLU:H	1:A:45:ARG:H	16	0.34
(1,880)	1:A:45:ARG:HD2	1:A:46:ILE:H	12	0.34
(1,880)	1:A:45:ARG:HD3	1:A:46:ILE:H	12	0.34
(1,879)	1:A:48:GLU:H	1:A:45:ARG:H	16	0.34
(1,860)	1:A:16:VAL:HB	1:A:19:ARG:H	14	0.34
(1,856)	1:A:14:GLN:H	1:A:12:ASN:HD22	6	0.34
(1,853)	1:A:10:CYS:HB2	1:A:12:ASN:H	8	0.34
(1,853)	1:A:10:CYS:HB3	1:A:12:ASN:H	8	0.34
(1,833)	1:A:42:ARG:HG2	1:A:41:MET:H	4	0.34
(1,833)	1:A:42:ARG:HG2	1:A:41:MET:H	4	0.34
(1,833)	1:A:42:ARG:HG3	1:A:41:MET:H	4	0.34
(1,833)	1:A:42:ARG:HG3	1:A:41:MET:H	4	0.34
(1,833)	1:A:42:ARG:HG2	1:A:41:MET:H	12	0.34
(1,833)	1:A:42:ARG:HG2	1:A:41:MET:H	12	0.34
(1,833)	1:A:42:ARG:HG3	1:A:41:MET:H	12	0.34
(1,833)	1:A:42:ARG:HG3	1:A:41:MET:H	12	0.34
(1,831)	1:A:73:SER:H	1:A:75:GLU:H	19	0.34
(1,820)	1:A:110:CYS:H	1:A:115:ASP:H	5	0.34
(1,81)	1:A:28:CYS:HA	1:A:33:ASP:H	11	0.34
(1,803)	1:A:101:ASN:HD21	1:A:99:SER:H	7	0.34
(1,80)	1:A:44:CYS:HB2	1:A:45:ARG:H	19	0.34
(1,80)	1:A:44:CYS:HB3	1:A:45:ARG:H	19	0.34
(1,799)	1:A:85:CYS:HA	1:A:97:CYS:H	18	0.34
(1,789)	1:A:85:CYS:H	1:A:84:THR:HB	8	0.34
(1,789)	1:A:85:CYS:H	1:A:84:THR:HB	14	0.34

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,788)	1:A:80:CYS:H	1:A:78:GLU:H	4	0.34
(1,772)	1:A:68:GLU:H	1:A:64:ARG:H	7	0.34
(1,766)	1:A:48:GLU:HB2	1:A:58:CYS:H	16	0.34
(1,766)	1:A:48:GLU:HB3	1:A:58:CYS:H	16	0.34
(1,740)	1:A:35:SER:H	1:A:56:THR:HG1	5	0.34
(1,740)	1:A:35:SER:H	1:A:56:THR:HG21	5	0.34
(1,740)	1:A:35:SER:H	1:A:56:THR:HG22	5	0.34
(1,740)	1:A:35:SER:H	1:A:56:THR:HG23	5	0.34
(1,740)	1:A:35:SER:H	1:A:56:THR:HG1	11	0.34
(1,740)	1:A:35:SER:H	1:A:56:THR:HG21	11	0.34
(1,740)	1:A:35:SER:H	1:A:56:THR:HG22	11	0.34
(1,740)	1:A:35:SER:H	1:A:56:THR:HG23	11	0.34
(1,735)	1:A:28:CYS:HB2	1:A:33:ASP:H	12	0.34
(1,735)	1:A:28:CYS:HB3	1:A:33:ASP:H	12	0.34
(1,733)	1:A:32:SER:H	1:A:28:CYS:H	17	0.34
(1,73)	1:A:65:CYS:HB2	1:A:65:CYS:H	17	0.34
(1,73)	1:A:65:CYS:HB3	1:A:65:CYS:H	17	0.34
(1,729)	1:A:32:SER:H	1:A:28:CYS:H	17	0.34
(1,710)	1:A:8:PHE:H	1:A:21:LYS:HD2	13	0.34
(1,710)	1:A:8:PHE:H	1:A:21:LYS:HD3	13	0.34
(1,706)	1:A:45:ARG:HB2	1:A:45:ARG:H	3	0.34
(1,706)	1:A:45:ARG:HB3	1:A:45:ARG:H	3	0.34
(1,693)	1:A:21:LYS:HD2	1:A:21:LYS:H	1	0.34
(1,693)	1:A:21:LYS:HD3	1:A:21:LYS:H	1	0.34
(1,693)	1:A:21:LYS:HD2	1:A:21:LYS:H	2	0.34
(1,693)	1:A:21:LYS:HD3	1:A:21:LYS:H	2	0.34
(1,693)	1:A:21:LYS:HD2	1:A:21:LYS:H	12	0.34
(1,693)	1:A:21:LYS:HD3	1:A:21:LYS:H	12	0.34
(1,643)	1:A:82:ASN:HB2	1:A:82:ASN:HD21	7	0.34
(1,643)	1:A:82:ASN:HB2	1:A:82:ASN:HD21	7	0.34
(1,643)	1:A:82:ASN:HB3	1:A:82:ASN:HD21	7	0.34
(1,643)	1:A:82:ASN:HB3	1:A:82:ASN:HD21	7	0.34
(1,643)	1:A:82:ASN:HB2	1:A:82:ASN:HD21	9	0.34
(1,643)	1:A:82:ASN:HB2	1:A:82:ASN:HD21	9	0.34
(1,643)	1:A:82:ASN:HB3	1:A:82:ASN:HD21	9	0.34
(1,643)	1:A:82:ASN:HB3	1:A:82:ASN:HD21	9	0.34
(1,643)	1:A:82:ASN:HB2	1:A:82:ASN:HD21	11	0.34
(1,643)	1:A:82:ASN:HB2	1:A:82:ASN:HD21	11	0.34
(1,643)	1:A:82:ASN:HB3	1:A:82:ASN:HD21	11	0.34
(1,643)	1:A:82:ASN:HB3	1:A:82:ASN:HD21	11	0.34
(1,642)	1:A:82:ASN:HA	1:A:82:ASN:HD22	9	0.34
(1,635)	1:A:78:GLU:HB2	1:A:79:ASN:HD21	19	0.34

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,635)	1:A:78:GLU:HB2	1:A:79:ASN:HD21	19	0.34
(1,635)	1:A:78:GLU:HB3	1:A:79:ASN:HD21	19	0.34
(1,635)	1:A:78:GLU:HB3	1:A:79:ASN:HD21	19	0.34
(1,60)	1:A:56:THR:H	1:A:57:GLN:H	15	0.34
(1,596)	1:A:74:GLY:HA2	1:A:69:ASN:HD21	1	0.34
(1,596)	1:A:74:GLY:HA3	1:A:69:ASN:HD21	1	0.34
(1,596)	1:A:74:GLY:HA2	1:A:69:ASN:HD21	5	0.34
(1,596)	1:A:74:GLY:HA3	1:A:69:ASN:HD21	5	0.34
(1,585)	1:A:28:CYS:H	1:A:27:ASP:H	13	0.34
(1,585)	1:A:28:CYS:H	1:A:27:ASP:H	20	0.34
(1,582)	1:A:46:ILE:H	1:A:45:ARG:H	4	0.34
(1,54)	1:A:73:SER:H	1:A:74:GLY:H	6	0.34
(1,526)	1:A:64:ARG:H	1:A:67:GLY:H	7	0.34
(1,526)	1:A:64:ARG:H	1:A:67:GLY:H	10	0.34
(1,480)	1:A:10:CYS:HB2	1:A:10:CYS:H	4	0.34
(1,480)	1:A:10:CYS:HB3	1:A:10:CYS:H	4	0.34
(1,466)	1:A:80:CYS:HA	1:A:79:ASN:H	17	0.34
(1,454)	1:A:78:GLU:HG2	1:A:76:ASP:H	1	0.34
(1,454)	1:A:78:GLU:HG3	1:A:76:ASP:H	1	0.34
(1,436)	1:A:73:SER:H	1:A:72:ASP:H	16	0.34
(1,399)	1:A:54:HIS:H	1:A:53:ALA:HB1	12	0.34
(1,399)	1:A:54:HIS:H	1:A:53:ALA:HB2	12	0.34
(1,399)	1:A:54:HIS:H	1:A:53:ALA:HB3	12	0.34
(1,399)	1:A:54:HIS:H	1:A:53:ALA:HB1	18	0.34
(1,399)	1:A:54:HIS:H	1:A:53:ALA:HB2	18	0.34
(1,399)	1:A:54:HIS:H	1:A:53:ALA:HB3	18	0.34
(1,376)	1:A:49:ILE:HA	1:A:49:ILE:H	12	0.34
(1,376)	1:A:49:ILE:HA	1:A:49:ILE:H	15	0.34
(1,376)	1:A:49:ILE:HA	1:A:49:ILE:H	18	0.34
(1,375)	1:A:48:GLU:HA	1:A:49:ILE:H	16	0.34
(1,366)	1:A:42:ARG:HB2	1:A:43:THR:H	20	0.34
(1,366)	1:A:42:ARG:HB2	1:A:43:THR:H	20	0.34
(1,366)	1:A:42:ARG:HB3	1:A:43:THR:H	20	0.34
(1,366)	1:A:42:ARG:HB3	1:A:43:THR:H	20	0.34
(1,365)	1:A:43:THR:HB	1:A:43:THR:H	2	0.34
(1,351)	1:A:32:SER:H	1:A:33:ASP:H	14	0.34
(1,349)	1:A:32:SER:H	1:A:33:ASP:H	14	0.34
(1,320)	1:A:7:ASP:HA	1:A:18:SER:H	2	0.34
(1,298)	1:A:14:GLN:H	1:A:11:ASN:H	15	0.34
(1,296)	1:A:10:CYS:HB2	1:A:10:CYS:H	1	0.34
(1,296)	1:A:10:CYS:HB3	1:A:10:CYS:H	1	0.34
(1,296)	1:A:10:CYS:HB2	1:A:10:CYS:H	19	0.34

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,296)	1:A:10:CYS:HB3	1:A:10:CYS:H	19	0.34
(1,295)	1:A:15:CYS:HA	1:A:10:CYS:H	11	0.34
(1,28)	1:A:118:ASP:H	1:A:117:LEU:H	19	0.34
(1,24)	1:A:104:CYS:H	1:A:105:ASN:H	13	0.34
(1,24)	1:A:104:CYS:H	1:A:105:ASN:H	20	0.34
(1,23)	1:A:104:CYS:H	1:A:105:ASN:H	13	0.34
(1,23)	1:A:104:CYS:H	1:A:105:ASN:H	20	0.34
(1,228)	1:A:92:CYS:HB2	1:A:93:SER:H	10	0.34
(1,228)	1:A:92:CYS:HB3	1:A:93:SER:H	10	0.34
(1,224)	1:A:92:CYS:HA	1:A:94:SER:H	16	0.34
(1,224)	1:A:92:CYS:HA	1:A:94:SER:H	19	0.34
(1,205)	1:A:98:ILE:HG12	1:A:98:ILE:H	2	0.34
(1,205)	1:A:98:ILE:HG13	1:A:98:ILE:H	2	0.34
(1,205)	1:A:98:ILE:HG12	1:A:98:ILE:H	3	0.34
(1,205)	1:A:98:ILE:HG13	1:A:98:ILE:H	3	0.34
(1,189)	1:A:101:ASN:HB2	1:A:101:ASN:H	1	0.34
(1,189)	1:A:101:ASN:HB3	1:A:101:ASN:H	1	0.34
(1,189)	1:A:101:ASN:HB2	1:A:101:ASN:H	17	0.34
(1,189)	1:A:101:ASN:HB3	1:A:101:ASN:H	17	0.34
(1,165)	1:A:104:CYS:H	1:A:116:GLU:HA	17	0.34
(1,14)	1:A:110:CYS:H	1:A:109:ASP:H	18	0.34
(1,14)	1:A:110:CYS:H	1:A:109:ASP:H	20	0.34
(4,8)	1:A:8:PHE:O	1:A:16:VAL:H	4	0.33
(4,8)	1:A:8:PHE:O	1:A:16:VAL:H	8	0.33
(4,8)	1:A:8:PHE:O	1:A:16:VAL:H	14	0.33
(2,54)	1:A:17:PRO:HB2	1:A:18:SER:H	19	0.33
(2,54)	1:A:17:PRO:HB3	1:A:18:SER:H	19	0.33
(2,54)	1:A:17:PRO:HG2	1:A:18:SER:H	19	0.33
(2,54)	1:A:17:PRO:HG3	1:A:18:SER:H	19	0.33
(2,388)	1:A:64:ARG:HD2	1:A:68:GLU:H	17	0.33
(2,388)	1:A:64:ARG:HD3	1:A:68:GLU:H	17	0.33
(2,388)	1:A:66:ASP:HB2	1:A:68:GLU:H	17	0.33
(2,388)	1:A:66:ASP:HB3	1:A:68:GLU:H	17	0.33
(2,377)	1:A:33:ASP:HB2	1:A:33:ASP:H	20	0.33
(2,377)	1:A:33:ASP:HB3	1:A:33:ASP:H	20	0.33
(2,377)	1:A:34:GLU:HB2	1:A:33:ASP:H	20	0.33
(2,377)	1:A:34:GLU:HB3	1:A:33:ASP:H	20	0.33
(2,375)	1:A:48:GLU:HB2	1:A:61:VAL:H	14	0.33
(2,375)	1:A:48:GLU:HB3	1:A:61:VAL:H	14	0.33
(2,375)	1:A:60:PRO:HD3	1:A:61:VAL:H	14	0.33
(2,359)	1:A:83:ILE:HD11	1:A:98:ILE:H	6	0.33
(2,359)	1:A:83:ILE:HD12	1:A:98:ILE:H	6	0.33

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,359)	1:A:83:ILE:HD13	1:A:98:ILE:H	6	0.33
(2,359)	1:A:98:ILE:HD11	1:A:98:ILE:H	6	0.33
(2,359)	1:A:98:ILE:HD12	1:A:98:ILE:H	6	0.33
(2,359)	1:A:98:ILE:HD13	1:A:98:ILE:H	6	0.33
(2,342)	1:A:17:PRO:HB2	1:A:20:TRP:HE1	20	0.33
(2,342)	1:A:17:PRO:HB3	1:A:20:TRP:HE1	20	0.33
(2,342)	1:A:19:ARG:HB2	1:A:20:TRP:HE1	20	0.33
(2,342)	1:A:19:ARG:HB3	1:A:20:TRP:HE1	20	0.33
(2,341)	1:A:78:GLU:HG2	1:A:78:GLU:H	15	0.33
(2,341)	1:A:78:GLU:HG3	1:A:78:GLU:H	15	0.33
(2,341)	1:A:87:PRO:HB2	1:A:78:GLU:H	15	0.33
(2,341)	1:A:87:PRO:HB3	1:A:78:GLU:H	15	0.33
(2,323)	1:A:64:ARG:HG2	1:A:68:GLU:H	19	0.33
(2,323)	1:A:64:ARG:HG3	1:A:68:GLU:H	19	0.33
(2,323)	1:A:68:GLU:HG3	1:A:68:GLU:H	19	0.33
(2,306)	1:A:71:CYS:HB2	1:A:77:GLU:H	16	0.33
(2,306)	1:A:71:CYS:HB3	1:A:77:GLU:H	16	0.33
(2,306)	1:A:80:CYS:HB2	1:A:77:GLU:H	16	0.33
(2,306)	1:A:80:CYS:HB3	1:A:77:GLU:H	16	0.33
(2,285)	1:A:109:ASP:HB2	1:A:112:ASP:H	20	0.33
(2,285)	1:A:109:ASP:HB3	1:A:112:ASP:H	20	0.33
(2,285)	1:A:112:ASP:HB2	1:A:112:ASP:H	20	0.33
(2,285)	1:A:112:ASP:HB3	1:A:112:ASP:H	20	0.33
(2,267)	1:A:19:ARG:HG2	1:A:20:TRP:H	19	0.33
(2,267)	1:A:19:ARG:HG2	1:A:20:TRP:H	19	0.33
(2,267)	1:A:19:ARG:HG3	1:A:20:TRP:H	19	0.33
(2,267)	1:A:19:ARG:HG3	1:A:20:TRP:H	19	0.33
(2,267)	1:A:21:LYS:HB2	1:A:20:TRP:H	19	0.33
(2,267)	1:A:21:LYS:HB3	1:A:20:TRP:H	19	0.33
(2,267)	1:A:21:LYS:HD2	1:A:20:TRP:H	19	0.33
(2,262)	1:A:51:CYS:HB2	1:A:74:GLY:H	1	0.33
(2,262)	1:A:51:CYS:HB3	1:A:74:GLY:H	1	0.33
(2,262)	1:A:71:CYS:HB2	1:A:74:GLY:H	1	0.33
(2,262)	1:A:71:CYS:HB3	1:A:74:GLY:H	1	0.33
(2,244)	1:A:45:ARG:HA	1:A:47:HIS:H	9	0.33
(2,244)	1:A:60:PRO:HA	1:A:47:HIS:H	9	0.33
(2,244)	1:A:45:ARG:HA	1:A:47:HIS:H	20	0.33
(2,244)	1:A:60:PRO:HA	1:A:47:HIS:H	20	0.33
(2,24)	1:A:11:ASN:HB2	1:A:11:ASN:H	5	0.33
(2,24)	1:A:11:ASN:HB3	1:A:11:ASN:H	5	0.33
(2,24)	1:A:12:ASN:HB2	1:A:11:ASN:H	5	0.33
(2,24)	1:A:11:ASN:HB2	1:A:11:ASN:H	9	0.33

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,24)	1:A:11:ASN:HB3	1:A:11:ASN:H	9	0.33
(2,24)	1:A:12:ASN:HB2	1:A:11:ASN:H	9	0.33
(2,228)	1:A:28:CYS:HB2	1:A:28:CYS:H	17	0.33
(2,228)	1:A:28:CYS:HB3	1:A:28:CYS:H	17	0.33
(2,228)	1:A:29:GLU:HA	1:A:28:CYS:H	17	0.33
(2,228)	1:A:32:SER:HA	1:A:28:CYS:H	17	0.33
(2,227)	1:A:19:ARG:HG2	1:A:21:LYS:H	1	0.33
(2,227)	1:A:19:ARG:HG2	1:A:21:LYS:H	1	0.33
(2,227)	1:A:19:ARG:HG3	1:A:21:LYS:H	1	0.33
(2,227)	1:A:19:ARG:HG3	1:A:21:LYS:H	1	0.33
(2,227)	1:A:21:LYS:HB2	1:A:21:LYS:H	1	0.33
(2,227)	1:A:21:LYS:HB3	1:A:21:LYS:H	1	0.33
(2,227)	1:A:21:LYS:HD2	1:A:21:LYS:H	1	0.33
(2,227)	1:A:21:LYS:HD3	1:A:21:LYS:H	1	0.33
(2,227)	1:A:19:ARG:HG2	1:A:21:LYS:H	13	0.33
(2,227)	1:A:19:ARG:HG2	1:A:21:LYS:H	13	0.33
(2,227)	1:A:19:ARG:HG3	1:A:21:LYS:H	13	0.33
(2,227)	1:A:19:ARG:HG3	1:A:21:LYS:H	13	0.33
(2,227)	1:A:21:LYS:HB2	1:A:21:LYS:H	13	0.33
(2,227)	1:A:21:LYS:HB3	1:A:21:LYS:H	13	0.33
(2,227)	1:A:21:LYS:HD2	1:A:21:LYS:H	13	0.33
(2,227)	1:A:21:LYS:HD3	1:A:21:LYS:H	13	0.33
(2,22)	1:A:75:GLU:HA	1:A:78:GLU:H	4	0.33
(2,22)	1:A:87:PRO:HD2	1:A:78:GLU:H	4	0.33
(2,193)	1:A:98:ILE:HD11	1:A:109:ASP:H	19	0.33
(2,193)	1:A:98:ILE:HD12	1:A:109:ASP:H	19	0.33
(2,193)	1:A:98:ILE:HD13	1:A:109:ASP:H	19	0.33
(2,193)	1:A:117:LEU:HD11	1:A:109:ASP:H	19	0.33
(2,193)	1:A:117:LEU:HD12	1:A:109:ASP:H	19	0.33
(2,193)	1:A:117:LEU:HD13	1:A:109:ASP:H	19	0.33
(2,193)	1:A:117:LEU:HD21	1:A:109:ASP:H	19	0.33
(2,193)	1:A:117:LEU:HD22	1:A:109:ASP:H	19	0.33
(2,193)	1:A:117:LEU:HD23	1:A:109:ASP:H	19	0.33
(2,190)	1:A:55:SER:HA	1:A:57:GLN:H	11	0.33
(2,190)	1:A:56:THR:HA	1:A:57:GLN:H	11	0.33
(2,188)	1:A:16:VAL:HG11	1:A:19:ARG:H	1	0.33
(2,188)	1:A:16:VAL:HG12	1:A:19:ARG:H	1	0.33
(2,188)	1:A:16:VAL:HG13	1:A:19:ARG:H	1	0.33
(2,188)	1:A:16:VAL:HG21	1:A:19:ARG:H	1	0.33
(2,188)	1:A:16:VAL:HG22	1:A:19:ARG:H	1	0.33
(2,188)	1:A:16:VAL:HG23	1:A:19:ARG:H	1	0.33
(2,188)	1:A:16:VAL:HG11	1:A:19:ARG:H	11	0.33

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,188)	1:A:16:VAL:HG12	1:A:19:ARG:H	11	0.33
(2,188)	1:A:16:VAL:HG13	1:A:19:ARG:H	11	0.33
(2,188)	1:A:16:VAL:HG21	1:A:19:ARG:H	11	0.33
(2,188)	1:A:16:VAL:HG22	1:A:19:ARG:H	11	0.33
(2,188)	1:A:16:VAL:HG23	1:A:19:ARG:H	11	0.33
(2,177)	1:A:22:CYS:HB2	1:A:44:CYS:H	7	0.33
(2,177)	1:A:22:CYS:HB3	1:A:44:CYS:H	7	0.33
(2,177)	1:A:44:CYS:HB2	1:A:44:CYS:H	7	0.33
(2,177)	1:A:44:CYS:HB3	1:A:44:CYS:H	7	0.33
(2,177)	1:A:22:CYS:HB2	1:A:44:CYS:H	9	0.33
(2,177)	1:A:22:CYS:HB3	1:A:44:CYS:H	9	0.33
(2,177)	1:A:44:CYS:HB2	1:A:44:CYS:H	9	0.33
(2,177)	1:A:44:CYS:HB3	1:A:44:CYS:H	9	0.33
(2,160)	1:A:43:THR:HG1	1:A:43:THR:H	3	0.33
(2,160)	1:A:43:THR:HG1	1:A:43:THR:H	3	0.33
(2,160)	1:A:43:THR:HG21	1:A:43:THR:H	3	0.33
(2,160)	1:A:43:THR:HG21	1:A:43:THR:H	3	0.33
(2,160)	1:A:43:THR:HG22	1:A:43:THR:H	3	0.33
(2,160)	1:A:43:THR:HG22	1:A:43:THR:H	3	0.33
(2,160)	1:A:43:THR:HG23	1:A:43:THR:H	3	0.33
(2,160)	1:A:43:THR:HG23	1:A:43:THR:H	3	0.33
(2,160)	1:A:56:THR:HG1	1:A:43:THR:H	3	0.33
(2,160)	1:A:56:THR:HG21	1:A:43:THR:H	3	0.33
(2,160)	1:A:56:THR:HG22	1:A:43:THR:H	3	0.33
(2,160)	1:A:56:THR:HG23	1:A:43:THR:H	3	0.33
(2,137)	1:A:116:GLU:HB2	1:A:117:LEU:H	4	0.33
(2,137)	1:A:116:GLU:HB3	1:A:117:LEU:H	4	0.33
(2,137)	1:A:117:LEU:HB2	1:A:117:LEU:H	4	0.33
(2,137)	1:A:117:LEU:HB3	1:A:117:LEU:H	4	0.33
(2,131)	1:A:25:ASP:HB2	1:A:27:ASP:H	11	0.33
(2,131)	1:A:25:ASP:HB3	1:A:27:ASP:H	11	0.33
(2,131)	1:A:33:ASP:HB2	1:A:27:ASP:H	11	0.33
(2,131)	1:A:34:GLU:HB3	1:A:27:ASP:H	11	0.33
(2,114)	1:A:16:VAL:HG11	1:A:16:VAL:H	15	0.33
(2,114)	1:A:16:VAL:HG12	1:A:16:VAL:H	15	0.33
(2,114)	1:A:16:VAL:HG13	1:A:16:VAL:H	15	0.33
(2,114)	1:A:16:VAL:HG21	1:A:16:VAL:H	15	0.33
(2,114)	1:A:16:VAL:HG21	1:A:16:VAL:H	15	0.33
(2,114)	1:A:16:VAL:HG22	1:A:16:VAL:H	15	0.33
(2,114)	1:A:16:VAL:HG22	1:A:16:VAL:H	15	0.33
(2,114)	1:A:16:VAL:HG23	1:A:16:VAL:H	15	0.33
(2,114)	1:A:16:VAL:HG23	1:A:16:VAL:H	15	0.33

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,99)	1:A:98:ILE:HG12	1:A:99:SER:H	20	0.33
(1,99)	1:A:98:ILE:HG13	1:A:99:SER:H	20	0.33
(1,907)	1:A:39:CYS:H	1:A:41:MET:H	6	0.33
(1,907)	1:A:39:CYS:H	1:A:41:MET:H	7	0.33
(1,896)	1:A:64:ARG:H	1:A:66:ASP:H	10	0.33
(1,891)	1:A:64:ARG:H	1:A:80:CYS:HB2	9	0.33
(1,891)	1:A:64:ARG:H	1:A:80:CYS:HB3	9	0.33
(1,888)	1:A:49:ILE:HA	1:A:61:VAL:H	20	0.33
(1,872)	1:A:32:SER:H	1:A:33:ASP:HB2	8	0.33
(1,872)	1:A:32:SER:H	1:A:33:ASP:HB3	8	0.33
(1,863)	1:A:17:PRO:HD2	1:A:20:TRP:HE1	8	0.33
(1,863)	1:A:17:PRO:HD3	1:A:20:TRP:HE1	8	0.33
(1,85)	1:A:21:LYS:HG2	1:A:22:CYS:H	6	0.33
(1,85)	1:A:21:LYS:HG3	1:A:22:CYS:H	6	0.33
(1,85)	1:A:21:LYS:HG2	1:A:22:CYS:H	12	0.33
(1,85)	1:A:21:LYS:HG3	1:A:22:CYS:H	12	0.33
(1,837)	1:A:50:SER:H	1:A:45:ARG:HD2	1	0.33
(1,837)	1:A:50:SER:H	1:A:45:ARG:HD3	1	0.33
(1,837)	1:A:50:SER:H	1:A:45:ARG:HD2	7	0.33
(1,837)	1:A:50:SER:H	1:A:45:ARG:HD3	7	0.33
(1,833)	1:A:42:ARG:HG2	1:A:41:MET:H	8	0.33
(1,833)	1:A:42:ARG:HG2	1:A:41:MET:H	8	0.33
(1,833)	1:A:42:ARG:HG3	1:A:41:MET:H	8	0.33
(1,833)	1:A:42:ARG:HG3	1:A:41:MET:H	8	0.33
(1,821)	1:A:117:LEU:HD11	1:A:116:GLU:H	5	0.33
(1,821)	1:A:117:LEU:HD11	1:A:116:GLU:H	5	0.33
(1,821)	1:A:117:LEU:HD12	1:A:116:GLU:H	5	0.33
(1,821)	1:A:117:LEU:HD12	1:A:116:GLU:H	5	0.33
(1,821)	1:A:117:LEU:HD13	1:A:116:GLU:H	5	0.33
(1,821)	1:A:117:LEU:HD13	1:A:116:GLU:H	5	0.33
(1,821)	1:A:117:LEU:HD21	1:A:116:GLU:H	5	0.33
(1,821)	1:A:117:LEU:HD21	1:A:116:GLU:H	5	0.33
(1,821)	1:A:117:LEU:HD22	1:A:116:GLU:H	5	0.33
(1,821)	1:A:117:LEU:HD22	1:A:116:GLU:H	5	0.33
(1,821)	1:A:117:LEU:HD23	1:A:116:GLU:H	5	0.33
(1,821)	1:A:117:LEU:HD23	1:A:116:GLU:H	5	0.33
(1,81)	1:A:28:CYS:HA	1:A:33:ASP:H	5	0.33
(1,807)	1:A:98:ILE:HG12	1:A:103:VAL:H	16	0.33
(1,807)	1:A:98:ILE:HG13	1:A:103:VAL:H	16	0.33
(1,806)	1:A:101:ASN:HD21	1:A:102:PHE:H	1	0.33
(1,801)	1:A:102:PHE:HB2	1:A:98:ILE:H	2	0.33
(1,801)	1:A:102:PHE:HB3	1:A:98:ILE:H	2	0.33

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,800)	1:A:85:CYS:HB2	1:A:98:ILE:H	5	0.33
(1,800)	1:A:85:CYS:HB3	1:A:98:ILE:H	5	0.33
(1,788)	1:A:80:CYS:H	1:A:78:GLU:H	18	0.33
(1,777)	1:A:77:GLU:HB2	1:A:70:ASP:H	14	0.33
(1,777)	1:A:77:GLU:HB3	1:A:70:ASP:H	14	0.33
(1,772)	1:A:68:GLU:H	1:A:64:ARG:H	1	0.33
(1,768)	1:A:58:CYS:HA	1:A:59:ILE:H	12	0.33
(1,768)	1:A:58:CYS:HA	1:A:59:ILE:H	15	0.33
(1,759)	1:A:57:GLN:HE21	1:A:71:CYS:HA	8	0.33
(1,759)	1:A:57:GLN:HE21	1:A:71:CYS:HA	12	0.33
(1,733)	1:A:32:SER:H	1:A:28:CYS:H	9	0.33
(1,729)	1:A:32:SER:H	1:A:28:CYS:H	9	0.33
(1,710)	1:A:8:PHE:H	1:A:21:LYS:HD2	10	0.33
(1,710)	1:A:8:PHE:H	1:A:21:LYS:HD3	10	0.33
(1,710)	1:A:8:PHE:H	1:A:21:LYS:HD2	11	0.33
(1,710)	1:A:8:PHE:H	1:A:21:LYS:HD3	11	0.33
(1,696)	1:A:44:CYS:HB2	1:A:34:GLU:H	16	0.33
(1,696)	1:A:44:CYS:HB3	1:A:34:GLU:H	16	0.33
(1,69)	1:A:78:GLU:HG2	1:A:78:GLU:H	10	0.33
(1,69)	1:A:78:GLU:HG3	1:A:78:GLU:H	10	0.33
(1,667)	1:A:107:GLN:HG2	1:A:105:ASN:HD22	8	0.33
(1,667)	1:A:107:GLN:HG2	1:A:105:ASN:HD22	8	0.33
(1,667)	1:A:107:GLN:HG3	1:A:105:ASN:HD22	8	0.33
(1,667)	1:A:107:GLN:HG3	1:A:105:ASN:HD22	8	0.33
(1,66)	1:A:23:ASP:H	1:A:24:GLY:H	19	0.33
(1,642)	1:A:82:ASN:HA	1:A:82:ASN:HD22	18	0.33
(1,628)	1:A:71:CYS:HB2	1:A:57:GLN:HE22	13	0.33
(1,628)	1:A:71:CYS:HB3	1:A:57:GLN:HE22	13	0.33
(1,55)	1:A:71:CYS:H	1:A:70:ASP:H	9	0.33
(1,534)	1:A:77:GLU:HB2	1:A:77:GLU:H	2	0.33
(1,534)	1:A:77:GLU:HB3	1:A:77:GLU:H	2	0.33
(1,531)	1:A:71:CYS:HB2	1:A:71:CYS:H	15	0.33
(1,531)	1:A:71:CYS:HB3	1:A:71:CYS:H	15	0.33
(1,526)	1:A:64:ARG:H	1:A:67:GLY:H	4	0.33
(1,459)	1:A:70:ASP:HA	1:A:76:ASP:H	4	0.33
(1,436)	1:A:73:SER:H	1:A:72:ASP:H	11	0.33
(1,399)	1:A:54:HIS:H	1:A:53:ALA:HB1	14	0.33
(1,399)	1:A:54:HIS:H	1:A:53:ALA:HB2	14	0.33
(1,399)	1:A:54:HIS:H	1:A:53:ALA:HB3	14	0.33
(1,386)	1:A:51:CYS:HB2	1:A:51:CYS:H	8	0.33
(1,386)	1:A:51:CYS:HB3	1:A:51:CYS:H	8	0.33
(1,376)	1:A:49:ILE:HA	1:A:49:ILE:H	4	0.33

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,339)	1:A:25:ASP:H	1:A:20:TRP:HB2	20	0.33
(1,339)	1:A:25:ASP:H	1:A:20:TRP:HB3	20	0.33
(1,323)	1:A:64:ARG:H	1:A:80:CYS:HB2	6	0.33
(1,323)	1:A:64:ARG:H	1:A:80:CYS:HB3	6	0.33
(1,320)	1:A:7:ASP:HA	1:A:18:SER:H	13	0.33
(1,320)	1:A:7:ASP:HA	1:A:18:SER:H	15	0.33
(1,189)	1:A:101:ASN:HB2	1:A:101:ASN:H	4	0.33
(1,189)	1:A:101:ASN:HB3	1:A:101:ASN:H	4	0.33
(1,174)	1:A:103:VAL:H	1:A:101:ASN:HB2	8	0.33
(1,174)	1:A:103:VAL:H	1:A:101:ASN:HB3	8	0.33
(1,17)	1:A:81:GLY:H	1:A:80:CYS:H	12	0.33
(1,158)	1:A:104:CYS:HA	1:A:105:ASN:H	8	0.33
(1,158)	1:A:104:CYS:HA	1:A:105:ASN:H	10	0.33
(1,158)	1:A:104:CYS:HA	1:A:105:ASN:H	13	0.33
(4,7)	1:A:8:PHE:H	1:A:16:VAL:O	10	0.32
(4,7)	1:A:8:PHE:H	1:A:16:VAL:O	12	0.32
(4,5)	1:A:49:ILE:O	1:A:59:ILE:H	19	0.32
(4,2)	1:A:90:PHE:O	1:A:98:ILE:H	4	0.32
(2,89)	1:A:107:GLN:HB2	1:A:108:ASP:H	4	0.32
(2,89)	1:A:107:GLN:HB3	1:A:108:ASP:H	4	0.32
(2,66)	1:A:4:ALA:H	1:A:7:ASP:H	6	0.32
(2,66)	1:A:5:GLU:H	1:A:7:ASP:H	6	0.32
(2,64)	1:A:45:ARG:HB2	1:A:46:ILE:H	18	0.32
(2,64)	1:A:45:ARG:HB3	1:A:46:ILE:H	18	0.32
(2,64)	1:A:46:ILE:HG12	1:A:46:ILE:H	18	0.32
(2,64)	1:A:46:ILE:HG13	1:A:46:ILE:H	18	0.32
(2,54)	1:A:17:PRO:HB2	1:A:18:SER:H	7	0.32
(2,54)	1:A:17:PRO:HB3	1:A:18:SER:H	7	0.32
(2,54)	1:A:17:PRO:HG2	1:A:18:SER:H	7	0.32
(2,54)	1:A:17:PRO:HG3	1:A:18:SER:H	7	0.32
(2,54)	1:A:17:PRO:HB2	1:A:18:SER:H	16	0.32
(2,54)	1:A:17:PRO:HB3	1:A:18:SER:H	16	0.32
(2,54)	1:A:17:PRO:HG2	1:A:18:SER:H	16	0.32
(2,54)	1:A:17:PRO:HG3	1:A:18:SER:H	16	0.32
(2,363)	1:A:49:ILE:HB	1:A:49:ILE:H	12	0.32
(2,363)	1:A:59:ILE:HB	1:A:49:ILE:H	12	0.32
(2,345)	1:A:84:THR:HG1	1:A:85:CYS:H	12	0.32
(2,345)	1:A:84:THR:HG21	1:A:85:CYS:H	12	0.32
(2,345)	1:A:84:THR:HG22	1:A:85:CYS:H	12	0.32
(2,345)	1:A:84:THR:HG23	1:A:85:CYS:H	12	0.32
(2,345)	1:A:91:THR:HG21	1:A:85:CYS:H	12	0.32
(2,345)	1:A:91:THR:HG22	1:A:85:CYS:H	12	0.32

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,345)	1:A:91:THR:HG23	1:A:85:CYS:H	12	0.32
(2,342)	1:A:17:PRO:HB2	1:A:20:TRP:HE1	1	0.32
(2,342)	1:A:17:PRO:HB3	1:A:20:TRP:HE1	1	0.32
(2,342)	1:A:19:ARG:HB2	1:A:20:TRP:HE1	1	0.32
(2,342)	1:A:19:ARG:HB3	1:A:20:TRP:HE1	1	0.32
(2,342)	1:A:17:PRO:HB2	1:A:20:TRP:HE1	13	0.32
(2,342)	1:A:17:PRO:HB3	1:A:20:TRP:HE1	13	0.32
(2,342)	1:A:19:ARG:HB2	1:A:20:TRP:HE1	13	0.32
(2,342)	1:A:19:ARG:HB3	1:A:20:TRP:HE1	13	0.32
(2,342)	1:A:17:PRO:HB2	1:A:20:TRP:HE1	16	0.32
(2,342)	1:A:17:PRO:HB3	1:A:20:TRP:HE1	16	0.32
(2,342)	1:A:19:ARG:HB2	1:A:20:TRP:HE1	16	0.32
(2,342)	1:A:19:ARG:HB3	1:A:20:TRP:HE1	16	0.32
(2,341)	1:A:78:GLU:HG2	1:A:78:GLU:H	2	0.32
(2,341)	1:A:78:GLU:HG3	1:A:78:GLU:H	2	0.32
(2,341)	1:A:87:PRO:HB2	1:A:78:GLU:H	2	0.32
(2,341)	1:A:87:PRO:HB3	1:A:78:GLU:H	2	0.32
(2,276)	1:A:42:ARG:HA	1:A:57:GLN:H	15	0.32
(2,276)	1:A:43:THR:HA	1:A:57:GLN:H	15	0.32
(2,276)	1:A:56:THR:HB	1:A:57:GLN:H	15	0.32
(2,262)	1:A:51:CYS:HB2	1:A:74:GLY:H	9	0.32
(2,262)	1:A:51:CYS:HB3	1:A:74:GLY:H	9	0.32
(2,262)	1:A:71:CYS:HB2	1:A:74:GLY:H	9	0.32
(2,262)	1:A:71:CYS:HB3	1:A:74:GLY:H	9	0.32
(2,257)	1:A:32:SER:HB2	1:A:38:GLN:HE22	20	0.32
(2,257)	1:A:32:SER:HB3	1:A:38:GLN:HE22	20	0.32
(2,257)	1:A:33:ASP:HA	1:A:38:GLN:HE22	20	0.32
(2,257)	1:A:35:SER:HB2	1:A:38:GLN:HE22	20	0.32
(2,257)	1:A:35:SER:HB3	1:A:38:GLN:HE22	20	0.32
(2,244)	1:A:45:ARG:HA	1:A:47:HIS:H	1	0.32
(2,244)	1:A:60:PRO:HA	1:A:47:HIS:H	1	0.32
(2,24)	1:A:11:ASN:HB2	1:A:11:ASN:H	6	0.32
(2,24)	1:A:11:ASN:HB3	1:A:11:ASN:H	6	0.32
(2,24)	1:A:12:ASN:HB2	1:A:11:ASN:H	6	0.32
(2,239)	1:A:64:ARG:HB2	1:A:69:ASN:H	6	0.32
(2,239)	1:A:64:ARG:HB3	1:A:69:ASN:H	6	0.32
(2,239)	1:A:64:ARG:HG2	1:A:69:ASN:H	6	0.32
(2,239)	1:A:64:ARG:HG3	1:A:69:ASN:H	6	0.32
(2,239)	1:A:68:GLU:HB2	1:A:69:ASN:H	6	0.32
(2,239)	1:A:68:GLU:HB3	1:A:69:ASN:H	6	0.32
(2,228)	1:A:28:CYS:HB2	1:A:28:CYS:H	3	0.32
(2,228)	1:A:28:CYS:HB3	1:A:28:CYS:H	3	0.32

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,228)	1:A:29:GLU:HA	1:A:28:CYS:H	3	0.32
(2,228)	1:A:32:SER:HA	1:A:28:CYS:H	3	0.32
(2,227)	1:A:19:ARG:HG2	1:A:21:LYS:H	8	0.32
(2,227)	1:A:19:ARG:HG2	1:A:21:LYS:H	8	0.32
(2,227)	1:A:19:ARG:HG3	1:A:21:LYS:H	8	0.32
(2,227)	1:A:19:ARG:HG3	1:A:21:LYS:H	8	0.32
(2,227)	1:A:21:LYS:HB2	1:A:21:LYS:H	8	0.32
(2,227)	1:A:21:LYS:HB3	1:A:21:LYS:H	8	0.32
(2,227)	1:A:21:LYS:HD2	1:A:21:LYS:H	8	0.32
(2,227)	1:A:21:LYS:HD3	1:A:21:LYS:H	8	0.32
(2,223)	1:A:45:ARG:HG2	1:A:45:ARG:H	20	0.32
(2,223)	1:A:45:ARG:HG3	1:A:45:ARG:H	20	0.32
(2,223)	1:A:46:ILE:HB	1:A:45:ARG:H	20	0.32
(2,216)	1:A:49:ILE:HD11	1:A:50:SER:H	9	0.32
(2,216)	1:A:49:ILE:HD12	1:A:50:SER:H	9	0.32
(2,216)	1:A:49:ILE:HD13	1:A:50:SER:H	9	0.32
(2,216)	1:A:49:ILE:HG12	1:A:50:SER:H	9	0.32
(2,216)	1:A:49:ILE:HG13	1:A:50:SER:H	9	0.32
(2,216)	1:A:49:ILE:HG21	1:A:50:SER:H	9	0.32
(2,216)	1:A:49:ILE:HG22	1:A:50:SER:H	9	0.32
(2,216)	1:A:49:ILE:HG23	1:A:50:SER:H	9	0.32
(2,216)	1:A:49:ILE:HD11	1:A:50:SER:H	20	0.32
(2,216)	1:A:49:ILE:HD12	1:A:50:SER:H	20	0.32
(2,216)	1:A:49:ILE:HD13	1:A:50:SER:H	20	0.32
(2,216)	1:A:49:ILE:HG12	1:A:50:SER:H	20	0.32
(2,216)	1:A:49:ILE:HG13	1:A:50:SER:H	20	0.32
(2,216)	1:A:49:ILE:HG21	1:A:50:SER:H	20	0.32
(2,216)	1:A:49:ILE:HG22	1:A:50:SER:H	20	0.32
(2,216)	1:A:49:ILE:HG23	1:A:50:SER:H	20	0.32
(2,193)	1:A:98:ILE:HD11	1:A:109:ASP:H	7	0.32
(2,193)	1:A:98:ILE:HD12	1:A:109:ASP:H	7	0.32
(2,193)	1:A:98:ILE:HD13	1:A:109:ASP:H	7	0.32
(2,193)	1:A:117:LEU:HD11	1:A:109:ASP:H	7	0.32
(2,193)	1:A:117:LEU:HD12	1:A:109:ASP:H	7	0.32
(2,193)	1:A:117:LEU:HD13	1:A:109:ASP:H	7	0.32
(2,193)	1:A:117:LEU:HD21	1:A:109:ASP:H	7	0.32
(2,193)	1:A:117:LEU:HD22	1:A:109:ASP:H	7	0.32
(2,193)	1:A:117:LEU:HD23	1:A:109:ASP:H	7	0.32
(2,190)	1:A:55:SER:HA	1:A:57:GLN:H	12	0.32
(2,190)	1:A:56:THR:HA	1:A:57:GLN:H	12	0.32
(2,188)	1:A:16:VAL:HG11	1:A:19:ARG:H	20	0.32
(2,188)	1:A:16:VAL:HG12	1:A:19:ARG:H	20	0.32

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,188)	1:A:16:VAL:HG13	1:A:19:ARG:H	20	0.32
(2,188)	1:A:16:VAL:HG21	1:A:19:ARG:H	20	0.32
(2,188)	1:A:16:VAL:HG22	1:A:19:ARG:H	20	0.32
(2,188)	1:A:16:VAL:HG23	1:A:19:ARG:H	20	0.32
(2,177)	1:A:22:CYS:HB2	1:A:44:CYS:H	5	0.32
(2,177)	1:A:22:CYS:HB3	1:A:44:CYS:H	5	0.32
(2,177)	1:A:44:CYS:HB2	1:A:44:CYS:H	5	0.32
(2,177)	1:A:44:CYS:HB3	1:A:44:CYS:H	5	0.32
(2,177)	1:A:22:CYS:HB2	1:A:44:CYS:H	16	0.32
(2,177)	1:A:22:CYS:HB3	1:A:44:CYS:H	16	0.32
(2,177)	1:A:44:CYS:HB2	1:A:44:CYS:H	16	0.32
(2,177)	1:A:44:CYS:HB3	1:A:44:CYS:H	16	0.32
(2,162)	1:A:50:SER:HA	1:A:59:ILE:H	18	0.32
(2,162)	1:A:59:ILE:HA	1:A:59:ILE:H	18	0.32
(2,160)	1:A:43:THR:HG1	1:A:43:THR:H	5	0.32
(2,160)	1:A:43:THR:HG1	1:A:43:THR:H	5	0.32
(2,160)	1:A:43:THR:HG21	1:A:43:THR:H	5	0.32
(2,160)	1:A:43:THR:HG21	1:A:43:THR:H	5	0.32
(2,160)	1:A:43:THR:HG22	1:A:43:THR:H	5	0.32
(2,160)	1:A:43:THR:HG22	1:A:43:THR:H	5	0.32
(2,160)	1:A:43:THR:HG23	1:A:43:THR:H	5	0.32
(2,160)	1:A:43:THR:HG23	1:A:43:THR:H	5	0.32
(2,160)	1:A:56:THR:HG1	1:A:43:THR:H	5	0.32
(2,160)	1:A:56:THR:HG21	1:A:43:THR:H	5	0.32
(2,160)	1:A:56:THR:HG22	1:A:43:THR:H	5	0.32
(2,160)	1:A:56:THR:HG23	1:A:43:THR:H	5	0.32
(2,13)	1:A:110:CYS:HB2	1:A:113:GLY:H	11	0.32
(2,13)	1:A:110:CYS:HB3	1:A:113:GLY:H	11	0.32
(2,13)	1:A:111:SER:HB2	1:A:113:GLY:H	11	0.32
(2,13)	1:A:111:SER:HB3	1:A:113:GLY:H	11	0.32
(2,13)	1:A:113:GLY:HA2	1:A:113:GLY:H	11	0.32
(2,13)	1:A:113:GLY:HA3	1:A:113:GLY:H	11	0.32
(2,13)	1:A:110:CYS:HB2	1:A:113:GLY:H	13	0.32
(2,13)	1:A:110:CYS:HB3	1:A:113:GLY:H	13	0.32
(2,13)	1:A:111:SER:HB2	1:A:113:GLY:H	13	0.32
(2,13)	1:A:111:SER:HB3	1:A:113:GLY:H	13	0.32
(2,13)	1:A:113:GLY:HA2	1:A:113:GLY:H	13	0.32
(2,13)	1:A:113:GLY:HA3	1:A:113:GLY:H	13	0.32
(2,124)	1:A:43:THR:HG1	1:A:57:GLN:H	12	0.32
(2,124)	1:A:43:THR:HG1	1:A:57:GLN:H	12	0.32
(2,124)	1:A:43:THR:HG21	1:A:57:GLN:H	12	0.32
(2,124)	1:A:43:THR:HG21	1:A:57:GLN:H	12	0.32

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,124)	1:A:43:THR:HG22	1:A:57:GLN:H	12	0.32
(2,124)	1:A:43:THR:HG22	1:A:57:GLN:H	12	0.32
(2,124)	1:A:43:THR:HG23	1:A:57:GLN:H	12	0.32
(2,124)	1:A:43:THR:HG23	1:A:57:GLN:H	12	0.32
(2,124)	1:A:56:THR:HG1	1:A:57:GLN:H	12	0.32
(2,124)	1:A:56:THR:HG21	1:A:57:GLN:H	12	0.32
(2,124)	1:A:56:THR:HG21	1:A:57:GLN:H	12	0.32
(2,124)	1:A:56:THR:HG22	1:A:57:GLN:H	12	0.32
(2,124)	1:A:56:THR:HG22	1:A:57:GLN:H	12	0.32
(2,124)	1:A:56:THR:HG23	1:A:57:GLN:H	12	0.32
(2,124)	1:A:56:THR:HG23	1:A:57:GLN:H	12	0.32
(2,116)	1:A:37:GLU:HB2	1:A:38:GLN:HE22	3	0.32
(2,116)	1:A:37:GLU:HB3	1:A:38:GLN:HE22	3	0.32
(2,116)	1:A:37:GLU:HB3	1:A:38:GLN:HE22	3	0.32
(2,116)	1:A:38:GLN:HB2	1:A:38:GLN:HE22	3	0.32
(2,116)	1:A:38:GLN:HB2	1:A:38:GLN:HE22	3	0.32
(2,116)	1:A:38:GLN:HB3	1:A:38:GLN:HE22	3	0.32
(1,99)	1:A:98:ILE:HG12	1:A:99:SER:H	15	0.32
(1,99)	1:A:98:ILE:HG13	1:A:99:SER:H	15	0.32
(1,98)	1:A:98:ILE:HG12	1:A:99:SER:H	18	0.32
(1,98)	1:A:98:ILE:HG13	1:A:99:SER:H	18	0.32
(1,97)	1:A:98:ILE:HD11	1:A:99:SER:H	10	0.32
(1,97)	1:A:98:ILE:HD12	1:A:99:SER:H	10	0.32
(1,97)	1:A:98:ILE:HD13	1:A:99:SER:H	10	0.32
(1,93)	1:A:8:PHE:H	1:A:7:ASP:HA	1	0.32
(1,93)	1:A:8:PHE:H	1:A:7:ASP:HA	19	0.32
(1,907)	1:A:39:CYS:H	1:A:41:MET:H	14	0.32
(1,907)	1:A:39:CYS:H	1:A:41:MET:H	15	0.32
(1,9)	1:A:12:ASN:H	1:A:11:ASN:H	17	0.32
(1,891)	1:A:64:ARG:H	1:A:80:CYS:HB2	20	0.32
(1,891)	1:A:64:ARG:H	1:A:80:CYS:HB3	20	0.32
(1,888)	1:A:49:ILE:HA	1:A:61:VAL:H	9	0.32
(1,871)	1:A:30:ASP:HB2	1:A:32:SER:H	5	0.32
(1,871)	1:A:30:ASP:HB3	1:A:32:SER:H	5	0.32
(1,863)	1:A:17:PRO:HD2	1:A:20:TRP:HE1	12	0.32
(1,863)	1:A:17:PRO:HD3	1:A:20:TRP:HE1	12	0.32
(1,860)	1:A:16:VAL:HB	1:A:19:ARG:H	1	0.32
(1,808)	1:A:116:GLU:HB2	1:A:104:CYS:H	11	0.32
(1,808)	1:A:116:GLU:HB3	1:A:104:CYS:H	11	0.32
(1,806)	1:A:101:ASN:HD21	1:A:102:PHE:H	8	0.32
(1,801)	1:A:102:PHE:HB2	1:A:98:ILE:H	1	0.32
(1,801)	1:A:102:PHE:HB3	1:A:98:ILE:H	1	0.32

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,801)	1:A:102:PHE:HB2	1:A:98:ILE:H	11	0.32
(1,801)	1:A:102:PHE:HB3	1:A:98:ILE:H	11	0.32
(1,799)	1:A:85:CYS:HA	1:A:97:CYS:H	4	0.32
(1,796)	1:A:96:ARG:H	1:A:83:ILE:HG21	7	0.32
(1,796)	1:A:96:ARG:H	1:A:83:ILE:HG22	7	0.32
(1,796)	1:A:96:ARG:H	1:A:83:ILE:HG23	7	0.32
(1,796)	1:A:96:ARG:H	1:A:83:ILE:HG21	19	0.32
(1,796)	1:A:96:ARG:H	1:A:83:ILE:HG22	19	0.32
(1,796)	1:A:96:ARG:H	1:A:83:ILE:HG23	19	0.32
(1,789)	1:A:85:CYS:H	1:A:84:THR:HB	2	0.32
(1,789)	1:A:85:CYS:H	1:A:84:THR:HB	11	0.32
(1,783)	1:A:71:CYS:HB2	1:A:74:GLY:H	5	0.32
(1,783)	1:A:71:CYS:HB3	1:A:74:GLY:H	5	0.32
(1,783)	1:A:71:CYS:HB2	1:A:74:GLY:H	15	0.32
(1,783)	1:A:71:CYS:HB3	1:A:74:GLY:H	15	0.32
(1,783)	1:A:71:CYS:HB2	1:A:74:GLY:H	19	0.32
(1,783)	1:A:71:CYS:HB3	1:A:74:GLY:H	19	0.32
(1,768)	1:A:58:CYS:HA	1:A:59:ILE:H	4	0.32
(1,759)	1:A:57:GLN:HE21	1:A:71:CYS:HA	15	0.32
(1,744)	1:A:48:GLU:H	1:A:47:HIS:H	15	0.32
(1,735)	1:A:28:CYS:HB2	1:A:33:ASP:H	1	0.32
(1,735)	1:A:28:CYS:HB3	1:A:33:ASP:H	1	0.32
(1,735)	1:A:28:CYS:HB2	1:A:33:ASP:H	6	0.32
(1,735)	1:A:28:CYS:HB3	1:A:33:ASP:H	6	0.32
(1,733)	1:A:32:SER:H	1:A:28:CYS:H	1	0.32
(1,729)	1:A:32:SER:H	1:A:28:CYS:H	1	0.32
(1,724)	1:A:34:GLU:HB2	1:A:25:ASP:H	4	0.32
(1,724)	1:A:34:GLU:HB3	1:A:25:ASP:H	4	0.32
(1,711)	1:A:10:CYS:HB2	1:A:11:ASN:H	9	0.32
(1,711)	1:A:10:CYS:HB3	1:A:11:ASN:H	9	0.32
(1,710)	1:A:8:PHE:H	1:A:21:LYS:HD2	1	0.32
(1,710)	1:A:8:PHE:H	1:A:21:LYS:HD3	1	0.32
(1,710)	1:A:8:PHE:H	1:A:21:LYS:HD2	6	0.32
(1,710)	1:A:8:PHE:H	1:A:21:LYS:HD3	6	0.32
(1,710)	1:A:8:PHE:H	1:A:21:LYS:HD2	19	0.32
(1,710)	1:A:8:PHE:H	1:A:21:LYS:HD3	19	0.32
(1,704)	1:A:100:ARG:HG2	1:A:100:ARG:H	3	0.32
(1,704)	1:A:100:ARG:HG2	1:A:100:ARG:H	3	0.32
(1,704)	1:A:100:ARG:HG3	1:A:100:ARG:H	3	0.32
(1,704)	1:A:100:ARG:HG3	1:A:100:ARG:H	3	0.32
(1,704)	1:A:100:ARG:HG2	1:A:100:ARG:H	7	0.32
(1,704)	1:A:100:ARG:HG2	1:A:100:ARG:H	7	0.32

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,704)	1:A:100:ARG:HG3	1:A:100:ARG:H	7	0.32
(1,704)	1:A:100:ARG:HG3	1:A:100:ARG:H	7	0.32
(1,674)	1:A:17:PRO:HG2	1:A:20:TRP:HE1	11	0.32
(1,674)	1:A:17:PRO:HG3	1:A:20:TRP:HE1	11	0.32
(1,643)	1:A:82:ASN:HB2	1:A:82:ASN:HD21	18	0.32
(1,643)	1:A:82:ASN:HB2	1:A:82:ASN:HD21	18	0.32
(1,643)	1:A:82:ASN:HB3	1:A:82:ASN:HD21	18	0.32
(1,643)	1:A:82:ASN:HB3	1:A:82:ASN:HD21	18	0.32
(1,596)	1:A:74:GLY:HA2	1:A:69:ASN:HD21	11	0.32
(1,596)	1:A:74:GLY:HA3	1:A:69:ASN:HD21	11	0.32
(1,596)	1:A:74:GLY:HA2	1:A:69:ASN:HD21	16	0.32
(1,596)	1:A:74:GLY:HA3	1:A:69:ASN:HD21	16	0.32
(1,592)	1:A:74:GLY:HA2	1:A:69:ASN:HD21	14	0.32
(1,592)	1:A:74:GLY:HA3	1:A:69:ASN:HD21	14	0.32
(1,585)	1:A:28:CYS:H	1:A:27:ASP:H	12	0.32
(1,562)	1:A:102:PHE:HB2	1:A:99:SER:H	9	0.32
(1,562)	1:A:102:PHE:HB3	1:A:99:SER:H	9	0.32
(1,518)	1:A:49:ILE:H	1:A:61:VAL:H	9	0.32
(1,49)	1:A:94:SER:H	1:A:93:SER:H	18	0.32
(1,479)	1:A:9:VAL:HG11	1:A:9:VAL:H	9	0.32
(1,479)	1:A:9:VAL:HG12	1:A:9:VAL:H	9	0.32
(1,479)	1:A:9:VAL:HG13	1:A:9:VAL:H	9	0.32
(1,479)	1:A:9:VAL:HG21	1:A:9:VAL:H	9	0.32
(1,479)	1:A:9:VAL:HG22	1:A:9:VAL:H	9	0.32
(1,479)	1:A:9:VAL:HG23	1:A:9:VAL:H	9	0.32
(1,463)	1:A:71:CYS:HB2	1:A:78:GLU:H	14	0.32
(1,463)	1:A:71:CYS:HB3	1:A:78:GLU:H	14	0.32
(1,454)	1:A:78:GLU:HG2	1:A:76:ASP:H	7	0.32
(1,454)	1:A:78:GLU:HG3	1:A:76:ASP:H	7	0.32
(1,414)	1:A:63:TRP:H	1:A:63:TRP:HB2	12	0.32
(1,414)	1:A:63:TRP:H	1:A:63:TRP:HB3	12	0.32
(1,399)	1:A:54:HIS:H	1:A:53:ALA:HB1	4	0.32
(1,399)	1:A:54:HIS:H	1:A:53:ALA:HB2	4	0.32
(1,399)	1:A:54:HIS:H	1:A:53:ALA:HB3	4	0.32
(1,386)	1:A:51:CYS:HB2	1:A:51:CYS:H	10	0.32
(1,386)	1:A:51:CYS:HB3	1:A:51:CYS:H	10	0.32
(1,375)	1:A:48:GLU:HA	1:A:49:ILE:H	4	0.32
(1,375)	1:A:48:GLU:HA	1:A:49:ILE:H	10	0.32
(1,365)	1:A:43:THR:HB	1:A:43:THR:H	6	0.32
(1,365)	1:A:43:THR:HB	1:A:43:THR:H	7	0.32
(1,365)	1:A:43:THR:HB	1:A:43:THR:H	20	0.32
(1,347)	1:A:31:GLY:H	1:A:28:CYS:H	7	0.32

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,339)	1:A:25:ASP:H	1:A:20:TRP:HB2	14	0.32
(1,339)	1:A:25:ASP:H	1:A:20:TRP:HB3	14	0.32
(1,281)	1:A:5:GLU:HB2	1:A:6:SER:H	1	0.32
(1,281)	1:A:5:GLU:HB2	1:A:6:SER:H	1	0.32
(1,281)	1:A:5:GLU:HB3	1:A:6:SER:H	1	0.32
(1,281)	1:A:5:GLU:HB3	1:A:6:SER:H	1	0.32
(1,281)	1:A:5:GLU:HB2	1:A:6:SER:H	8	0.32
(1,281)	1:A:5:GLU:HB2	1:A:6:SER:H	8	0.32
(1,281)	1:A:5:GLU:HB3	1:A:6:SER:H	8	0.32
(1,281)	1:A:5:GLU:HB3	1:A:6:SER:H	8	0.32
(1,28)	1:A:118:ASP:H	1:A:117:LEU:H	1	0.32
(1,248)	1:A:83:ILE:HB	1:A:84:THR:H	9	0.32
(1,224)	1:A:92:CYS:HA	1:A:94:SER:H	10	0.32
(1,203)	1:A:89:GLU:HB2	1:A:98:ILE:H	3	0.32
(1,203)	1:A:89:GLU:HB3	1:A:98:ILE:H	3	0.32
(1,203)	1:A:89:GLU:HB2	1:A:98:ILE:H	11	0.32
(1,203)	1:A:89:GLU:HB3	1:A:98:ILE:H	11	0.32
(1,189)	1:A:101:ASN:HB2	1:A:101:ASN:H	5	0.32
(1,189)	1:A:101:ASN:HB3	1:A:101:ASN:H	5	0.32
(1,187)	1:A:103:VAL:HG11	1:A:102:PHE:H	9	0.32
(1,187)	1:A:103:VAL:HG12	1:A:102:PHE:H	9	0.32
(1,187)	1:A:103:VAL:HG13	1:A:102:PHE:H	9	0.32
(1,187)	1:A:103:VAL:HG21	1:A:102:PHE:H	9	0.32
(1,187)	1:A:103:VAL:HG22	1:A:102:PHE:H	9	0.32
(1,187)	1:A:103:VAL:HG23	1:A:102:PHE:H	9	0.32
(1,174)	1:A:103:VAL:H	1:A:101:ASN:HB2	1	0.32
(1,174)	1:A:103:VAL:H	1:A:101:ASN:HB3	1	0.32
(1,17)	1:A:81:GLY:H	1:A:80:CYS:H	7	0.32
(1,165)	1:A:104:CYS:H	1:A:116:GLU:HA	5	0.32
(1,140)	1:A:108:ASP:H	1:A:108:ASP:HB2	7	0.32
(1,140)	1:A:108:ASP:H	1:A:108:ASP:HB3	7	0.32
(4,7)	1:A:8:PHE:H	1:A:16:VAL:O	14	0.31
(2,97)	1:A:20:TRP:HB2	1:A:20:TRP:H	16	0.31
(2,97)	1:A:20:TRP:HB3	1:A:20:TRP:H	16	0.31
(2,97)	1:A:21:LYS:HA	1:A:20:TRP:H	16	0.31
(2,76)	1:A:28:CYS:HB2	1:A:32:SER:H	14	0.31
(2,76)	1:A:28:CYS:HB3	1:A:32:SER:H	14	0.31
(2,76)	1:A:29:GLU:HA	1:A:32:SER:H	14	0.31
(2,76)	1:A:32:SER:HA	1:A:32:SER:H	14	0.31
(2,76)	1:A:32:SER:HB2	1:A:32:SER:H	14	0.31
(2,76)	1:A:32:SER:HB3	1:A:32:SER:H	14	0.31
(2,76)	1:A:33:ASP:HA	1:A:32:SER:H	14	0.31

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,76)	1:A:35:SER:HB2	1:A:32:SER:H	14	0.31
(2,76)	1:A:35:SER:HB3	1:A:32:SER:H	14	0.31
(2,76)	1:A:28:CYS:HB2	1:A:32:SER:H	15	0.31
(2,76)	1:A:28:CYS:HB3	1:A:32:SER:H	15	0.31
(2,76)	1:A:29:GLU:HA	1:A:32:SER:H	15	0.31
(2,76)	1:A:32:SER:HA	1:A:32:SER:H	15	0.31
(2,76)	1:A:32:SER:HB2	1:A:32:SER:H	15	0.31
(2,76)	1:A:32:SER:HB3	1:A:32:SER:H	15	0.31
(2,76)	1:A:33:ASP:HA	1:A:32:SER:H	15	0.31
(2,76)	1:A:35:SER:HB2	1:A:32:SER:H	15	0.31
(2,76)	1:A:35:SER:HB3	1:A:32:SER:H	15	0.31
(2,66)	1:A:4:ALA:H	1:A:7:ASP:H	10	0.31
(2,66)	1:A:5:GLU:H	1:A:7:ASP:H	10	0.31
(2,54)	1:A:17:PRO:HB2	1:A:18:SER:H	11	0.31
(2,54)	1:A:17:PRO:HB3	1:A:18:SER:H	11	0.31
(2,54)	1:A:17:PRO:HG2	1:A:18:SER:H	11	0.31
(2,54)	1:A:17:PRO:HG3	1:A:18:SER:H	11	0.31
(2,54)	1:A:17:PRO:HB2	1:A:18:SER:H	20	0.31
(2,54)	1:A:17:PRO:HB3	1:A:18:SER:H	20	0.31
(2,54)	1:A:17:PRO:HG2	1:A:18:SER:H	20	0.31
(2,54)	1:A:17:PRO:HG3	1:A:18:SER:H	20	0.31
(2,46)	1:A:114:SER:HG	1:A:115:ASP:H	13	0.31
(2,46)	1:A:116:GLU:HA	1:A:115:ASP:H	13	0.31
(2,46)	1:A:119:CYS:HA	1:A:115:ASP:H	13	0.31
(2,42)	1:A:49:ILE:HG21	1:A:61:VAL:H	8	0.31
(2,42)	1:A:49:ILE:HG22	1:A:61:VAL:H	8	0.31
(2,42)	1:A:49:ILE:HG23	1:A:61:VAL:H	8	0.31
(2,42)	1:A:59:ILE:HD11	1:A:61:VAL:H	8	0.31
(2,42)	1:A:59:ILE:HD12	1:A:61:VAL:H	8	0.31
(2,42)	1:A:59:ILE:HD13	1:A:61:VAL:H	8	0.31
(2,42)	1:A:60:PRO:HB2	1:A:61:VAL:H	8	0.31
(2,42)	1:A:60:PRO:HB3	1:A:61:VAL:H	8	0.31
(2,42)	1:A:61:VAL:HG11	1:A:61:VAL:H	8	0.31
(2,42)	1:A:61:VAL:HG12	1:A:61:VAL:H	8	0.31
(2,42)	1:A:61:VAL:HG13	1:A:61:VAL:H	8	0.31
(2,42)	1:A:61:VAL:HG21	1:A:61:VAL:H	8	0.31
(2,42)	1:A:61:VAL:HG22	1:A:61:VAL:H	8	0.31
(2,42)	1:A:61:VAL:HG23	1:A:61:VAL:H	8	0.31
(2,42)	1:A:49:ILE:HG21	1:A:61:VAL:H	10	0.31
(2,42)	1:A:49:ILE:HG22	1:A:61:VAL:H	10	0.31
(2,42)	1:A:49:ILE:HG23	1:A:61:VAL:H	10	0.31
(2,42)	1:A:59:ILE:HD11	1:A:61:VAL:H	10	0.31

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,42)	1:A:59:ILE:HD12	1:A:61:VAL:H	10	0.31
(2,42)	1:A:59:ILE:HD13	1:A:61:VAL:H	10	0.31
(2,42)	1:A:60:PRO:HB2	1:A:61:VAL:H	10	0.31
(2,42)	1:A:60:PRO:HB3	1:A:61:VAL:H	10	0.31
(2,42)	1:A:61:VAL:HG11	1:A:61:VAL:H	10	0.31
(2,42)	1:A:61:VAL:HG12	1:A:61:VAL:H	10	0.31
(2,42)	1:A:61:VAL:HG13	1:A:61:VAL:H	10	0.31
(2,42)	1:A:61:VAL:HG21	1:A:61:VAL:H	10	0.31
(2,42)	1:A:61:VAL:HG22	1:A:61:VAL:H	10	0.31
(2,42)	1:A:61:VAL:HG23	1:A:61:VAL:H	10	0.31
(2,388)	1:A:64:ARG:HD2	1:A:68:GLU:H	16	0.31
(2,388)	1:A:64:ARG:HD3	1:A:68:GLU:H	16	0.31
(2,388)	1:A:66:ASP:HB2	1:A:68:GLU:H	16	0.31
(2,388)	1:A:66:ASP:HB3	1:A:68:GLU:H	16	0.31
(2,377)	1:A:33:ASP:HB2	1:A:33:ASP:H	11	0.31
(2,377)	1:A:33:ASP:HB3	1:A:33:ASP:H	11	0.31
(2,377)	1:A:34:GLU:HB2	1:A:33:ASP:H	11	0.31
(2,377)	1:A:34:GLU:HB3	1:A:33:ASP:H	11	0.31
(2,377)	1:A:33:ASP:HB2	1:A:33:ASP:H	13	0.31
(2,377)	1:A:33:ASP:HB3	1:A:33:ASP:H	13	0.31
(2,377)	1:A:34:GLU:HB2	1:A:33:ASP:H	13	0.31
(2,377)	1:A:34:GLU:HB3	1:A:33:ASP:H	13	0.31
(2,375)	1:A:48:GLU:HB2	1:A:61:VAL:H	17	0.31
(2,375)	1:A:48:GLU:HB3	1:A:61:VAL:H	17	0.31
(2,375)	1:A:60:PRO:HD3	1:A:61:VAL:H	17	0.31
(2,363)	1:A:49:ILE:HB	1:A:49:ILE:H	10	0.31
(2,363)	1:A:59:ILE:HB	1:A:49:ILE:H	10	0.31
(2,359)	1:A:83:ILE:HD11	1:A:98:ILE:H	9	0.31
(2,359)	1:A:83:ILE:HD12	1:A:98:ILE:H	9	0.31
(2,359)	1:A:83:ILE:HD13	1:A:98:ILE:H	9	0.31
(2,359)	1:A:98:ILE:HD11	1:A:98:ILE:H	9	0.31
(2,359)	1:A:98:ILE:HD12	1:A:98:ILE:H	9	0.31
(2,359)	1:A:98:ILE:HD13	1:A:98:ILE:H	9	0.31
(2,345)	1:A:84:THR:HG1	1:A:85:CYS:H	20	0.31
(2,345)	1:A:84:THR:HG21	1:A:85:CYS:H	20	0.31
(2,345)	1:A:84:THR:HG22	1:A:85:CYS:H	20	0.31
(2,345)	1:A:84:THR:HG23	1:A:85:CYS:H	20	0.31
(2,345)	1:A:91:THR:HG21	1:A:85:CYS:H	20	0.31
(2,345)	1:A:91:THR:HG22	1:A:85:CYS:H	20	0.31
(2,345)	1:A:91:THR:HG23	1:A:85:CYS:H	20	0.31
(2,341)	1:A:78:GLU:HG2	1:A:78:GLU:H	12	0.31
(2,341)	1:A:78:GLU:HG3	1:A:78:GLU:H	12	0.31

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,341)	1:A:87:PRO:HB2	1:A:78:GLU:H	12	0.31
(2,341)	1:A:87:PRO:HB3	1:A:78:GLU:H	12	0.31
(2,331)	1:A:2:THR:H	1:A:99:SER:H	1	0.31
(2,331)	1:A:3:CYS:H	1:A:99:SER:H	1	0.31
(2,331)	1:A:80:CYS:H	1:A:99:SER:H	1	0.31
(2,331)	1:A:81:GLY:H	1:A:99:SER:H	1	0.31
(2,331)	1:A:101:ASN:H	1:A:99:SER:H	1	0.31
(2,300)	1:A:44:CYS:HB2	1:A:48:GLU:H	15	0.31
(2,300)	1:A:44:CYS:HB3	1:A:48:GLU:H	15	0.31
(2,300)	1:A:48:GLU:HG2	1:A:48:GLU:H	15	0.31
(2,300)	1:A:48:GLU:HG3	1:A:48:GLU:H	15	0.31
(2,292)	1:A:3:CYS:HB2	1:A:8:PHE:H	8	0.31
(2,292)	1:A:3:CYS:HB3	1:A:8:PHE:H	8	0.31
(2,292)	1:A:7:ASP:HB2	1:A:8:PHE:H	8	0.31
(2,292)	1:A:7:ASP:HB3	1:A:8:PHE:H	8	0.31
(2,292)	1:A:8:PHE:HB2	1:A:8:PHE:H	8	0.31
(2,292)	1:A:8:PHE:HB3	1:A:8:PHE:H	8	0.31
(2,29)	1:A:28:CYS:HA	1:A:29:GLU:H	7	0.31
(2,29)	1:A:30:ASP:HA	1:A:29:GLU:H	7	0.31
(2,285)	1:A:109:ASP:HB2	1:A:112:ASP:H	2	0.31
(2,285)	1:A:109:ASP:HB3	1:A:112:ASP:H	2	0.31
(2,285)	1:A:112:ASP:HB2	1:A:112:ASP:H	2	0.31
(2,285)	1:A:112:ASP:HB3	1:A:112:ASP:H	2	0.31
(2,285)	1:A:109:ASP:HB2	1:A:112:ASP:H	5	0.31
(2,285)	1:A:109:ASP:HB3	1:A:112:ASP:H	5	0.31
(2,285)	1:A:112:ASP:HB2	1:A:112:ASP:H	5	0.31
(2,285)	1:A:112:ASP:HB3	1:A:112:ASP:H	5	0.31
(2,285)	1:A:109:ASP:HB2	1:A:112:ASP:H	15	0.31
(2,285)	1:A:109:ASP:HB3	1:A:112:ASP:H	15	0.31
(2,285)	1:A:112:ASP:HB2	1:A:112:ASP:H	15	0.31
(2,285)	1:A:112:ASP:HB3	1:A:112:ASP:H	15	0.31
(2,285)	1:A:109:ASP:HB2	1:A:112:ASP:H	19	0.31
(2,285)	1:A:109:ASP:HB3	1:A:112:ASP:H	19	0.31
(2,285)	1:A:112:ASP:HB2	1:A:112:ASP:H	19	0.31
(2,285)	1:A:112:ASP:HB3	1:A:112:ASP:H	19	0.31
(2,277)	1:A:19:ARG:HG2	1:A:19:ARG:H	9	0.31
(2,277)	1:A:19:ARG:HG2	1:A:19:ARG:H	9	0.31
(2,277)	1:A:19:ARG:HG3	1:A:19:ARG:H	9	0.31
(2,277)	1:A:19:ARG:HG3	1:A:19:ARG:H	9	0.31
(2,277)	1:A:21:LYS:HD2	1:A:19:ARG:H	9	0.31
(2,277)	1:A:19:ARG:HG2	1:A:19:ARG:H	10	0.31
(2,277)	1:A:19:ARG:HG2	1:A:19:ARG:H	10	0.31

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,277)	1:A:19:ARG:HG3	1:A:19:ARG:H	10	0.31
(2,277)	1:A:19:ARG:HG3	1:A:19:ARG:H	10	0.31
(2,277)	1:A:21:LYS:HD2	1:A:19:ARG:H	10	0.31
(2,277)	1:A:19:ARG:HG2	1:A:19:ARG:H	14	0.31
(2,277)	1:A:19:ARG:HG2	1:A:19:ARG:H	14	0.31
(2,277)	1:A:19:ARG:HG3	1:A:19:ARG:H	14	0.31
(2,277)	1:A:19:ARG:HG3	1:A:19:ARG:H	14	0.31
(2,277)	1:A:21:LYS:HD2	1:A:19:ARG:H	14	0.31
(2,266)	1:A:31:GLY:HA2	1:A:32:SER:H	2	0.31
(2,266)	1:A:31:GLY:HA3	1:A:32:SER:H	2	0.31
(2,266)	1:A:32:SER:HB2	1:A:32:SER:H	2	0.31
(2,266)	1:A:32:SER:HB3	1:A:32:SER:H	2	0.31
(2,264)	1:A:42:ARG:HB2	1:A:50:SER:H	8	0.31
(2,264)	1:A:42:ARG:HB3	1:A:50:SER:H	8	0.31
(2,264)	1:A:49:ILE:HB	1:A:50:SER:H	8	0.31
(2,263)	1:A:62:SER:HB2	1:A:63:TRP:H	12	0.31
(2,263)	1:A:62:SER:HB3	1:A:63:TRP:H	12	0.31
(2,263)	1:A:63:TRP:HB2	1:A:63:TRP:H	12	0.31
(2,262)	1:A:51:CYS:HB2	1:A:74:GLY:H	10	0.31
(2,262)	1:A:51:CYS:HB3	1:A:74:GLY:H	10	0.31
(2,262)	1:A:71:CYS:HB2	1:A:74:GLY:H	10	0.31
(2,262)	1:A:71:CYS:HB3	1:A:74:GLY:H	10	0.31
(2,25)	1:A:79:ASN:HD22	1:A:80:CYS:HA	13	0.31
(2,25)	1:A:86:SER:HA	1:A:80:CYS:HA	13	0.31
(2,227)	1:A:19:ARG:HG2	1:A:21:LYS:H	2	0.31
(2,227)	1:A:19:ARG:HG2	1:A:21:LYS:H	2	0.31
(2,227)	1:A:19:ARG:HG3	1:A:21:LYS:H	2	0.31
(2,227)	1:A:19:ARG:HG3	1:A:21:LYS:H	2	0.31
(2,227)	1:A:21:LYS:HB2	1:A:21:LYS:H	2	0.31
(2,227)	1:A:21:LYS:HB3	1:A:21:LYS:H	2	0.31
(2,227)	1:A:21:LYS:HD2	1:A:21:LYS:H	2	0.31
(2,227)	1:A:21:LYS:HD3	1:A:21:LYS:H	2	0.31
(2,227)	1:A:19:ARG:HG2	1:A:21:LYS:H	16	0.31
(2,227)	1:A:19:ARG:HG2	1:A:21:LYS:H	16	0.31
(2,227)	1:A:19:ARG:HG3	1:A:21:LYS:H	16	0.31
(2,227)	1:A:19:ARG:HG3	1:A:21:LYS:H	16	0.31
(2,227)	1:A:21:LYS:HB2	1:A:21:LYS:H	16	0.31
(2,227)	1:A:21:LYS:HB3	1:A:21:LYS:H	16	0.31
(2,227)	1:A:21:LYS:HD2	1:A:21:LYS:H	16	0.31
(2,227)	1:A:21:LYS:HD3	1:A:21:LYS:H	16	0.31
(2,227)	1:A:19:ARG:HG2	1:A:21:LYS:H	17	0.31
(2,227)	1:A:19:ARG:HG2	1:A:21:LYS:H	17	0.31

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,227)	1:A:19:ARG:HG3	1:A:21:LYS:H	17	0.31
(2,227)	1:A:19:ARG:HG3	1:A:21:LYS:H	17	0.31
(2,227)	1:A:21:LYS:HB2	1:A:21:LYS:H	17	0.31
(2,227)	1:A:21:LYS:HB3	1:A:21:LYS:H	17	0.31
(2,227)	1:A:21:LYS:HD2	1:A:21:LYS:H	17	0.31
(2,227)	1:A:21:LYS:HD3	1:A:21:LYS:H	17	0.31
(2,22)	1:A:75:GLU:HA	1:A:78:GLU:H	8	0.31
(2,22)	1:A:87:PRO:HD2	1:A:78:GLU:H	8	0.31
(2,216)	1:A:49:ILE:HD11	1:A:50:SER:H	6	0.31
(2,216)	1:A:49:ILE:HD12	1:A:50:SER:H	6	0.31
(2,216)	1:A:49:ILE:HD13	1:A:50:SER:H	6	0.31
(2,216)	1:A:49:ILE:HG12	1:A:50:SER:H	6	0.31
(2,216)	1:A:49:ILE:HG13	1:A:50:SER:H	6	0.31
(2,216)	1:A:49:ILE:HG21	1:A:50:SER:H	6	0.31
(2,216)	1:A:49:ILE:HG22	1:A:50:SER:H	6	0.31
(2,216)	1:A:49:ILE:HG23	1:A:50:SER:H	6	0.31
(2,202)	1:A:22:CYS:HA	1:A:23:ASP:H	1	0.31
(2,202)	1:A:23:ASP:HA	1:A:23:ASP:H	1	0.31
(2,200)	1:A:77:GLU:HG2	1:A:76:ASP:H	8	0.31
(2,200)	1:A:77:GLU:HG3	1:A:76:ASP:H	8	0.31
(2,200)	1:A:87:PRO:HG2	1:A:76:ASP:H	8	0.31
(2,200)	1:A:87:PRO:HG3	1:A:76:ASP:H	8	0.31
(2,193)	1:A:98:ILE:HD11	1:A:109:ASP:H	16	0.31
(2,193)	1:A:98:ILE:HD12	1:A:109:ASP:H	16	0.31
(2,193)	1:A:98:ILE:HD13	1:A:109:ASP:H	16	0.31
(2,193)	1:A:117:LEU:HD11	1:A:109:ASP:H	16	0.31
(2,193)	1:A:117:LEU:HD12	1:A:109:ASP:H	16	0.31
(2,193)	1:A:117:LEU:HD13	1:A:109:ASP:H	16	0.31
(2,193)	1:A:117:LEU:HD21	1:A:109:ASP:H	16	0.31
(2,193)	1:A:117:LEU:HD22	1:A:109:ASP:H	16	0.31
(2,193)	1:A:117:LEU:HD23	1:A:109:ASP:H	16	0.31
(2,190)	1:A:55:SER:HA	1:A:57:GLN:H	3	0.31
(2,190)	1:A:56:THR:HA	1:A:57:GLN:H	3	0.31
(2,190)	1:A:55:SER:HA	1:A:57:GLN:H	14	0.31
(2,190)	1:A:56:THR:HA	1:A:57:GLN:H	14	0.31
(2,188)	1:A:16:VAL:HG11	1:A:19:ARG:H	16	0.31
(2,188)	1:A:16:VAL:HG12	1:A:19:ARG:H	16	0.31
(2,188)	1:A:16:VAL:HG13	1:A:19:ARG:H	16	0.31
(2,188)	1:A:16:VAL:HG21	1:A:19:ARG:H	16	0.31
(2,188)	1:A:16:VAL:HG22	1:A:19:ARG:H	16	0.31
(2,188)	1:A:16:VAL:HG23	1:A:19:ARG:H	16	0.31
(2,18)	1:A:111:SER:HA	1:A:113:GLY:H	11	0.31

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,18)	1:A:113:GLY:HA2	1:A:113:GLY:H	11	0.31
(2,18)	1:A:113:GLY:HA3	1:A:113:GLY:H	11	0.31
(2,18)	1:A:111:SER:HA	1:A:113:GLY:H	13	0.31
(2,18)	1:A:113:GLY:HA2	1:A:113:GLY:H	13	0.31
(2,18)	1:A:113:GLY:HA3	1:A:113:GLY:H	13	0.31
(2,177)	1:A:22:CYS:HB2	1:A:44:CYS:H	8	0.31
(2,177)	1:A:22:CYS:HB3	1:A:44:CYS:H	8	0.31
(2,177)	1:A:44:CYS:HB2	1:A:44:CYS:H	8	0.31
(2,177)	1:A:44:CYS:HB3	1:A:44:CYS:H	8	0.31
(2,164)	1:A:14:GLN:HB2	1:A:14:GLN:H	2	0.31
(2,164)	1:A:14:GLN:HB3	1:A:14:GLN:H	2	0.31
(2,163)	1:A:71:CYS:HA	1:A:77:GLU:H	14	0.31
(2,163)	1:A:77:GLU:HA	1:A:77:GLU:H	14	0.31
(2,163)	1:A:71:CYS:HA	1:A:77:GLU:H	18	0.31
(2,163)	1:A:77:GLU:HA	1:A:77:GLU:H	18	0.31
(2,135)	1:A:79:ASN:HB2	1:A:79:ASN:HD21	19	0.31
(2,135)	1:A:97:CYS:HB2	1:A:79:ASN:HD21	19	0.31
(2,13)	1:A:110:CYS:HB2	1:A:113:GLY:H	12	0.31
(2,13)	1:A:110:CYS:HB3	1:A:113:GLY:H	12	0.31
(2,13)	1:A:111:SER:HB2	1:A:113:GLY:H	12	0.31
(2,13)	1:A:111:SER:HB3	1:A:113:GLY:H	12	0.31
(2,13)	1:A:113:GLY:HA2	1:A:113:GLY:H	12	0.31
(2,13)	1:A:113:GLY:HA3	1:A:113:GLY:H	12	0.31
(2,13)	1:A:110:CYS:HB2	1:A:113:GLY:H	15	0.31
(2,13)	1:A:110:CYS:HB3	1:A:113:GLY:H	15	0.31
(2,13)	1:A:111:SER:HB2	1:A:113:GLY:H	15	0.31
(2,13)	1:A:111:SER:HB3	1:A:113:GLY:H	15	0.31
(2,13)	1:A:113:GLY:HA2	1:A:113:GLY:H	15	0.31
(2,13)	1:A:113:GLY:HA3	1:A:113:GLY:H	15	0.31
(2,13)	1:A:110:CYS:HB2	1:A:113:GLY:H	18	0.31
(2,13)	1:A:110:CYS:HB3	1:A:113:GLY:H	18	0.31
(2,13)	1:A:111:SER:HB2	1:A:113:GLY:H	18	0.31
(2,13)	1:A:111:SER:HB3	1:A:113:GLY:H	18	0.31
(2,13)	1:A:113:GLY:HA2	1:A:113:GLY:H	18	0.31
(2,13)	1:A:113:GLY:HA3	1:A:113:GLY:H	18	0.31
(2,13)	1:A:110:CYS:HB2	1:A:113:GLY:H	20	0.31
(2,13)	1:A:110:CYS:HB3	1:A:113:GLY:H	20	0.31
(2,13)	1:A:111:SER:HB2	1:A:113:GLY:H	20	0.31
(2,13)	1:A:111:SER:HB3	1:A:113:GLY:H	20	0.31
(2,13)	1:A:113:GLY:HA2	1:A:113:GLY:H	20	0.31
(2,13)	1:A:113:GLY:HA3	1:A:113:GLY:H	20	0.31
(1,98)	1:A:98:ILE:HG12	1:A:99:SER:H	11	0.31

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,98)	1:A:98:ILE:HG13	1:A:99:SER:H	11	0.31
(1,916)	1:A:77:GLU:HB2	1:A:77:GLU:H	17	0.31
(1,916)	1:A:77:GLU:HB3	1:A:77:GLU:H	17	0.31
(1,911)	1:A:57:GLN:HE21	1:A:71:CYS:H	1	0.31
(1,896)	1:A:64:ARG:H	1:A:66:ASP:H	6	0.31
(1,895)	1:A:77:GLU:HG2	1:A:66:ASP:H	17	0.31
(1,895)	1:A:77:GLU:HG3	1:A:66:ASP:H	17	0.31
(1,894)	1:A:66:ASP:H	1:A:77:GLU:HG2	17	0.31
(1,894)	1:A:66:ASP:H	1:A:77:GLU:HG3	17	0.31
(1,891)	1:A:64:ARG:H	1:A:80:CYS:HB2	3	0.31
(1,891)	1:A:64:ARG:H	1:A:80:CYS:HB3	3	0.31
(1,891)	1:A:64:ARG:H	1:A:80:CYS:HB2	5	0.31
(1,891)	1:A:64:ARG:H	1:A:80:CYS:HB3	5	0.31
(1,881)	1:A:48:GLU:H	1:A:45:ARG:H	3	0.31
(1,879)	1:A:48:GLU:H	1:A:45:ARG:H	3	0.31
(1,863)	1:A:17:PRO:HD2	1:A:20:TRP:HE1	18	0.31
(1,863)	1:A:17:PRO:HD3	1:A:20:TRP:HE1	18	0.31
(1,862)	1:A:21:LYS:HE2	1:A:19:ARG:H	17	0.31
(1,862)	1:A:21:LYS:HE3	1:A:19:ARG:H	17	0.31
(1,85)	1:A:21:LYS:HG2	1:A:22:CYS:H	18	0.31
(1,85)	1:A:21:LYS:HG3	1:A:22:CYS:H	18	0.31
(1,849)	1:A:33:ASP:H	1:A:11:ASN:H	10	0.31
(1,840)	1:A:71:CYS:HB2	1:A:77:GLU:H	20	0.31
(1,840)	1:A:71:CYS:HB3	1:A:77:GLU:H	20	0.31
(1,831)	1:A:73:SER:H	1:A:75:GLU:H	3	0.31
(1,831)	1:A:73:SER:H	1:A:75:GLU:H	8	0.31
(1,803)	1:A:101:ASN:HD21	1:A:99:SER:H	4	0.31
(1,801)	1:A:102:PHE:HB2	1:A:98:ILE:H	15	0.31
(1,801)	1:A:102:PHE:HB3	1:A:98:ILE:H	15	0.31
(1,791)	1:A:85:CYS:HB2	1:A:89:GLU:H	17	0.31
(1,791)	1:A:85:CYS:HB3	1:A:89:GLU:H	17	0.31
(1,768)	1:A:58:CYS:HA	1:A:59:ILE:H	18	0.31
(1,744)	1:A:48:GLU:H	1:A:47:HIS:H	3	0.31
(1,740)	1:A:35:SER:H	1:A:56:THR:HG1	2	0.31
(1,740)	1:A:35:SER:H	1:A:56:THR:HG21	2	0.31
(1,740)	1:A:35:SER:H	1:A:56:THR:HG22	2	0.31
(1,740)	1:A:35:SER:H	1:A:56:THR:HG23	2	0.31
(1,740)	1:A:35:SER:H	1:A:56:THR:HG1	6	0.31
(1,740)	1:A:35:SER:H	1:A:56:THR:HG21	6	0.31
(1,740)	1:A:35:SER:H	1:A:56:THR:HG22	6	0.31
(1,740)	1:A:35:SER:H	1:A:56:THR:HG23	6	0.31
(1,710)	1:A:8:PHE:H	1:A:21:LYS:HD2	2	0.31

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,710)	1:A:8:PHE:H	1:A:21:LYS:HD3	2	0.31
(1,704)	1:A:100:ARG:HG2	1:A:100:ARG:H	10	0.31
(1,704)	1:A:100:ARG:HG2	1:A:100:ARG:H	10	0.31
(1,704)	1:A:100:ARG:HG3	1:A:100:ARG:H	10	0.31
(1,704)	1:A:100:ARG:HG3	1:A:100:ARG:H	10	0.31
(1,690)	1:A:61:VAL:HG11	1:A:49:ILE:H	15	0.31
(1,690)	1:A:61:VAL:HG12	1:A:49:ILE:H	15	0.31
(1,690)	1:A:61:VAL:HG13	1:A:49:ILE:H	15	0.31
(1,690)	1:A:61:VAL:HG21	1:A:49:ILE:H	15	0.31
(1,690)	1:A:61:VAL:HG22	1:A:49:ILE:H	15	0.31
(1,690)	1:A:61:VAL:HG23	1:A:49:ILE:H	15	0.31
(1,688)	1:A:69:ASN:H	1:A:69:ASN:HD22	17	0.31
(1,66)	1:A:23:ASP:H	1:A:24:GLY:H	8	0.31
(1,636)	1:A:78:GLU:HB2	1:A:79:ASN:HD22	10	0.31
(1,636)	1:A:78:GLU:HB2	1:A:79:ASN:HD22	10	0.31
(1,636)	1:A:78:GLU:HB3	1:A:79:ASN:HD22	10	0.31
(1,636)	1:A:78:GLU:HB3	1:A:79:ASN:HD22	10	0.31
(1,628)	1:A:71:CYS:HB2	1:A:57:GLN:HE22	7	0.31
(1,628)	1:A:71:CYS:HB3	1:A:57:GLN:HE22	7	0.31
(1,60)	1:A:56:THR:H	1:A:57:GLN:H	19	0.31
(1,6)	1:A:23:ASP:H	1:A:24:GLY:H	15	0.31
(1,598)	1:A:74:GLY:HA2	1:A:69:ASN:HD22	17	0.31
(1,598)	1:A:74:GLY:HA3	1:A:69:ASN:HD22	17	0.31
(1,597)	1:A:74:GLY:HA2	1:A:69:ASN:HD22	17	0.31
(1,597)	1:A:74:GLY:HA3	1:A:69:ASN:HD22	17	0.31
(1,592)	1:A:74:GLY:HA2	1:A:69:ASN:HD21	13	0.31
(1,592)	1:A:74:GLY:HA3	1:A:69:ASN:HD21	13	0.31
(1,555)	1:A:103:VAL:HG11	1:A:104:CYS:H	4	0.31
(1,555)	1:A:103:VAL:HG12	1:A:104:CYS:H	4	0.31
(1,555)	1:A:103:VAL:HG13	1:A:104:CYS:H	4	0.31
(1,555)	1:A:103:VAL:HG21	1:A:104:CYS:H	4	0.31
(1,555)	1:A:103:VAL:HG22	1:A:104:CYS:H	4	0.31
(1,555)	1:A:103:VAL:HG23	1:A:104:CYS:H	4	0.31
(1,555)	1:A:103:VAL:HG11	1:A:104:CYS:H	7	0.31
(1,555)	1:A:103:VAL:HG12	1:A:104:CYS:H	7	0.31
(1,555)	1:A:103:VAL:HG13	1:A:104:CYS:H	7	0.31
(1,555)	1:A:103:VAL:HG21	1:A:104:CYS:H	7	0.31
(1,555)	1:A:103:VAL:HG22	1:A:104:CYS:H	7	0.31
(1,555)	1:A:103:VAL:HG23	1:A:104:CYS:H	7	0.31
(1,55)	1:A:71:CYS:H	1:A:70:ASP:H	11	0.31
(1,55)	1:A:71:CYS:H	1:A:70:ASP:H	13	0.31
(1,517)	1:A:59:ILE:HG12	1:A:59:ILE:H	4	0.31

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,517)	1:A:59:ILE:HG12	1:A:59:ILE:H	4	0.31
(1,517)	1:A:59:ILE:HG13	1:A:59:ILE:H	4	0.31
(1,517)	1:A:59:ILE:HG13	1:A:59:ILE:H	4	0.31
(1,486)	1:A:7:ASP:HA	1:A:19:ARG:H	17	0.31
(1,466)	1:A:80:CYS:HA	1:A:79:ASN:H	2	0.31
(1,454)	1:A:78:GLU:HG2	1:A:76:ASP:H	20	0.31
(1,454)	1:A:78:GLU:HG3	1:A:76:ASP:H	20	0.31
(1,436)	1:A:73:SER:H	1:A:72:ASP:H	7	0.31
(1,399)	1:A:54:HIS:H	1:A:53:ALA:HB1	15	0.31
(1,399)	1:A:54:HIS:H	1:A:53:ALA:HB2	15	0.31
(1,399)	1:A:54:HIS:H	1:A:53:ALA:HB3	15	0.31
(1,386)	1:A:51:CYS:HB2	1:A:51:CYS:H	20	0.31
(1,386)	1:A:51:CYS:HB3	1:A:51:CYS:H	20	0.31
(1,375)	1:A:48:GLU:HA	1:A:49:ILE:H	12	0.31
(1,351)	1:A:32:SER:H	1:A:33:ASP:H	4	0.31
(1,350)	1:A:31:GLY:H	1:A:32:SER:H	19	0.31
(1,349)	1:A:32:SER:H	1:A:33:ASP:H	4	0.31
(1,339)	1:A:25:ASP:H	1:A:20:TRP:HB2	4	0.31
(1,339)	1:A:25:ASP:H	1:A:20:TRP:HB3	4	0.31
(1,335)	1:A:45:ARG:HD2	1:A:24:GLY:H	18	0.31
(1,335)	1:A:45:ARG:HD3	1:A:24:GLY:H	18	0.31
(1,298)	1:A:14:GLN:H	1:A:11:ASN:H	14	0.31
(1,298)	1:A:14:GLN:H	1:A:11:ASN:H	18	0.31
(1,296)	1:A:10:CYS:HB2	1:A:10:CYS:H	2	0.31
(1,296)	1:A:10:CYS:HB3	1:A:10:CYS:H	2	0.31
(1,296)	1:A:10:CYS:HB2	1:A:10:CYS:H	18	0.31
(1,296)	1:A:10:CYS:HB3	1:A:10:CYS:H	18	0.31
(1,286)	1:A:7:ASP:HB2	1:A:7:ASP:H	13	0.31
(1,286)	1:A:7:ASP:HB3	1:A:7:ASP:H	13	0.31
(1,281)	1:A:5:GLU:HB2	1:A:6:SER:H	3	0.31
(1,281)	1:A:5:GLU:HB2	1:A:6:SER:H	3	0.31
(1,281)	1:A:5:GLU:HB3	1:A:6:SER:H	3	0.31
(1,281)	1:A:5:GLU:HB3	1:A:6:SER:H	3	0.31
(1,28)	1:A:118:ASP:H	1:A:117:LEU:H	2	0.31
(1,28)	1:A:118:ASP:H	1:A:117:LEU:H	8	0.31
(1,28)	1:A:118:ASP:H	1:A:117:LEU:H	10	0.31
(1,226)	1:A:92:CYS:HB2	1:A:94:SER:H	10	0.31
(1,226)	1:A:92:CYS:HB3	1:A:94:SER:H	10	0.31
(1,205)	1:A:98:ILE:HG12	1:A:98:ILE:H	4	0.31
(1,205)	1:A:98:ILE:HG13	1:A:98:ILE:H	4	0.31
(1,205)	1:A:98:ILE:HG12	1:A:98:ILE:H	7	0.31
(1,205)	1:A:98:ILE:HG13	1:A:98:ILE:H	7	0.31

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,205)	1:A:98:ILE:HG12	1:A:98:ILE:H	12	0.31
(1,205)	1:A:98:ILE:HG13	1:A:98:ILE:H	12	0.31
(1,18)	1:A:81:GLY:H	1:A:82:ASN:H	12	0.31
(1,174)	1:A:103:VAL:H	1:A:101:ASN:HB2	2	0.31
(1,174)	1:A:103:VAL:H	1:A:101:ASN:HB3	2	0.31
(1,158)	1:A:104:CYS:HA	1:A:105:ASN:H	18	0.31
(1,14)	1:A:110:CYS:H	1:A:109:ASP:H	15	0.31
(4,5)	1:A:49:ILE:O	1:A:59:ILE:H	3	0.3
(4,5)	1:A:49:ILE:O	1:A:59:ILE:H	17	0.3
(4,2)	1:A:90:PHE:O	1:A:98:ILE:H	14	0.3
(2,76)	1:A:28:CYS:HB2	1:A:32:SER:H	10	0.3
(2,76)	1:A:28:CYS:HB3	1:A:32:SER:H	10	0.3
(2,76)	1:A:29:GLU:HA	1:A:32:SER:H	10	0.3
(2,76)	1:A:32:SER:HA	1:A:32:SER:H	10	0.3
(2,76)	1:A:32:SER:HB2	1:A:32:SER:H	10	0.3
(2,76)	1:A:32:SER:HB3	1:A:32:SER:H	10	0.3
(2,76)	1:A:33:ASP:HA	1:A:32:SER:H	10	0.3
(2,76)	1:A:35:SER:HB2	1:A:32:SER:H	10	0.3
(2,76)	1:A:35:SER:HB3	1:A:32:SER:H	10	0.3
(2,43)	1:A:10:CYS:HA	1:A:14:GLN:H	5	0.3
(2,43)	1:A:11:ASN:HA	1:A:14:GLN:H	5	0.3
(2,43)	1:A:13:GLY:HA2	1:A:14:GLN:H	5	0.3
(2,43)	1:A:13:GLY:HA3	1:A:14:GLN:H	5	0.3
(2,42)	1:A:49:ILE:HG21	1:A:61:VAL:H	3	0.3
(2,42)	1:A:49:ILE:HG22	1:A:61:VAL:H	3	0.3
(2,42)	1:A:49:ILE:HG23	1:A:61:VAL:H	3	0.3
(2,42)	1:A:59:ILE:HD11	1:A:61:VAL:H	3	0.3
(2,42)	1:A:59:ILE:HD12	1:A:61:VAL:H	3	0.3
(2,42)	1:A:59:ILE:HD13	1:A:61:VAL:H	3	0.3
(2,42)	1:A:60:PRO:HB2	1:A:61:VAL:H	3	0.3
(2,42)	1:A:60:PRO:HB3	1:A:61:VAL:H	3	0.3
(2,42)	1:A:61:VAL:HG11	1:A:61:VAL:H	3	0.3
(2,42)	1:A:61:VAL:HG12	1:A:61:VAL:H	3	0.3
(2,42)	1:A:61:VAL:HG13	1:A:61:VAL:H	3	0.3
(2,42)	1:A:61:VAL:HG21	1:A:61:VAL:H	3	0.3
(2,42)	1:A:61:VAL:HG22	1:A:61:VAL:H	3	0.3
(2,42)	1:A:61:VAL:HG23	1:A:61:VAL:H	3	0.3
(2,42)	1:A:49:ILE:HG21	1:A:61:VAL:H	6	0.3
(2,42)	1:A:49:ILE:HG22	1:A:61:VAL:H	6	0.3
(2,42)	1:A:49:ILE:HG23	1:A:61:VAL:H	6	0.3
(2,42)	1:A:59:ILE:HD11	1:A:61:VAL:H	6	0.3
(2,42)	1:A:59:ILE:HD12	1:A:61:VAL:H	6	0.3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,42)	1:A:59:ILE:HD13	1:A:61:VAL:H	6	0.3
(2,42)	1:A:60:PRO:HB2	1:A:61:VAL:H	6	0.3
(2,42)	1:A:60:PRO:HB3	1:A:61:VAL:H	6	0.3
(2,42)	1:A:61:VAL:HG11	1:A:61:VAL:H	6	0.3
(2,42)	1:A:61:VAL:HG12	1:A:61:VAL:H	6	0.3
(2,42)	1:A:61:VAL:HG13	1:A:61:VAL:H	6	0.3
(2,42)	1:A:61:VAL:HG21	1:A:61:VAL:H	6	0.3
(2,42)	1:A:61:VAL:HG22	1:A:61:VAL:H	6	0.3
(2,42)	1:A:61:VAL:HG23	1:A:61:VAL:H	6	0.3
(2,42)	1:A:49:ILE:HG21	1:A:61:VAL:H	7	0.3
(2,42)	1:A:49:ILE:HG22	1:A:61:VAL:H	7	0.3
(2,42)	1:A:49:ILE:HG23	1:A:61:VAL:H	7	0.3
(2,42)	1:A:59:ILE:HD11	1:A:61:VAL:H	7	0.3
(2,42)	1:A:59:ILE:HD12	1:A:61:VAL:H	7	0.3
(2,42)	1:A:59:ILE:HD13	1:A:61:VAL:H	7	0.3
(2,42)	1:A:60:PRO:HB2	1:A:61:VAL:H	7	0.3
(2,42)	1:A:60:PRO:HB3	1:A:61:VAL:H	7	0.3
(2,42)	1:A:61:VAL:HG11	1:A:61:VAL:H	7	0.3
(2,42)	1:A:61:VAL:HG12	1:A:61:VAL:H	7	0.3
(2,42)	1:A:61:VAL:HG13	1:A:61:VAL:H	7	0.3
(2,42)	1:A:61:VAL:HG21	1:A:61:VAL:H	7	0.3
(2,42)	1:A:61:VAL:HG22	1:A:61:VAL:H	7	0.3
(2,42)	1:A:61:VAL:HG23	1:A:61:VAL:H	7	0.3
(2,42)	1:A:49:ILE:HG21	1:A:61:VAL:H	11	0.3
(2,42)	1:A:49:ILE:HG22	1:A:61:VAL:H	11	0.3
(2,42)	1:A:49:ILE:HG23	1:A:61:VAL:H	11	0.3
(2,42)	1:A:59:ILE:HD11	1:A:61:VAL:H	11	0.3
(2,42)	1:A:59:ILE:HD12	1:A:61:VAL:H	11	0.3
(2,42)	1:A:59:ILE:HD13	1:A:61:VAL:H	11	0.3
(2,42)	1:A:60:PRO:HB2	1:A:61:VAL:H	11	0.3
(2,42)	1:A:60:PRO:HB3	1:A:61:VAL:H	11	0.3
(2,42)	1:A:61:VAL:HG11	1:A:61:VAL:H	11	0.3
(2,42)	1:A:61:VAL:HG12	1:A:61:VAL:H	11	0.3
(2,42)	1:A:61:VAL:HG13	1:A:61:VAL:H	11	0.3
(2,42)	1:A:61:VAL:HG21	1:A:61:VAL:H	11	0.3
(2,42)	1:A:61:VAL:HG22	1:A:61:VAL:H	11	0.3
(2,42)	1:A:61:VAL:HG23	1:A:61:VAL:H	11	0.3
(2,377)	1:A:33:ASP:HB2	1:A:33:ASP:H	3	0.3
(2,377)	1:A:33:ASP:HB3	1:A:33:ASP:H	3	0.3
(2,377)	1:A:34:GLU:HB2	1:A:33:ASP:H	3	0.3
(2,377)	1:A:34:GLU:HB3	1:A:33:ASP:H	3	0.3
(2,377)	1:A:33:ASP:HB2	1:A:33:ASP:H	16	0.3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,377)	1:A:33:ASP:HB3	1:A:33:ASP:H	16	0.3
(2,377)	1:A:34:GLU:HB2	1:A:33:ASP:H	16	0.3
(2,377)	1:A:34:GLU:HB3	1:A:33:ASP:H	16	0.3
(2,377)	1:A:33:ASP:HB2	1:A:33:ASP:H	17	0.3
(2,377)	1:A:33:ASP:HB3	1:A:33:ASP:H	17	0.3
(2,377)	1:A:34:GLU:HB2	1:A:33:ASP:H	17	0.3
(2,377)	1:A:34:GLU:HB3	1:A:33:ASP:H	17	0.3
(2,359)	1:A:83:ILE:HD11	1:A:98:ILE:H	8	0.3
(2,359)	1:A:83:ILE:HD12	1:A:98:ILE:H	8	0.3
(2,359)	1:A:83:ILE:HD13	1:A:98:ILE:H	8	0.3
(2,359)	1:A:98:ILE:HD11	1:A:98:ILE:H	8	0.3
(2,359)	1:A:98:ILE:HD12	1:A:98:ILE:H	8	0.3
(2,359)	1:A:98:ILE:HD13	1:A:98:ILE:H	8	0.3
(2,342)	1:A:17:PRO:HB2	1:A:20:TRP:HE1	7	0.3
(2,342)	1:A:17:PRO:HB3	1:A:20:TRP:HE1	7	0.3
(2,342)	1:A:19:ARG:HB2	1:A:20:TRP:HE1	7	0.3
(2,342)	1:A:19:ARG:HB3	1:A:20:TRP:HE1	7	0.3
(2,323)	1:A:64:ARG:HG2	1:A:68:GLU:H	2	0.3
(2,323)	1:A:64:ARG:HG3	1:A:68:GLU:H	2	0.3
(2,323)	1:A:68:GLU:HG3	1:A:68:GLU:H	2	0.3
(2,306)	1:A:71:CYS:HB2	1:A:77:GLU:H	9	0.3
(2,306)	1:A:71:CYS:HB3	1:A:77:GLU:H	9	0.3
(2,306)	1:A:80:CYS:HB2	1:A:77:GLU:H	9	0.3
(2,306)	1:A:80:CYS:HB3	1:A:77:GLU:H	9	0.3
(2,306)	1:A:71:CYS:HB2	1:A:77:GLU:H	13	0.3
(2,306)	1:A:71:CYS:HB3	1:A:77:GLU:H	13	0.3
(2,306)	1:A:80:CYS:HB2	1:A:77:GLU:H	13	0.3
(2,306)	1:A:80:CYS:HB3	1:A:77:GLU:H	13	0.3
(2,303)	1:A:75:GLU:HB2	1:A:77:GLU:H	5	0.3
(2,303)	1:A:75:GLU:HB3	1:A:77:GLU:H	5	0.3
(2,303)	1:A:77:GLU:HG2	1:A:77:GLU:H	5	0.3
(2,303)	1:A:77:GLU:HG3	1:A:77:GLU:H	5	0.3
(2,303)	1:A:78:GLU:HB2	1:A:77:GLU:H	5	0.3
(2,303)	1:A:78:GLU:HB3	1:A:77:GLU:H	5	0.3
(2,303)	1:A:87:PRO:HG2	1:A:77:GLU:H	5	0.3
(2,303)	1:A:87:PRO:HG3	1:A:77:GLU:H	5	0.3
(2,300)	1:A:44:CYS:HB2	1:A:48:GLU:H	20	0.3
(2,300)	1:A:44:CYS:HB3	1:A:48:GLU:H	20	0.3
(2,300)	1:A:48:GLU:HG2	1:A:48:GLU:H	20	0.3
(2,300)	1:A:48:GLU:HG3	1:A:48:GLU:H	20	0.3
(2,3)	1:A:49:ILE:HD11	1:A:49:ILE:H	4	0.3
(2,3)	1:A:49:ILE:HD12	1:A:49:ILE:H	4	0.3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,3)	1:A:49:ILE:HD13	1:A:49:ILE:H	4	0.3
(2,3)	1:A:49:ILE:HG12	1:A:49:ILE:H	4	0.3
(2,3)	1:A:49:ILE:HG13	1:A:49:ILE:H	4	0.3
(2,3)	1:A:49:ILE:HG21	1:A:49:ILE:H	4	0.3
(2,3)	1:A:49:ILE:HG22	1:A:49:ILE:H	4	0.3
(2,3)	1:A:49:ILE:HG23	1:A:49:ILE:H	4	0.3
(2,3)	1:A:59:ILE:HD11	1:A:49:ILE:H	4	0.3
(2,3)	1:A:59:ILE:HD12	1:A:49:ILE:H	4	0.3
(2,3)	1:A:59:ILE:HD13	1:A:49:ILE:H	4	0.3
(2,3)	1:A:59:ILE:HG21	1:A:49:ILE:H	4	0.3
(2,3)	1:A:59:ILE:HG22	1:A:49:ILE:H	4	0.3
(2,3)	1:A:59:ILE:HG23	1:A:49:ILE:H	4	0.3
(2,3)	1:A:61:VAL:HG11	1:A:49:ILE:H	4	0.3
(2,3)	1:A:61:VAL:HG12	1:A:49:ILE:H	4	0.3
(2,3)	1:A:61:VAL:HG13	1:A:49:ILE:H	4	0.3
(2,3)	1:A:61:VAL:HG21	1:A:49:ILE:H	4	0.3
(2,3)	1:A:61:VAL:HG21	1:A:49:ILE:H	4	0.3
(2,3)	1:A:61:VAL:HG22	1:A:49:ILE:H	4	0.3
(2,3)	1:A:61:VAL:HG22	1:A:49:ILE:H	4	0.3
(2,3)	1:A:61:VAL:HG23	1:A:49:ILE:H	4	0.3
(2,3)	1:A:61:VAL:HG23	1:A:49:ILE:H	4	0.3
(2,281)	1:A:10:CYS:HA	1:A:11:ASN:HD22	11	0.3
(2,281)	1:A:11:ASN:HA	1:A:11:ASN:HD22	11	0.3
(2,277)	1:A:19:ARG:HG2	1:A:19:ARG:H	12	0.3
(2,277)	1:A:19:ARG:HG2	1:A:19:ARG:H	12	0.3
(2,277)	1:A:19:ARG:HG3	1:A:19:ARG:H	12	0.3
(2,277)	1:A:19:ARG:HG3	1:A:19:ARG:H	12	0.3
(2,277)	1:A:21:LYS:HD2	1:A:19:ARG:H	12	0.3
(2,266)	1:A:31:GLY:HA2	1:A:32:SER:H	1	0.3
(2,266)	1:A:31:GLY:HA3	1:A:32:SER:H	1	0.3
(2,266)	1:A:32:SER:HB2	1:A:32:SER:H	1	0.3
(2,266)	1:A:32:SER:HB3	1:A:32:SER:H	1	0.3
(2,262)	1:A:51:CYS:HB2	1:A:74:GLY:H	3	0.3
(2,262)	1:A:51:CYS:HB3	1:A:74:GLY:H	3	0.3
(2,262)	1:A:71:CYS:HB2	1:A:74:GLY:H	3	0.3
(2,262)	1:A:71:CYS:HB3	1:A:74:GLY:H	3	0.3
(2,262)	1:A:51:CYS:HB2	1:A:74:GLY:H	18	0.3
(2,262)	1:A:51:CYS:HB3	1:A:74:GLY:H	18	0.3
(2,262)	1:A:71:CYS:HB2	1:A:74:GLY:H	18	0.3
(2,262)	1:A:71:CYS:HB3	1:A:74:GLY:H	18	0.3
(2,228)	1:A:28:CYS:HB2	1:A:28:CYS:H	18	0.3
(2,228)	1:A:28:CYS:HB3	1:A:28:CYS:H	18	0.3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,228)	1:A:29:GLU:HA	1:A:28:CYS:H	18	0.3
(2,228)	1:A:32:SER:HA	1:A:28:CYS:H	18	0.3
(2,227)	1:A:19:ARG:HG2	1:A:21:LYS:H	6	0.3
(2,227)	1:A:19:ARG:HG2	1:A:21:LYS:H	6	0.3
(2,227)	1:A:19:ARG:HG3	1:A:21:LYS:H	6	0.3
(2,227)	1:A:19:ARG:HG3	1:A:21:LYS:H	6	0.3
(2,227)	1:A:21:LYS:HB2	1:A:21:LYS:H	6	0.3
(2,227)	1:A:21:LYS:HB3	1:A:21:LYS:H	6	0.3
(2,227)	1:A:21:LYS:HD2	1:A:21:LYS:H	6	0.3
(2,227)	1:A:21:LYS:HD3	1:A:21:LYS:H	6	0.3
(2,227)	1:A:19:ARG:HG2	1:A:21:LYS:H	7	0.3
(2,227)	1:A:19:ARG:HG2	1:A:21:LYS:H	7	0.3
(2,227)	1:A:19:ARG:HG3	1:A:21:LYS:H	7	0.3
(2,227)	1:A:19:ARG:HG3	1:A:21:LYS:H	7	0.3
(2,227)	1:A:21:LYS:HB2	1:A:21:LYS:H	7	0.3
(2,227)	1:A:21:LYS:HB3	1:A:21:LYS:H	7	0.3
(2,227)	1:A:21:LYS:HD2	1:A:21:LYS:H	7	0.3
(2,227)	1:A:21:LYS:HD3	1:A:21:LYS:H	7	0.3
(2,227)	1:A:19:ARG:HG2	1:A:21:LYS:H	11	0.3
(2,227)	1:A:19:ARG:HG2	1:A:21:LYS:H	11	0.3
(2,227)	1:A:19:ARG:HG3	1:A:21:LYS:H	11	0.3
(2,227)	1:A:19:ARG:HG3	1:A:21:LYS:H	11	0.3
(2,227)	1:A:21:LYS:HB2	1:A:21:LYS:H	11	0.3
(2,227)	1:A:21:LYS:HB3	1:A:21:LYS:H	11	0.3
(2,227)	1:A:21:LYS:HD2	1:A:21:LYS:H	11	0.3
(2,227)	1:A:21:LYS:HD3	1:A:21:LYS:H	11	0.3
(2,227)	1:A:19:ARG:HG2	1:A:21:LYS:H	19	0.3
(2,227)	1:A:19:ARG:HG2	1:A:21:LYS:H	19	0.3
(2,227)	1:A:19:ARG:HG3	1:A:21:LYS:H	19	0.3
(2,227)	1:A:19:ARG:HG3	1:A:21:LYS:H	19	0.3
(2,227)	1:A:21:LYS:HB2	1:A:21:LYS:H	19	0.3
(2,227)	1:A:21:LYS:HB3	1:A:21:LYS:H	19	0.3
(2,227)	1:A:21:LYS:HD2	1:A:21:LYS:H	19	0.3
(2,227)	1:A:21:LYS:HD3	1:A:21:LYS:H	19	0.3
(2,223)	1:A:45:ARG:HG2	1:A:45:ARG:H	19	0.3
(2,223)	1:A:45:ARG:HG3	1:A:45:ARG:H	19	0.3
(2,223)	1:A:46:ILE:HB	1:A:45:ARG:H	19	0.3
(2,216)	1:A:49:ILE:HD11	1:A:50:SER:H	2	0.3
(2,216)	1:A:49:ILE:HD12	1:A:50:SER:H	2	0.3
(2,216)	1:A:49:ILE:HD13	1:A:50:SER:H	2	0.3
(2,216)	1:A:49:ILE:HG12	1:A:50:SER:H	2	0.3
(2,216)	1:A:49:ILE:HG13	1:A:50:SER:H	2	0.3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,216)	1:A:49:ILE:HG21	1:A:50:SER:H	2	0.3
(2,216)	1:A:49:ILE:HG22	1:A:50:SER:H	2	0.3
(2,216)	1:A:49:ILE:HG23	1:A:50:SER:H	2	0.3
(2,216)	1:A:49:ILE:HD11	1:A:50:SER:H	7	0.3
(2,216)	1:A:49:ILE:HD12	1:A:50:SER:H	7	0.3
(2,216)	1:A:49:ILE:HD13	1:A:50:SER:H	7	0.3
(2,216)	1:A:49:ILE:HG12	1:A:50:SER:H	7	0.3
(2,216)	1:A:49:ILE:HG13	1:A:50:SER:H	7	0.3
(2,216)	1:A:49:ILE:HG21	1:A:50:SER:H	7	0.3
(2,216)	1:A:49:ILE:HG22	1:A:50:SER:H	7	0.3
(2,216)	1:A:49:ILE:HG23	1:A:50:SER:H	7	0.3
(2,202)	1:A:22:CYS:HA	1:A:23:ASP:H	2	0.3
(2,202)	1:A:23:ASP:HA	1:A:23:ASP:H	2	0.3
(2,202)	1:A:22:CYS:HA	1:A:23:ASP:H	6	0.3
(2,202)	1:A:23:ASP:HA	1:A:23:ASP:H	6	0.3
(2,202)	1:A:22:CYS:HA	1:A:23:ASP:H	11	0.3
(2,202)	1:A:23:ASP:HA	1:A:23:ASP:H	11	0.3
(2,202)	1:A:22:CYS:HA	1:A:23:ASP:H	18	0.3
(2,202)	1:A:23:ASP:HA	1:A:23:ASP:H	18	0.3
(2,184)	1:A:16:VAL:HG11	1:A:15:CYS:H	16	0.3
(2,184)	1:A:16:VAL:HG11	1:A:15:CYS:H	16	0.3
(2,184)	1:A:16:VAL:HG11	1:A:15:CYS:H	16	0.3
(2,184)	1:A:16:VAL:HG12	1:A:15:CYS:H	16	0.3
(2,184)	1:A:16:VAL:HG12	1:A:15:CYS:H	16	0.3
(2,184)	1:A:16:VAL:HG12	1:A:15:CYS:H	16	0.3
(2,184)	1:A:16:VAL:HG13	1:A:15:CYS:H	16	0.3
(2,184)	1:A:16:VAL:HG13	1:A:15:CYS:H	16	0.3
(2,184)	1:A:16:VAL:HG13	1:A:15:CYS:H	16	0.3
(2,184)	1:A:16:VAL:HG21	1:A:15:CYS:H	16	0.3
(2,184)	1:A:16:VAL:HG21	1:A:15:CYS:H	16	0.3
(2,184)	1:A:16:VAL:HG21	1:A:15:CYS:H	16	0.3
(2,184)	1:A:16:VAL:HG22	1:A:15:CYS:H	16	0.3
(2,184)	1:A:16:VAL:HG22	1:A:15:CYS:H	16	0.3
(2,184)	1:A:16:VAL:HG22	1:A:15:CYS:H	16	0.3
(2,184)	1:A:16:VAL:HG23	1:A:15:CYS:H	16	0.3
(2,184)	1:A:16:VAL:HG23	1:A:15:CYS:H	16	0.3
(2,184)	1:A:16:VAL:HG23	1:A:15:CYS:H	16	0.3
(2,18)	1:A:111:SER:HA	1:A:113:GLY:H	12	0.3
(2,18)	1:A:113:GLY:HA2	1:A:113:GLY:H	12	0.3
(2,18)	1:A:113:GLY:HA3	1:A:113:GLY:H	12	0.3
(2,18)	1:A:111:SER:HA	1:A:113:GLY:H	18	0.3
(2,18)	1:A:113:GLY:HA2	1:A:113:GLY:H	18	0.3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,18)	1:A:113:GLY:HA3	1:A:113:GLY:H	18	0.3
(2,18)	1:A:111:SER:HA	1:A:113:GLY:H	20	0.3
(2,18)	1:A:113:GLY:HA2	1:A:113:GLY:H	20	0.3
(2,18)	1:A:113:GLY:HA3	1:A:113:GLY:H	20	0.3
(2,177)	1:A:22:CYS:HB2	1:A:44:CYS:H	1	0.3
(2,177)	1:A:22:CYS:HB3	1:A:44:CYS:H	1	0.3
(2,177)	1:A:44:CYS:HB2	1:A:44:CYS:H	1	0.3
(2,177)	1:A:44:CYS:HB3	1:A:44:CYS:H	1	0.3
(2,177)	1:A:22:CYS:HB2	1:A:44:CYS:H	17	0.3
(2,177)	1:A:22:CYS:HB3	1:A:44:CYS:H	17	0.3
(2,177)	1:A:44:CYS:HB2	1:A:44:CYS:H	17	0.3
(2,177)	1:A:44:CYS:HB3	1:A:44:CYS:H	17	0.3
(2,162)	1:A:50:SER:HA	1:A:59:ILE:H	8	0.3
(2,162)	1:A:59:ILE:HA	1:A:59:ILE:H	8	0.3
(2,156)	1:A:51:CYS:HB2	1:A:71:CYS:H	20	0.3
(2,156)	1:A:51:CYS:HB3	1:A:71:CYS:H	20	0.3
(2,156)	1:A:71:CYS:HB2	1:A:71:CYS:H	20	0.3
(2,156)	1:A:71:CYS:HB3	1:A:71:CYS:H	20	0.3
(2,13)	1:A:110:CYS:HB2	1:A:113:GLY:H	14	0.3
(2,13)	1:A:110:CYS:HB3	1:A:113:GLY:H	14	0.3
(2,13)	1:A:111:SER:HB2	1:A:113:GLY:H	14	0.3
(2,13)	1:A:111:SER:HB3	1:A:113:GLY:H	14	0.3
(2,13)	1:A:113:GLY:HA2	1:A:113:GLY:H	14	0.3
(2,13)	1:A:113:GLY:HA3	1:A:113:GLY:H	14	0.3
(2,114)	1:A:16:VAL:HG11	1:A:16:VAL:H	6	0.3
(2,114)	1:A:16:VAL:HG12	1:A:16:VAL:H	6	0.3
(2,114)	1:A:16:VAL:HG13	1:A:16:VAL:H	6	0.3
(2,114)	1:A:16:VAL:HG21	1:A:16:VAL:H	6	0.3
(2,114)	1:A:16:VAL:HG21	1:A:16:VAL:H	6	0.3
(2,114)	1:A:16:VAL:HG22	1:A:16:VAL:H	6	0.3
(2,114)	1:A:16:VAL:HG22	1:A:16:VAL:H	6	0.3
(2,114)	1:A:16:VAL:HG23	1:A:16:VAL:H	6	0.3
(2,114)	1:A:16:VAL:HG23	1:A:16:VAL:H	6	0.3
(2,114)	1:A:16:VAL:HG11	1:A:16:VAL:H	8	0.3
(2,114)	1:A:16:VAL:HG12	1:A:16:VAL:H	8	0.3
(2,114)	1:A:16:VAL:HG13	1:A:16:VAL:H	8	0.3
(2,114)	1:A:16:VAL:HG21	1:A:16:VAL:H	8	0.3
(2,114)	1:A:16:VAL:HG21	1:A:16:VAL:H	8	0.3
(2,114)	1:A:16:VAL:HG22	1:A:16:VAL:H	8	0.3
(2,114)	1:A:16:VAL:HG22	1:A:16:VAL:H	8	0.3
(2,114)	1:A:16:VAL:HG23	1:A:16:VAL:H	8	0.3
(2,114)	1:A:16:VAL:HG23	1:A:16:VAL:H	8	0.3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,93)	1:A:8:PHE:H	1:A:7:ASP:HA	17	0.3
(1,916)	1:A:77:GLU:HB2	1:A:77:GLU:H	15	0.3
(1,916)	1:A:77:GLU:HB3	1:A:77:GLU:H	15	0.3
(1,907)	1:A:39:CYS:H	1:A:41:MET:H	16	0.3
(1,907)	1:A:39:CYS:H	1:A:41:MET:H	20	0.3
(1,904)	1:A:105:ASN:HB2	1:A:105:ASN:HD21	14	0.3
(1,904)	1:A:105:ASN:HB3	1:A:105:ASN:HD21	14	0.3
(1,896)	1:A:64:ARG:H	1:A:66:ASP:H	19	0.3
(1,895)	1:A:77:GLU:HG2	1:A:66:ASP:H	13	0.3
(1,895)	1:A:77:GLU:HG3	1:A:66:ASP:H	13	0.3
(1,894)	1:A:66:ASP:H	1:A:77:GLU:HG2	13	0.3
(1,894)	1:A:66:ASP:H	1:A:77:GLU:HG3	13	0.3
(1,891)	1:A:64:ARG:H	1:A:80:CYS:HB2	19	0.3
(1,891)	1:A:64:ARG:H	1:A:80:CYS:HB3	19	0.3
(1,863)	1:A:17:PRO:HD2	1:A:20:TRP:HE1	3	0.3
(1,863)	1:A:17:PRO:HD3	1:A:20:TRP:HE1	3	0.3
(1,863)	1:A:17:PRO:HD2	1:A:20:TRP:HE1	16	0.3
(1,863)	1:A:17:PRO:HD3	1:A:20:TRP:HE1	16	0.3
(1,863)	1:A:17:PRO:HD2	1:A:20:TRP:HE1	17	0.3
(1,863)	1:A:17:PRO:HD3	1:A:20:TRP:HE1	17	0.3
(1,856)	1:A:14:GLN:H	1:A:12:ASN:HD22	19	0.3
(1,85)	1:A:21:LYS:HG2	1:A:22:CYS:H	3	0.3
(1,85)	1:A:21:LYS:HG3	1:A:22:CYS:H	3	0.3
(1,831)	1:A:73:SER:H	1:A:75:GLU:H	16	0.3
(1,831)	1:A:73:SER:H	1:A:75:GLU:H	17	0.3
(1,794)	1:A:82:ASN:HD22	1:A:94:SER:H	11	0.3
(1,783)	1:A:71:CYS:HB2	1:A:74:GLY:H	12	0.3
(1,783)	1:A:71:CYS:HB3	1:A:74:GLY:H	12	0.3
(1,783)	1:A:71:CYS:HB2	1:A:74:GLY:H	20	0.3
(1,783)	1:A:71:CYS:HB3	1:A:74:GLY:H	20	0.3
(1,772)	1:A:68:GLU:H	1:A:64:ARG:H	9	0.3
(1,766)	1:A:48:GLU:HB2	1:A:58:CYS:H	6	0.3
(1,766)	1:A:48:GLU:HB3	1:A:58:CYS:H	6	0.3
(1,750)	1:A:57:GLN:HB2	1:A:52:GLY:H	5	0.3
(1,750)	1:A:57:GLN:HB2	1:A:52:GLY:H	5	0.3
(1,750)	1:A:57:GLN:HB3	1:A:52:GLY:H	5	0.3
(1,750)	1:A:57:GLN:HB3	1:A:52:GLY:H	5	0.3
(1,745)	1:A:48:GLU:HB2	1:A:49:ILE:H	10	0.3
(1,745)	1:A:48:GLU:HB3	1:A:49:ILE:H	10	0.3
(1,735)	1:A:28:CYS:HB2	1:A:33:ASP:H	13	0.3
(1,735)	1:A:28:CYS:HB3	1:A:33:ASP:H	13	0.3
(1,733)	1:A:32:SER:H	1:A:28:CYS:H	8	0.3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,731)	1:A:28:CYS:HB2	1:A:32:SER:H	1	0.3
(1,731)	1:A:28:CYS:HB3	1:A:32:SER:H	1	0.3
(1,729)	1:A:32:SER:H	1:A:28:CYS:H	8	0.3
(1,704)	1:A:100:ARG:HG2	1:A:100:ARG:H	5	0.3
(1,704)	1:A:100:ARG:HG2	1:A:100:ARG:H	5	0.3
(1,704)	1:A:100:ARG:HG3	1:A:100:ARG:H	5	0.3
(1,704)	1:A:100:ARG:HG3	1:A:100:ARG:H	5	0.3
(1,696)	1:A:44:CYS:HB2	1:A:34:GLU:H	1	0.3
(1,696)	1:A:44:CYS:HB3	1:A:34:GLU:H	1	0.3
(1,693)	1:A:21:LYS:HD2	1:A:21:LYS:H	14	0.3
(1,693)	1:A:21:LYS:HD3	1:A:21:LYS:H	14	0.3
(1,688)	1:A:69:ASN:H	1:A:69:ASN:HD22	15	0.3
(1,681)	1:A:79:ASN:HD21	1:A:87:PRO:HD2	18	0.3
(1,681)	1:A:79:ASN:HD21	1:A:87:PRO:HD3	18	0.3
(1,666)	1:A:105:ASN:HB2	1:A:105:ASN:HD21	14	0.3
(1,666)	1:A:105:ASN:HB3	1:A:105:ASN:HD21	14	0.3
(1,66)	1:A:23:ASP:H	1:A:24:GLY:H	9	0.3
(1,66)	1:A:23:ASP:H	1:A:24:GLY:H	11	0.3
(1,658)	1:A:102:PHE:HA	1:A:105:ASN:HD22	4	0.3
(1,6)	1:A:23:ASP:H	1:A:24:GLY:H	12	0.3
(1,592)	1:A:74:GLY:HA2	1:A:69:ASN:HD21	18	0.3
(1,592)	1:A:74:GLY:HA3	1:A:69:ASN:HD21	18	0.3
(1,555)	1:A:103:VAL:HG11	1:A:104:CYS:H	5	0.3
(1,555)	1:A:103:VAL:HG12	1:A:104:CYS:H	5	0.3
(1,555)	1:A:103:VAL:HG13	1:A:104:CYS:H	5	0.3
(1,555)	1:A:103:VAL:HG21	1:A:104:CYS:H	5	0.3
(1,555)	1:A:103:VAL:HG22	1:A:104:CYS:H	5	0.3
(1,555)	1:A:103:VAL:HG23	1:A:104:CYS:H	5	0.3
(1,55)	1:A:71:CYS:H	1:A:70:ASP:H	16	0.3
(1,549)	1:A:115:ASP:HA	1:A:104:CYS:H	18	0.3
(1,544)	1:A:110:CYS:H	1:A:108:ASP:HB2	9	0.3
(1,544)	1:A:110:CYS:H	1:A:108:ASP:HB2	9	0.3
(1,544)	1:A:110:CYS:H	1:A:108:ASP:HB3	9	0.3
(1,544)	1:A:110:CYS:H	1:A:108:ASP:HB3	9	0.3
(1,544)	1:A:110:CYS:H	1:A:108:ASP:HB2	16	0.3
(1,544)	1:A:110:CYS:H	1:A:108:ASP:HB2	16	0.3
(1,544)	1:A:110:CYS:H	1:A:108:ASP:HB3	16	0.3
(1,544)	1:A:110:CYS:H	1:A:108:ASP:HB3	16	0.3
(1,542)	1:A:112:ASP:H	1:A:114:SER:H	17	0.3
(1,518)	1:A:49:ILE:H	1:A:61:VAL:H	15	0.3
(1,51)	1:A:78:GLU:H	1:A:77:GLU:H	17	0.3
(1,480)	1:A:10:CYS:HB2	1:A:10:CYS:H	9	0.3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,480)	1:A:10:CYS:HB3	1:A:10:CYS:H	9	0.3
(1,436)	1:A:73:SER:H	1:A:72:ASP:H	5	0.3
(1,436)	1:A:73:SER:H	1:A:72:ASP:H	9	0.3
(1,418)	1:A:64:ARG:HA	1:A:66:ASP:H	19	0.3
(1,399)	1:A:54:HIS:H	1:A:53:ALA:HB1	11	0.3
(1,399)	1:A:54:HIS:H	1:A:53:ALA:HB2	11	0.3
(1,399)	1:A:54:HIS:H	1:A:53:ALA:HB3	11	0.3
(1,397)	1:A:54:HIS:H	1:A:54:HIS:HB2	6	0.3
(1,397)	1:A:54:HIS:H	1:A:54:HIS:HB3	6	0.3
(1,397)	1:A:54:HIS:H	1:A:54:HIS:HB2	17	0.3
(1,397)	1:A:54:HIS:H	1:A:54:HIS:HB3	17	0.3
(1,397)	1:A:54:HIS:H	1:A:54:HIS:HB2	19	0.3
(1,397)	1:A:54:HIS:H	1:A:54:HIS:HB3	19	0.3
(1,397)	1:A:54:HIS:H	1:A:54:HIS:HB2	20	0.3
(1,397)	1:A:54:HIS:H	1:A:54:HIS:HB3	20	0.3
(1,386)	1:A:51:CYS:HB2	1:A:51:CYS:H	13	0.3
(1,386)	1:A:51:CYS:HB3	1:A:51:CYS:H	13	0.3
(1,365)	1:A:43:THR:HB	1:A:43:THR:H	13	0.3
(1,351)	1:A:32:SER:H	1:A:33:ASP:H	18	0.3
(1,349)	1:A:32:SER:H	1:A:33:ASP:H	18	0.3
(1,339)	1:A:25:ASP:H	1:A:20:TRP:HB2	13	0.3
(1,339)	1:A:25:ASP:H	1:A:20:TRP:HB3	13	0.3
(1,327)	1:A:22:CYS:HB2	1:A:22:CYS:H	14	0.3
(1,327)	1:A:22:CYS:HB3	1:A:22:CYS:H	14	0.3
(1,327)	1:A:22:CYS:HB2	1:A:22:CYS:H	15	0.3
(1,327)	1:A:22:CYS:HB3	1:A:22:CYS:H	15	0.3
(1,323)	1:A:64:ARG:H	1:A:80:CYS:HB2	18	0.3
(1,323)	1:A:64:ARG:H	1:A:80:CYS:HB3	18	0.3
(1,320)	1:A:7:ASP:HA	1:A:18:SER:H	11	0.3
(1,320)	1:A:7:ASP:HA	1:A:18:SER:H	17	0.3
(1,312)	1:A:14:GLN:HG2	1:A:14:GLN:H	18	0.3
(1,312)	1:A:14:GLN:HG3	1:A:14:GLN:H	18	0.3
(1,296)	1:A:10:CYS:HB2	1:A:10:CYS:H	3	0.3
(1,296)	1:A:10:CYS:HB3	1:A:10:CYS:H	3	0.3
(1,296)	1:A:10:CYS:HB2	1:A:10:CYS:H	6	0.3
(1,296)	1:A:10:CYS:HB3	1:A:10:CYS:H	6	0.3
(1,296)	1:A:10:CYS:HB2	1:A:10:CYS:H	8	0.3
(1,296)	1:A:10:CYS:HB3	1:A:10:CYS:H	8	0.3
(1,296)	1:A:10:CYS:HB2	1:A:10:CYS:H	15	0.3
(1,296)	1:A:10:CYS:HB3	1:A:10:CYS:H	15	0.3
(1,293)	1:A:8:PHE:HB2	1:A:9:VAL:H	19	0.3
(1,293)	1:A:8:PHE:HB3	1:A:9:VAL:H	19	0.3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,281)	1:A:5:GLU:HB2	1:A:6:SER:H	19	0.3
(1,281)	1:A:5:GLU:HB2	1:A:6:SER:H	19	0.3
(1,281)	1:A:5:GLU:HB3	1:A:6:SER:H	19	0.3
(1,281)	1:A:5:GLU:HB3	1:A:6:SER:H	19	0.3
(1,28)	1:A:118:ASP:H	1:A:117:LEU:H	3	0.3
(1,28)	1:A:118:ASP:H	1:A:117:LEU:H	16	0.3
(1,189)	1:A:101:ASN:HB2	1:A:101:ASN:H	9	0.3
(1,189)	1:A:101:ASN:HB3	1:A:101:ASN:H	9	0.3
(1,17)	1:A:81:GLY:H	1:A:80:CYS:H	3	0.3
(1,158)	1:A:104:CYS:HA	1:A:105:ASN:H	14	0.3
(1,158)	1:A:104:CYS:HA	1:A:105:ASN:H	15	0.3
(1,15)	1:A:109:ASP:H	1:A:110:CYS:H	13	0.3
(1,140)	1:A:108:ASP:H	1:A:108:ASP:HB2	4	0.3
(1,140)	1:A:108:ASP:H	1:A:108:ASP:HB3	4	0.3
(1,139)	1:A:109:ASP:H	1:A:109:ASP:HB2	19	0.3
(1,139)	1:A:109:ASP:H	1:A:109:ASP:HB3	19	0.3
(1,109)	1:A:119:CYS:H	1:A:117:LEU:HG	8	0.3
(4,7)	1:A:8:PHE:H	1:A:16:VAL:O	4	0.29
(4,7)	1:A:8:PHE:H	1:A:16:VAL:O	9	0.29
(4,5)	1:A:49:ILE:O	1:A:59:ILE:H	8	0.29
(2,97)	1:A:20:TRP:HB2	1:A:20:TRP:H	7	0.29
(2,97)	1:A:20:TRP:HB3	1:A:20:TRP:H	7	0.29
(2,97)	1:A:21:LYS:HA	1:A:20:TRP:H	7	0.29
(2,97)	1:A:20:TRP:HB2	1:A:20:TRP:H	19	0.29
(2,97)	1:A:20:TRP:HB3	1:A:20:TRP:H	19	0.29
(2,97)	1:A:21:LYS:HA	1:A:20:TRP:H	19	0.29
(2,80)	1:A:41:MET:HA	1:A:56:THR:H	2	0.29
(2,80)	1:A:42:ARG:HA	1:A:56:THR:H	2	0.29
(2,80)	1:A:56:THR:HB	1:A:56:THR:H	2	0.29
(2,80)	1:A:41:MET:HA	1:A:56:THR:H	16	0.29
(2,80)	1:A:42:ARG:HA	1:A:56:THR:H	16	0.29
(2,80)	1:A:56:THR:HB	1:A:56:THR:H	16	0.29
(2,8)	1:A:24:GLY:HA2	1:A:46:ILE:H	3	0.29
(2,8)	1:A:24:GLY:HA3	1:A:46:ILE:H	3	0.29
(2,8)	1:A:45:ARG:HA	1:A:46:ILE:H	3	0.29
(2,8)	1:A:24:GLY:HA2	1:A:46:ILE:H	6	0.29
(2,8)	1:A:24:GLY:HA3	1:A:46:ILE:H	6	0.29
(2,8)	1:A:45:ARG:HA	1:A:46:ILE:H	6	0.29
(2,8)	1:A:24:GLY:HA2	1:A:46:ILE:H	18	0.29
(2,8)	1:A:24:GLY:HA3	1:A:46:ILE:H	18	0.29
(2,8)	1:A:45:ARG:HA	1:A:46:ILE:H	18	0.29
(2,76)	1:A:28:CYS:HB2	1:A:32:SER:H	5	0.29

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,76)	1:A:28:CYS:HB3	1:A:32:SER:H	5	0.29
(2,76)	1:A:29:GLU:HA	1:A:32:SER:H	5	0.29
(2,76)	1:A:32:SER:HA	1:A:32:SER:H	5	0.29
(2,76)	1:A:32:SER:HB2	1:A:32:SER:H	5	0.29
(2,76)	1:A:32:SER:HB3	1:A:32:SER:H	5	0.29
(2,76)	1:A:33:ASP:HA	1:A:32:SER:H	5	0.29
(2,76)	1:A:35:SER:HB2	1:A:32:SER:H	5	0.29
(2,76)	1:A:35:SER:HB3	1:A:32:SER:H	5	0.29
(2,72)	1:A:110:CYS:HB2	1:A:113:GLY:H	14	0.29
(2,72)	1:A:110:CYS:HB3	1:A:113:GLY:H	14	0.29
(2,72)	1:A:112:ASP:HB2	1:A:113:GLY:H	14	0.29
(2,72)	1:A:112:ASP:HB3	1:A:113:GLY:H	14	0.29
(2,52)	1:A:60:PRO:HD2	1:A:63:TRP:HE1	8	0.29
(2,52)	1:A:60:PRO:HD3	1:A:63:TRP:HE1	8	0.29
(2,52)	1:A:80:CYS:HB2	1:A:63:TRP:HE1	8	0.29
(2,52)	1:A:80:CYS:HB3	1:A:63:TRP:HE1	8	0.29
(2,43)	1:A:10:CYS:HA	1:A:14:GLN:H	1	0.29
(2,43)	1:A:11:ASN:HA	1:A:14:GLN:H	1	0.29
(2,43)	1:A:13:GLY:HA2	1:A:14:GLN:H	1	0.29
(2,43)	1:A:13:GLY:HA3	1:A:14:GLN:H	1	0.29
(2,43)	1:A:10:CYS:HA	1:A:14:GLN:H	2	0.29
(2,43)	1:A:11:ASN:HA	1:A:14:GLN:H	2	0.29
(2,43)	1:A:13:GLY:HA2	1:A:14:GLN:H	2	0.29
(2,43)	1:A:13:GLY:HA3	1:A:14:GLN:H	2	0.29
(2,43)	1:A:10:CYS:HA	1:A:14:GLN:H	9	0.29
(2,43)	1:A:11:ASN:HA	1:A:14:GLN:H	9	0.29
(2,43)	1:A:13:GLY:HA2	1:A:14:GLN:H	9	0.29
(2,43)	1:A:13:GLY:HA3	1:A:14:GLN:H	9	0.29
(2,43)	1:A:10:CYS:HA	1:A:14:GLN:H	19	0.29
(2,43)	1:A:11:ASN:HA	1:A:14:GLN:H	19	0.29
(2,43)	1:A:13:GLY:HA2	1:A:14:GLN:H	19	0.29
(2,43)	1:A:13:GLY:HA3	1:A:14:GLN:H	19	0.29
(2,42)	1:A:49:ILE:HG21	1:A:61:VAL:H	5	0.29
(2,42)	1:A:49:ILE:HG22	1:A:61:VAL:H	5	0.29
(2,42)	1:A:49:ILE:HG23	1:A:61:VAL:H	5	0.29
(2,42)	1:A:59:ILE:HD11	1:A:61:VAL:H	5	0.29
(2,42)	1:A:59:ILE:HD12	1:A:61:VAL:H	5	0.29
(2,42)	1:A:59:ILE:HD13	1:A:61:VAL:H	5	0.29
(2,42)	1:A:60:PRO:HB2	1:A:61:VAL:H	5	0.29
(2,42)	1:A:60:PRO:HB3	1:A:61:VAL:H	5	0.29
(2,42)	1:A:61:VAL:HG11	1:A:61:VAL:H	5	0.29
(2,42)	1:A:61:VAL:HG12	1:A:61:VAL:H	5	0.29

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,42)	1:A:61:VAL:HG13	1:A:61:VAL:H	5	0.29
(2,42)	1:A:61:VAL:HG21	1:A:61:VAL:H	5	0.29
(2,42)	1:A:61:VAL:HG22	1:A:61:VAL:H	5	0.29
(2,42)	1:A:61:VAL:HG23	1:A:61:VAL:H	5	0.29
(2,42)	1:A:49:ILE:HG21	1:A:61:VAL:H	18	0.29
(2,42)	1:A:49:ILE:HG22	1:A:61:VAL:H	18	0.29
(2,42)	1:A:49:ILE:HG23	1:A:61:VAL:H	18	0.29
(2,42)	1:A:59:ILE:HD11	1:A:61:VAL:H	18	0.29
(2,42)	1:A:59:ILE:HD12	1:A:61:VAL:H	18	0.29
(2,42)	1:A:59:ILE:HD13	1:A:61:VAL:H	18	0.29
(2,42)	1:A:60:PRO:HB2	1:A:61:VAL:H	18	0.29
(2,42)	1:A:60:PRO:HB3	1:A:61:VAL:H	18	0.29
(2,42)	1:A:61:VAL:HG11	1:A:61:VAL:H	18	0.29
(2,42)	1:A:61:VAL:HG12	1:A:61:VAL:H	18	0.29
(2,42)	1:A:61:VAL:HG13	1:A:61:VAL:H	18	0.29
(2,42)	1:A:61:VAL:HG21	1:A:61:VAL:H	18	0.29
(2,42)	1:A:61:VAL:HG22	1:A:61:VAL:H	18	0.29
(2,42)	1:A:61:VAL:HG23	1:A:61:VAL:H	18	0.29
(2,42)	1:A:49:ILE:HG21	1:A:61:VAL:H	20	0.29
(2,42)	1:A:49:ILE:HG22	1:A:61:VAL:H	20	0.29
(2,42)	1:A:49:ILE:HG23	1:A:61:VAL:H	20	0.29
(2,42)	1:A:59:ILE:HD11	1:A:61:VAL:H	20	0.29
(2,42)	1:A:59:ILE:HD12	1:A:61:VAL:H	20	0.29
(2,42)	1:A:59:ILE:HD13	1:A:61:VAL:H	20	0.29
(2,42)	1:A:60:PRO:HB2	1:A:61:VAL:H	20	0.29
(2,42)	1:A:60:PRO:HB3	1:A:61:VAL:H	20	0.29
(2,42)	1:A:61:VAL:HG11	1:A:61:VAL:H	20	0.29
(2,42)	1:A:61:VAL:HG12	1:A:61:VAL:H	20	0.29
(2,42)	1:A:61:VAL:HG13	1:A:61:VAL:H	20	0.29
(2,42)	1:A:61:VAL:HG21	1:A:61:VAL:H	20	0.29
(2,42)	1:A:61:VAL:HG22	1:A:61:VAL:H	20	0.29
(2,42)	1:A:61:VAL:HG23	1:A:61:VAL:H	20	0.29
(2,377)	1:A:33:ASP:HB2	1:A:33:ASP:H	18	0.29
(2,377)	1:A:33:ASP:HB3	1:A:33:ASP:H	18	0.29
(2,377)	1:A:34:GLU:HB2	1:A:33:ASP:H	18	0.29
(2,377)	1:A:34:GLU:HB3	1:A:33:ASP:H	18	0.29
(2,375)	1:A:48:GLU:HB2	1:A:61:VAL:H	13	0.29
(2,375)	1:A:48:GLU:HB3	1:A:61:VAL:H	13	0.29
(2,375)	1:A:60:PRO:HD3	1:A:61:VAL:H	13	0.29
(2,375)	1:A:48:GLU:HB2	1:A:61:VAL:H	16	0.29
(2,375)	1:A:48:GLU:HB3	1:A:61:VAL:H	16	0.29
(2,375)	1:A:60:PRO:HD3	1:A:61:VAL:H	16	0.29

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,375)	1:A:48:GLU:HB2	1:A:61:VAL:H	20	0.29
(2,375)	1:A:48:GLU:HB3	1:A:61:VAL:H	20	0.29
(2,375)	1:A:60:PRO:HD3	1:A:61:VAL:H	20	0.29
(2,359)	1:A:83:ILE:HD11	1:A:98:ILE:H	7	0.29
(2,359)	1:A:83:ILE:HD12	1:A:98:ILE:H	7	0.29
(2,359)	1:A:83:ILE:HD13	1:A:98:ILE:H	7	0.29
(2,359)	1:A:98:ILE:HD11	1:A:98:ILE:H	7	0.29
(2,359)	1:A:98:ILE:HD12	1:A:98:ILE:H	7	0.29
(2,359)	1:A:98:ILE:HD13	1:A:98:ILE:H	7	0.29
(2,345)	1:A:84:THR:HG1	1:A:85:CYS:H	8	0.29
(2,345)	1:A:84:THR:HG21	1:A:85:CYS:H	8	0.29
(2,345)	1:A:84:THR:HG22	1:A:85:CYS:H	8	0.29
(2,345)	1:A:84:THR:HG23	1:A:85:CYS:H	8	0.29
(2,345)	1:A:91:THR:HG21	1:A:85:CYS:H	8	0.29
(2,345)	1:A:91:THR:HG22	1:A:85:CYS:H	8	0.29
(2,345)	1:A:91:THR:HG23	1:A:85:CYS:H	8	0.29
(2,342)	1:A:17:PRO:HB2	1:A:20:TRP:HE1	3	0.29
(2,342)	1:A:17:PRO:HB3	1:A:20:TRP:HE1	3	0.29
(2,342)	1:A:19:ARG:HB2	1:A:20:TRP:HE1	3	0.29
(2,342)	1:A:19:ARG:HB3	1:A:20:TRP:HE1	3	0.29
(2,342)	1:A:17:PRO:HB2	1:A:20:TRP:HE1	18	0.29
(2,342)	1:A:17:PRO:HB3	1:A:20:TRP:HE1	18	0.29
(2,342)	1:A:19:ARG:HB2	1:A:20:TRP:HE1	18	0.29
(2,342)	1:A:19:ARG:HB3	1:A:20:TRP:HE1	18	0.29
(2,341)	1:A:78:GLU:HG2	1:A:78:GLU:H	18	0.29
(2,341)	1:A:78:GLU:HG3	1:A:78:GLU:H	18	0.29
(2,341)	1:A:87:PRO:HB2	1:A:78:GLU:H	18	0.29
(2,341)	1:A:87:PRO:HB3	1:A:78:GLU:H	18	0.29
(2,331)	1:A:2:THR:H	1:A:99:SER:H	2	0.29
(2,331)	1:A:3:CYS:H	1:A:99:SER:H	2	0.29
(2,331)	1:A:80:CYS:H	1:A:99:SER:H	2	0.29
(2,331)	1:A:81:GLY:H	1:A:99:SER:H	2	0.29
(2,331)	1:A:101:ASN:H	1:A:99:SER:H	2	0.29
(2,327)	1:A:64:ARG:HG2	1:A:71:CYS:H	15	0.29
(2,327)	1:A:64:ARG:HG3	1:A:71:CYS:H	15	0.29
(2,327)	1:A:68:GLU:HG2	1:A:71:CYS:H	15	0.29
(2,327)	1:A:68:GLU:HG3	1:A:71:CYS:H	15	0.29
(2,323)	1:A:64:ARG:HG2	1:A:68:GLU:H	9	0.29
(2,323)	1:A:64:ARG:HG3	1:A:68:GLU:H	9	0.29
(2,323)	1:A:68:GLU:HG3	1:A:68:GLU:H	9	0.29
(2,306)	1:A:71:CYS:HB2	1:A:77:GLU:H	3	0.29
(2,306)	1:A:71:CYS:HB3	1:A:77:GLU:H	3	0.29

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,306)	1:A:80:CYS:HB2	1:A:77:GLU:H	3	0.29
(2,306)	1:A:80:CYS:HB3	1:A:77:GLU:H	3	0.29
(2,300)	1:A:44:CYS:HB2	1:A:48:GLU:H	11	0.29
(2,300)	1:A:44:CYS:HB3	1:A:48:GLU:H	11	0.29
(2,300)	1:A:48:GLU:HG2	1:A:48:GLU:H	11	0.29
(2,300)	1:A:48:GLU:HG3	1:A:48:GLU:H	11	0.29
(2,300)	1:A:44:CYS:HB2	1:A:48:GLU:H	12	0.29
(2,300)	1:A:44:CYS:HB3	1:A:48:GLU:H	12	0.29
(2,300)	1:A:48:GLU:HG2	1:A:48:GLU:H	12	0.29
(2,300)	1:A:48:GLU:HG3	1:A:48:GLU:H	12	0.29
(2,293)	1:A:18:SER:HA	1:A:8:PHE:H	10	0.29
(2,293)	1:A:18:SER:HB2	1:A:8:PHE:H	10	0.29
(2,293)	1:A:18:SER:HB3	1:A:8:PHE:H	10	0.29
(2,29)	1:A:28:CYS:HA	1:A:29:GLU:H	5	0.29
(2,29)	1:A:30:ASP:HA	1:A:29:GLU:H	5	0.29
(2,29)	1:A:28:CYS:HA	1:A:29:GLU:H	14	0.29
(2,29)	1:A:30:ASP:HA	1:A:29:GLU:H	14	0.29
(2,281)	1:A:10:CYS:HA	1:A:11:ASN:HD22	16	0.29
(2,281)	1:A:11:ASN:HA	1:A:11:ASN:HD22	16	0.29
(2,278)	1:A:41:MET:HA	1:A:42:ARG:H	10	0.29
(2,278)	1:A:42:ARG:HA	1:A:42:ARG:H	10	0.29
(2,278)	1:A:43:THR:HA	1:A:42:ARG:H	10	0.29
(2,278)	1:A:56:THR:HB	1:A:42:ARG:H	10	0.29
(2,277)	1:A:19:ARG:HG2	1:A:19:ARG:H	2	0.29
(2,277)	1:A:19:ARG:HG2	1:A:19:ARG:H	2	0.29
(2,277)	1:A:19:ARG:HG3	1:A:19:ARG:H	2	0.29
(2,277)	1:A:19:ARG:HG3	1:A:19:ARG:H	2	0.29
(2,277)	1:A:21:LYS:HD2	1:A:19:ARG:H	2	0.29
(2,277)	1:A:19:ARG:HG2	1:A:19:ARG:H	7	0.29
(2,277)	1:A:19:ARG:HG2	1:A:19:ARG:H	7	0.29
(2,277)	1:A:19:ARG:HG3	1:A:19:ARG:H	7	0.29
(2,277)	1:A:19:ARG:HG3	1:A:19:ARG:H	7	0.29
(2,277)	1:A:21:LYS:HD2	1:A:19:ARG:H	7	0.29
(2,262)	1:A:51:CYS:HB2	1:A:74:GLY:H	5	0.29
(2,262)	1:A:51:CYS:HB3	1:A:74:GLY:H	5	0.29
(2,262)	1:A:71:CYS:HB2	1:A:74:GLY:H	5	0.29
(2,262)	1:A:71:CYS:HB3	1:A:74:GLY:H	5	0.29
(2,261)	1:A:110:CYS:HB2	1:A:110:CYS:H	18	0.29
(2,261)	1:A:110:CYS:HB3	1:A:110:CYS:H	18	0.29
(2,261)	1:A:111:SER:HB2	1:A:110:CYS:H	18	0.29
(2,261)	1:A:113:GLY:HA2	1:A:110:CYS:H	18	0.29
(2,261)	1:A:113:GLY:HA3	1:A:110:CYS:H	18	0.29

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,228)	1:A:28:CYS:HB2	1:A:28:CYS:H	10	0.29
(2,228)	1:A:28:CYS:HB3	1:A:28:CYS:H	10	0.29
(2,228)	1:A:29:GLU:HA	1:A:28:CYS:H	10	0.29
(2,228)	1:A:32:SER:HA	1:A:28:CYS:H	10	0.29
(2,227)	1:A:19:ARG:HG2	1:A:21:LYS:H	9	0.29
(2,227)	1:A:19:ARG:HG2	1:A:21:LYS:H	9	0.29
(2,227)	1:A:19:ARG:HG3	1:A:21:LYS:H	9	0.29
(2,227)	1:A:19:ARG:HG3	1:A:21:LYS:H	9	0.29
(2,227)	1:A:21:LYS:HB2	1:A:21:LYS:H	9	0.29
(2,227)	1:A:21:LYS:HB3	1:A:21:LYS:H	9	0.29
(2,227)	1:A:21:LYS:HD2	1:A:21:LYS:H	9	0.29
(2,227)	1:A:21:LYS:HD3	1:A:21:LYS:H	9	0.29
(2,227)	1:A:19:ARG:HG2	1:A:21:LYS:H	10	0.29
(2,227)	1:A:19:ARG:HG2	1:A:21:LYS:H	10	0.29
(2,227)	1:A:19:ARG:HG3	1:A:21:LYS:H	10	0.29
(2,227)	1:A:19:ARG:HG3	1:A:21:LYS:H	10	0.29
(2,227)	1:A:21:LYS:HB2	1:A:21:LYS:H	10	0.29
(2,227)	1:A:21:LYS:HB3	1:A:21:LYS:H	10	0.29
(2,227)	1:A:21:LYS:HD2	1:A:21:LYS:H	10	0.29
(2,227)	1:A:21:LYS:HD3	1:A:21:LYS:H	10	0.29
(2,223)	1:A:45:ARG:HG2	1:A:45:ARG:H	11	0.29
(2,223)	1:A:45:ARG:HG3	1:A:45:ARG:H	11	0.29
(2,223)	1:A:46:ILE:HB	1:A:45:ARG:H	11	0.29
(2,22)	1:A:75:GLU:HA	1:A:78:GLU:H	18	0.29
(2,22)	1:A:87:PRO:HD2	1:A:78:GLU:H	18	0.29
(2,202)	1:A:22:CYS:HA	1:A:23:ASP:H	7	0.29
(2,202)	1:A:23:ASP:HA	1:A:23:ASP:H	7	0.29
(2,202)	1:A:22:CYS:HA	1:A:23:ASP:H	13	0.29
(2,202)	1:A:23:ASP:HA	1:A:23:ASP:H	13	0.29
(2,202)	1:A:22:CYS:HA	1:A:23:ASP:H	15	0.29
(2,202)	1:A:23:ASP:HA	1:A:23:ASP:H	15	0.29
(2,188)	1:A:16:VAL:HG11	1:A:19:ARG:H	9	0.29
(2,188)	1:A:16:VAL:HG12	1:A:19:ARG:H	9	0.29
(2,188)	1:A:16:VAL:HG13	1:A:19:ARG:H	9	0.29
(2,188)	1:A:16:VAL:HG21	1:A:19:ARG:H	9	0.29
(2,188)	1:A:16:VAL:HG22	1:A:19:ARG:H	9	0.29
(2,188)	1:A:16:VAL:HG23	1:A:19:ARG:H	9	0.29
(2,188)	1:A:16:VAL:HG11	1:A:19:ARG:H	10	0.29
(2,188)	1:A:16:VAL:HG12	1:A:19:ARG:H	10	0.29
(2,188)	1:A:16:VAL:HG13	1:A:19:ARG:H	10	0.29
(2,188)	1:A:16:VAL:HG21	1:A:19:ARG:H	10	0.29
(2,188)	1:A:16:VAL:HG22	1:A:19:ARG:H	10	0.29

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,188)	1:A:16:VAL:HG23	1:A:19:ARG:H	10	0.29
(2,18)	1:A:111:SER:HA	1:A:113:GLY:H	14	0.29
(2,18)	1:A:113:GLY:HA2	1:A:113:GLY:H	14	0.29
(2,18)	1:A:113:GLY:HA3	1:A:113:GLY:H	14	0.29
(2,18)	1:A:111:SER:HA	1:A:113:GLY:H	15	0.29
(2,18)	1:A:113:GLY:HA2	1:A:113:GLY:H	15	0.29
(2,18)	1:A:113:GLY:HA3	1:A:113:GLY:H	15	0.29
(2,177)	1:A:22:CYS:HB2	1:A:44:CYS:H	2	0.29
(2,177)	1:A:22:CYS:HB3	1:A:44:CYS:H	2	0.29
(2,177)	1:A:44:CYS:HB2	1:A:44:CYS:H	2	0.29
(2,177)	1:A:44:CYS:HB3	1:A:44:CYS:H	2	0.29
(2,177)	1:A:22:CYS:HB2	1:A:44:CYS:H	11	0.29
(2,177)	1:A:22:CYS:HB3	1:A:44:CYS:H	11	0.29
(2,177)	1:A:44:CYS:HB2	1:A:44:CYS:H	11	0.29
(2,177)	1:A:44:CYS:HB3	1:A:44:CYS:H	11	0.29
(2,162)	1:A:50:SER:HA	1:A:59:ILE:H	1	0.29
(2,162)	1:A:59:ILE:HA	1:A:59:ILE:H	1	0.29
(2,162)	1:A:50:SER:HA	1:A:59:ILE:H	4	0.29
(2,162)	1:A:59:ILE:HA	1:A:59:ILE:H	4	0.29
(2,162)	1:A:50:SER:HA	1:A:59:ILE:H	5	0.29
(2,162)	1:A:59:ILE:HA	1:A:59:ILE:H	5	0.29
(2,162)	1:A:50:SER:HA	1:A:59:ILE:H	6	0.29
(2,162)	1:A:59:ILE:HA	1:A:59:ILE:H	6	0.29
(2,162)	1:A:50:SER:HA	1:A:59:ILE:H	11	0.29
(2,162)	1:A:59:ILE:HA	1:A:59:ILE:H	11	0.29
(2,162)	1:A:50:SER:HA	1:A:59:ILE:H	17	0.29
(2,162)	1:A:59:ILE:HA	1:A:59:ILE:H	17	0.29
(2,137)	1:A:116:GLU:HB2	1:A:117:LEU:H	6	0.29
(2,137)	1:A:116:GLU:HB3	1:A:117:LEU:H	6	0.29
(2,137)	1:A:117:LEU:HB2	1:A:117:LEU:H	6	0.29
(2,137)	1:A:117:LEU:HB3	1:A:117:LEU:H	6	0.29
(2,116)	1:A:37:GLU:HB2	1:A:38:GLN:HE22	2	0.29
(2,116)	1:A:37:GLU:HB3	1:A:38:GLN:HE22	2	0.29
(2,116)	1:A:37:GLU:HB3	1:A:38:GLN:HE22	2	0.29
(2,116)	1:A:38:GLN:HB2	1:A:38:GLN:HE22	2	0.29
(2,116)	1:A:38:GLN:HB2	1:A:38:GLN:HE22	2	0.29
(2,116)	1:A:38:GLN:HB3	1:A:38:GLN:HE22	2	0.29
(2,116)	1:A:37:GLU:HB2	1:A:38:GLN:HE22	5	0.29
(2,116)	1:A:37:GLU:HB3	1:A:38:GLN:HE22	5	0.29
(2,116)	1:A:37:GLU:HB3	1:A:38:GLN:HE22	5	0.29
(2,116)	1:A:38:GLN:HB2	1:A:38:GLN:HE22	5	0.29
(2,116)	1:A:38:GLN:HB2	1:A:38:GLN:HE22	5	0.29

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,116)	1:A:38:GLN:HB3	1:A:38:GLN:HE22	5	0.29
(2,114)	1:A:16:VAL:HG11	1:A:16:VAL:H	14	0.29
(2,114)	1:A:16:VAL:HG12	1:A:16:VAL:H	14	0.29
(2,114)	1:A:16:VAL:HG13	1:A:16:VAL:H	14	0.29
(2,114)	1:A:16:VAL:HG21	1:A:16:VAL:H	14	0.29
(2,114)	1:A:16:VAL:HG21	1:A:16:VAL:H	14	0.29
(2,114)	1:A:16:VAL:HG22	1:A:16:VAL:H	14	0.29
(2,114)	1:A:16:VAL:HG22	1:A:16:VAL:H	14	0.29
(2,114)	1:A:16:VAL:HG23	1:A:16:VAL:H	14	0.29
(2,114)	1:A:16:VAL:HG23	1:A:16:VAL:H	14	0.29
(1,92)	1:A:7:ASP:HB2	1:A:8:PHE:H	13	0.29
(1,92)	1:A:7:ASP:HB3	1:A:8:PHE:H	13	0.29
(1,916)	1:A:77:GLU:HB2	1:A:77:GLU:H	12	0.29
(1,916)	1:A:77:GLU:HB3	1:A:77:GLU:H	12	0.29
(1,909)	1:A:43:THR:HG1	1:A:46:ILE:H	15	0.29
(1,909)	1:A:43:THR:HG21	1:A:46:ILE:H	15	0.29
(1,909)	1:A:43:THR:HG22	1:A:46:ILE:H	15	0.29
(1,909)	1:A:43:THR:HG23	1:A:46:ILE:H	15	0.29
(1,907)	1:A:39:CYS:H	1:A:41:MET:H	1	0.29
(1,907)	1:A:39:CYS:H	1:A:41:MET:H	9	0.29
(1,907)	1:A:39:CYS:H	1:A:41:MET:H	17	0.29
(1,904)	1:A:105:ASN:HB2	1:A:105:ASN:HD21	12	0.29
(1,904)	1:A:105:ASN:HB3	1:A:105:ASN:HD21	12	0.29
(1,904)	1:A:105:ASN:HB2	1:A:105:ASN:HD21	15	0.29
(1,904)	1:A:105:ASN:HB3	1:A:105:ASN:HD21	15	0.29
(1,904)	1:A:105:ASN:HB2	1:A:105:ASN:HD21	16	0.29
(1,904)	1:A:105:ASN:HB3	1:A:105:ASN:HD21	16	0.29
(1,904)	1:A:105:ASN:HB2	1:A:105:ASN:HD21	18	0.29
(1,904)	1:A:105:ASN:HB3	1:A:105:ASN:HD21	18	0.29
(1,896)	1:A:64:ARG:H	1:A:66:ASP:H	5	0.29
(1,886)	1:A:51:CYS:H	1:A:58:CYS:H	1	0.29
(1,886)	1:A:51:CYS:H	1:A:58:CYS:H	5	0.29
(1,862)	1:A:21:LYS:HE2	1:A:19:ARG:H	6	0.29
(1,862)	1:A:21:LYS:HE3	1:A:19:ARG:H	6	0.29
(1,860)	1:A:16:VAL:HB	1:A:19:ARG:H	6	0.29
(1,860)	1:A:16:VAL:HB	1:A:19:ARG:H	8	0.29
(1,859)	1:A:3:CYS:HB2	1:A:18:SER:H	6	0.29
(1,859)	1:A:3:CYS:HB3	1:A:18:SER:H	6	0.29
(1,85)	1:A:21:LYS:HG2	1:A:22:CYS:H	4	0.29
(1,85)	1:A:21:LYS:HG3	1:A:22:CYS:H	4	0.29
(1,85)	1:A:21:LYS:HG2	1:A:22:CYS:H	15	0.29
(1,85)	1:A:21:LYS:HG3	1:A:22:CYS:H	15	0.29

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,849)	1:A:33:ASP:H	1:A:11:ASN:H	6	0.29
(1,849)	1:A:33:ASP:H	1:A:11:ASN:H	13	0.29
(1,849)	1:A:33:ASP:H	1:A:11:ASN:H	17	0.29
(1,842)	1:A:80:CYS:HA	1:A:84:THR:H	11	0.29
(1,831)	1:A:73:SER:H	1:A:75:GLU:H	13	0.29
(1,808)	1:A:116:GLU:HB2	1:A:104:CYS:H	16	0.29
(1,808)	1:A:116:GLU:HB3	1:A:104:CYS:H	16	0.29
(1,801)	1:A:102:PHE:HB2	1:A:98:ILE:H	6	0.29
(1,801)	1:A:102:PHE:HB3	1:A:98:ILE:H	6	0.29
(1,801)	1:A:102:PHE:HB2	1:A:98:ILE:H	8	0.29
(1,801)	1:A:102:PHE:HB3	1:A:98:ILE:H	8	0.29
(1,800)	1:A:85:CYS:HB2	1:A:98:ILE:H	7	0.29
(1,800)	1:A:85:CYS:HB3	1:A:98:ILE:H	7	0.29
(1,800)	1:A:85:CYS:HB2	1:A:98:ILE:H	17	0.29
(1,800)	1:A:85:CYS:HB3	1:A:98:ILE:H	17	0.29
(1,799)	1:A:85:CYS:HA	1:A:97:CYS:H	3	0.29
(1,796)	1:A:96:ARG:H	1:A:83:ILE:HG21	1	0.29
(1,796)	1:A:96:ARG:H	1:A:83:ILE:HG22	1	0.29
(1,796)	1:A:96:ARG:H	1:A:83:ILE:HG23	1	0.29
(1,796)	1:A:96:ARG:H	1:A:83:ILE:HG21	16	0.29
(1,796)	1:A:96:ARG:H	1:A:83:ILE:HG22	16	0.29
(1,796)	1:A:96:ARG:H	1:A:83:ILE:HG23	16	0.29
(1,794)	1:A:82:ASN:HD22	1:A:94:SER:H	4	0.29
(1,79)	1:A:61:VAL:HB	1:A:61:VAL:H	12	0.29
(1,783)	1:A:71:CYS:HB2	1:A:74:GLY:H	11	0.29
(1,783)	1:A:71:CYS:HB3	1:A:74:GLY:H	11	0.29
(1,768)	1:A:58:CYS:HA	1:A:59:ILE:H	8	0.29
(1,768)	1:A:58:CYS:HA	1:A:59:ILE:H	14	0.29
(1,768)	1:A:58:CYS:HA	1:A:59:ILE:H	20	0.29
(1,766)	1:A:48:GLU:HB2	1:A:58:CYS:H	20	0.29
(1,766)	1:A:48:GLU:HB3	1:A:58:CYS:H	20	0.29
(1,706)	1:A:45:ARG:HB2	1:A:45:ARG:H	15	0.29
(1,706)	1:A:45:ARG:HB3	1:A:45:ARG:H	15	0.29
(1,698)	1:A:64:ARG:H	1:A:64:ARG:HG2	7	0.29
(1,698)	1:A:64:ARG:H	1:A:64:ARG:HG3	7	0.29
(1,681)	1:A:79:ASN:HD21	1:A:87:PRO:HD2	15	0.29
(1,681)	1:A:79:ASN:HD21	1:A:87:PRO:HD3	15	0.29
(1,670)	1:A:107:GLN:HB2	1:A:105:ASN:HD22	17	0.29
(1,670)	1:A:107:GLN:HB2	1:A:105:ASN:HD22	17	0.29
(1,670)	1:A:107:GLN:HB3	1:A:105:ASN:HD22	17	0.29
(1,670)	1:A:107:GLN:HB3	1:A:105:ASN:HD22	17	0.29
(1,666)	1:A:105:ASN:HB2	1:A:105:ASN:HD21	12	0.29

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,666)	1:A:105:ASN:HB3	1:A:105:ASN:HD21	12	0.29
(1,666)	1:A:105:ASN:HB2	1:A:105:ASN:HD21	15	0.29
(1,666)	1:A:105:ASN:HB3	1:A:105:ASN:HD21	15	0.29
(1,666)	1:A:105:ASN:HB2	1:A:105:ASN:HD21	16	0.29
(1,666)	1:A:105:ASN:HB3	1:A:105:ASN:HD21	16	0.29
(1,666)	1:A:105:ASN:HB2	1:A:105:ASN:HD21	18	0.29
(1,666)	1:A:105:ASN:HB3	1:A:105:ASN:HD21	18	0.29
(1,66)	1:A:23:ASP:H	1:A:24:GLY:H	13	0.29
(1,658)	1:A:102:PHE:HA	1:A:105:ASN:HD22	2	0.29
(1,628)	1:A:71:CYS:HB2	1:A:57:GLN:HE22	2	0.29
(1,628)	1:A:71:CYS:HB3	1:A:57:GLN:HE22	2	0.29
(1,592)	1:A:74:GLY:HA2	1:A:69:ASN:HD21	4	0.29
(1,592)	1:A:74:GLY:HA3	1:A:69:ASN:HD21	4	0.29
(1,592)	1:A:74:GLY:HA2	1:A:69:ASN:HD21	9	0.29
(1,592)	1:A:74:GLY:HA3	1:A:69:ASN:HD21	9	0.29
(1,585)	1:A:28:CYS:H	1:A:27:ASP:H	18	0.29
(1,580)	1:A:48:GLU:HG2	1:A:49:ILE:H	6	0.29
(1,580)	1:A:48:GLU:HG3	1:A:49:ILE:H	6	0.29
(1,569)	1:A:85:CYS:H	1:A:84:THR:H	13	0.29
(1,534)	1:A:77:GLU:HB2	1:A:77:GLU:H	20	0.29
(1,534)	1:A:77:GLU:HB3	1:A:77:GLU:H	20	0.29
(1,526)	1:A:64:ARG:H	1:A:67:GLY:H	1	0.29
(1,526)	1:A:64:ARG:H	1:A:67:GLY:H	18	0.29
(1,518)	1:A:49:ILE:H	1:A:61:VAL:H	13	0.29
(1,499)	1:A:33:ASP:HB2	1:A:33:ASP:H	8	0.29
(1,499)	1:A:33:ASP:HB3	1:A:33:ASP:H	8	0.29
(1,499)	1:A:33:ASP:HB2	1:A:33:ASP:H	14	0.29
(1,499)	1:A:33:ASP:HB3	1:A:33:ASP:H	14	0.29
(1,49)	1:A:94:SER:H	1:A:93:SER:H	13	0.29
(1,486)	1:A:7:ASP:HA	1:A:19:ARG:H	5	0.29
(1,483)	1:A:10:CYS:HB2	1:A:14:GLN:H	5	0.29
(1,483)	1:A:10:CYS:HB3	1:A:14:GLN:H	5	0.29
(1,483)	1:A:10:CYS:HB2	1:A:14:GLN:H	10	0.29
(1,483)	1:A:10:CYS:HB3	1:A:14:GLN:H	10	0.29
(1,483)	1:A:10:CYS:HB2	1:A:14:GLN:H	14	0.29
(1,483)	1:A:10:CYS:HB3	1:A:14:GLN:H	14	0.29
(1,466)	1:A:80:CYS:HA	1:A:79:ASN:H	6	0.29
(1,459)	1:A:70:ASP:HA	1:A:76:ASP:H	18	0.29
(1,454)	1:A:78:GLU:HG2	1:A:76:ASP:H	2	0.29
(1,454)	1:A:78:GLU:HG3	1:A:76:ASP:H	2	0.29
(1,431)	1:A:72:ASP:H	1:A:70:ASP:H	10	0.29
(1,399)	1:A:54:HIS:H	1:A:53:ALA:HB1	3	0.29

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,399)	1:A:54:HIS:H	1:A:53:ALA:HB2	3	0.29
(1,399)	1:A:54:HIS:H	1:A:53:ALA:HB3	3	0.29
(1,397)	1:A:54:HIS:H	1:A:54:HIS:HB2	3	0.29
(1,397)	1:A:54:HIS:H	1:A:54:HIS:HB3	3	0.29
(1,397)	1:A:54:HIS:H	1:A:54:HIS:HB2	4	0.29
(1,397)	1:A:54:HIS:H	1:A:54:HIS:HB3	4	0.29
(1,397)	1:A:54:HIS:H	1:A:54:HIS:HB2	7	0.29
(1,397)	1:A:54:HIS:H	1:A:54:HIS:HB3	7	0.29
(1,397)	1:A:54:HIS:H	1:A:54:HIS:HB2	9	0.29
(1,397)	1:A:54:HIS:H	1:A:54:HIS:HB3	9	0.29
(1,397)	1:A:54:HIS:H	1:A:54:HIS:HB2	12	0.29
(1,397)	1:A:54:HIS:H	1:A:54:HIS:HB3	12	0.29
(1,397)	1:A:54:HIS:H	1:A:54:HIS:HB2	13	0.29
(1,397)	1:A:54:HIS:H	1:A:54:HIS:HB3	13	0.29
(1,397)	1:A:54:HIS:H	1:A:54:HIS:HB2	16	0.29
(1,397)	1:A:54:HIS:H	1:A:54:HIS:HB3	16	0.29
(1,390)	1:A:51:CYS:HB2	1:A:52:GLY:H	7	0.29
(1,390)	1:A:51:CYS:HB3	1:A:52:GLY:H	7	0.29
(1,386)	1:A:51:CYS:HB2	1:A:51:CYS:H	9	0.29
(1,386)	1:A:51:CYS:HB3	1:A:51:CYS:H	9	0.29
(1,386)	1:A:51:CYS:HB2	1:A:51:CYS:H	11	0.29
(1,386)	1:A:51:CYS:HB3	1:A:51:CYS:H	11	0.29
(1,386)	1:A:51:CYS:HB2	1:A:51:CYS:H	16	0.29
(1,386)	1:A:51:CYS:HB3	1:A:51:CYS:H	16	0.29
(1,378)	1:A:48:GLU:HG2	1:A:49:ILE:H	6	0.29
(1,378)	1:A:48:GLU:HG3	1:A:49:ILE:H	6	0.29
(1,375)	1:A:48:GLU:HA	1:A:49:ILE:H	18	0.29
(1,365)	1:A:43:THR:HB	1:A:43:THR:H	8	0.29
(1,365)	1:A:43:THR:HB	1:A:43:THR:H	16	0.29
(1,339)	1:A:25:ASP:H	1:A:20:TRP:HB2	8	0.29
(1,339)	1:A:25:ASP:H	1:A:20:TRP:HB3	8	0.29
(1,327)	1:A:22:CYS:HB2	1:A:22:CYS:H	2	0.29
(1,327)	1:A:22:CYS:HB3	1:A:22:CYS:H	2	0.29
(1,327)	1:A:22:CYS:HB2	1:A:22:CYS:H	18	0.29
(1,327)	1:A:22:CYS:HB3	1:A:22:CYS:H	18	0.29
(1,320)	1:A:7:ASP:HA	1:A:18:SER:H	19	0.29
(1,312)	1:A:14:GLN:HG2	1:A:14:GLN:H	16	0.29
(1,312)	1:A:14:GLN:HG3	1:A:14:GLN:H	16	0.29
(1,298)	1:A:14:GLN:H	1:A:11:ASN:H	3	0.29
(1,293)	1:A:8:PHE:HB2	1:A:9:VAL:H	2	0.29
(1,293)	1:A:8:PHE:HB3	1:A:9:VAL:H	2	0.29
(1,286)	1:A:7:ASP:HB2	1:A:7:ASP:H	15	0.29

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,286)	1:A:7:ASP:HB3	1:A:7:ASP:H	15	0.29
(1,286)	1:A:7:ASP:HB2	1:A:7:ASP:H	17	0.29
(1,286)	1:A:7:ASP:HB3	1:A:7:ASP:H	17	0.29
(1,281)	1:A:5:GLU:HB2	1:A:6:SER:H	6	0.29
(1,281)	1:A:5:GLU:HB2	1:A:6:SER:H	6	0.29
(1,281)	1:A:5:GLU:HB3	1:A:6:SER:H	6	0.29
(1,281)	1:A:5:GLU:HB3	1:A:6:SER:H	6	0.29
(1,28)	1:A:118:ASP:H	1:A:117:LEU:H	13	0.29
(1,203)	1:A:89:GLU:HB2	1:A:98:ILE:H	4	0.29
(1,203)	1:A:89:GLU:HB3	1:A:98:ILE:H	4	0.29
(1,187)	1:A:103:VAL:HG11	1:A:102:PHE:H	18	0.29
(1,187)	1:A:103:VAL:HG12	1:A:102:PHE:H	18	0.29
(1,187)	1:A:103:VAL:HG13	1:A:102:PHE:H	18	0.29
(1,187)	1:A:103:VAL:HG21	1:A:102:PHE:H	18	0.29
(1,187)	1:A:103:VAL:HG22	1:A:102:PHE:H	18	0.29
(1,187)	1:A:103:VAL:HG23	1:A:102:PHE:H	18	0.29
(1,17)	1:A:81:GLY:H	1:A:80:CYS:H	17	0.29
(1,118)	1:A:115:ASP:H	1:A:113:GLY:H	17	0.29
(4,8)	1:A:8:PHE:O	1:A:16:VAL:H	20	0.28
(2,97)	1:A:20:TRP:HB2	1:A:20:TRP:H	6	0.28
(2,97)	1:A:20:TRP:HB3	1:A:20:TRP:H	6	0.28
(2,97)	1:A:21:LYS:HA	1:A:20:TRP:H	6	0.28
(2,72)	1:A:110:CYS:HB2	1:A:113:GLY:H	6	0.28
(2,72)	1:A:110:CYS:HB3	1:A:113:GLY:H	6	0.28
(2,72)	1:A:112:ASP:HB2	1:A:113:GLY:H	6	0.28
(2,72)	1:A:112:ASP:HB3	1:A:113:GLY:H	6	0.28
(2,66)	1:A:4:ALA:H	1:A:7:ASP:H	9	0.28
(2,66)	1:A:5:GLU:H	1:A:7:ASP:H	9	0.28
(2,66)	1:A:4:ALA:H	1:A:7:ASP:H	17	0.28
(2,66)	1:A:5:GLU:H	1:A:7:ASP:H	17	0.28
(2,54)	1:A:17:PRO:HB2	1:A:18:SER:H	8	0.28
(2,54)	1:A:17:PRO:HB3	1:A:18:SER:H	8	0.28
(2,54)	1:A:17:PRO:HG2	1:A:18:SER:H	8	0.28
(2,54)	1:A:17:PRO:HG3	1:A:18:SER:H	8	0.28
(2,46)	1:A:114:SER:HG	1:A:115:ASP:H	14	0.28
(2,46)	1:A:116:GLU:HA	1:A:115:ASP:H	14	0.28
(2,46)	1:A:119:CYS:HA	1:A:115:ASP:H	14	0.28
(2,43)	1:A:10:CYS:HA	1:A:14:GLN:H	3	0.28
(2,43)	1:A:11:ASN:HA	1:A:14:GLN:H	3	0.28
(2,43)	1:A:13:GLY:HA2	1:A:14:GLN:H	3	0.28
(2,43)	1:A:13:GLY:HA3	1:A:14:GLN:H	3	0.28
(2,43)	1:A:10:CYS:HA	1:A:14:GLN:H	10	0.28

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,43)	1:A:11:ASN:HA	1:A:14:GLN:H	10	0.28
(2,43)	1:A:13:GLY:HA2	1:A:14:GLN:H	10	0.28
(2,43)	1:A:13:GLY:HA3	1:A:14:GLN:H	10	0.28
(2,43)	1:A:10:CYS:HA	1:A:14:GLN:H	14	0.28
(2,43)	1:A:11:ASN:HA	1:A:14:GLN:H	14	0.28
(2,43)	1:A:13:GLY:HA2	1:A:14:GLN:H	14	0.28
(2,43)	1:A:13:GLY:HA3	1:A:14:GLN:H	14	0.28
(2,43)	1:A:10:CYS:HA	1:A:14:GLN:H	18	0.28
(2,43)	1:A:11:ASN:HA	1:A:14:GLN:H	18	0.28
(2,43)	1:A:13:GLY:HA2	1:A:14:GLN:H	18	0.28
(2,43)	1:A:13:GLY:HA3	1:A:14:GLN:H	18	0.28
(2,42)	1:A:49:ILE:HG21	1:A:61:VAL:H	4	0.28
(2,42)	1:A:49:ILE:HG22	1:A:61:VAL:H	4	0.28
(2,42)	1:A:49:ILE:HG23	1:A:61:VAL:H	4	0.28
(2,42)	1:A:59:ILE:HD11	1:A:61:VAL:H	4	0.28
(2,42)	1:A:59:ILE:HD12	1:A:61:VAL:H	4	0.28
(2,42)	1:A:59:ILE:HD13	1:A:61:VAL:H	4	0.28
(2,42)	1:A:60:PRO:HB2	1:A:61:VAL:H	4	0.28
(2,42)	1:A:60:PRO:HB3	1:A:61:VAL:H	4	0.28
(2,42)	1:A:61:VAL:HG11	1:A:61:VAL:H	4	0.28
(2,42)	1:A:61:VAL:HG12	1:A:61:VAL:H	4	0.28
(2,42)	1:A:61:VAL:HG13	1:A:61:VAL:H	4	0.28
(2,42)	1:A:61:VAL:HG21	1:A:61:VAL:H	4	0.28
(2,42)	1:A:61:VAL:HG22	1:A:61:VAL:H	4	0.28
(2,42)	1:A:61:VAL:HG23	1:A:61:VAL:H	4	0.28
(2,377)	1:A:33:ASP:HB2	1:A:33:ASP:H	1	0.28
(2,377)	1:A:33:ASP:HB3	1:A:33:ASP:H	1	0.28
(2,377)	1:A:34:GLU:HB2	1:A:33:ASP:H	1	0.28
(2,377)	1:A:34:GLU:HB3	1:A:33:ASP:H	1	0.28
(2,377)	1:A:33:ASP:HB2	1:A:33:ASP:H	2	0.28
(2,377)	1:A:33:ASP:HB3	1:A:33:ASP:H	2	0.28
(2,377)	1:A:34:GLU:HB2	1:A:33:ASP:H	2	0.28
(2,377)	1:A:34:GLU:HB3	1:A:33:ASP:H	2	0.28
(2,359)	1:A:83:ILE:HD11	1:A:98:ILE:H	4	0.28
(2,359)	1:A:83:ILE:HD12	1:A:98:ILE:H	4	0.28
(2,359)	1:A:83:ILE:HD13	1:A:98:ILE:H	4	0.28
(2,359)	1:A:98:ILE:HD11	1:A:98:ILE:H	4	0.28
(2,359)	1:A:98:ILE:HD12	1:A:98:ILE:H	4	0.28
(2,359)	1:A:98:ILE:HD13	1:A:98:ILE:H	4	0.28
(2,342)	1:A:17:PRO:HB2	1:A:20:TRP:HE1	8	0.28
(2,342)	1:A:17:PRO:HB3	1:A:20:TRP:HE1	8	0.28
(2,342)	1:A:19:ARG:HB2	1:A:20:TRP:HE1	8	0.28

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,342)	1:A:19:ARG:HB3	1:A:20:TRP:HE1	8	0.28
(2,323)	1:A:64:ARG:HG2	1:A:68:GLU:H	7	0.28
(2,323)	1:A:64:ARG:HG3	1:A:68:GLU:H	7	0.28
(2,323)	1:A:68:GLU:HG3	1:A:68:GLU:H	7	0.28
(2,323)	1:A:64:ARG:HG2	1:A:68:GLU:H	13	0.28
(2,323)	1:A:64:ARG:HG3	1:A:68:GLU:H	13	0.28
(2,323)	1:A:68:GLU:HG3	1:A:68:GLU:H	13	0.28
(2,323)	1:A:64:ARG:HG2	1:A:68:GLU:H	16	0.28
(2,323)	1:A:64:ARG:HG3	1:A:68:GLU:H	16	0.28
(2,323)	1:A:68:GLU:HG3	1:A:68:GLU:H	16	0.28
(2,323)	1:A:64:ARG:HG2	1:A:68:GLU:H	17	0.28
(2,323)	1:A:64:ARG:HG3	1:A:68:GLU:H	17	0.28
(2,323)	1:A:68:GLU:HG3	1:A:68:GLU:H	17	0.28
(2,296)	1:A:113:GLY:HA2	1:A:117:LEU:H	4	0.28
(2,296)	1:A:113:GLY:HA3	1:A:117:LEU:H	4	0.28
(2,296)	1:A:114:SER:HB2	1:A:117:LEU:H	4	0.28
(2,296)	1:A:114:SER:HB3	1:A:117:LEU:H	4	0.28
(2,292)	1:A:3:CYS:HB2	1:A:8:PHE:H	2	0.28
(2,292)	1:A:3:CYS:HB3	1:A:8:PHE:H	2	0.28
(2,292)	1:A:7:ASP:HB2	1:A:8:PHE:H	2	0.28
(2,292)	1:A:7:ASP:HB3	1:A:8:PHE:H	2	0.28
(2,292)	1:A:8:PHE:HB2	1:A:8:PHE:H	2	0.28
(2,292)	1:A:8:PHE:HB3	1:A:8:PHE:H	2	0.28
(2,292)	1:A:3:CYS:HB2	1:A:8:PHE:H	13	0.28
(2,292)	1:A:3:CYS:HB3	1:A:8:PHE:H	13	0.28
(2,292)	1:A:7:ASP:HB2	1:A:8:PHE:H	13	0.28
(2,292)	1:A:7:ASP:HB3	1:A:8:PHE:H	13	0.28
(2,292)	1:A:8:PHE:HB2	1:A:8:PHE:H	13	0.28
(2,292)	1:A:8:PHE:HB3	1:A:8:PHE:H	13	0.28
(2,29)	1:A:28:CYS:HA	1:A:29:GLU:H	6	0.28
(2,29)	1:A:30:ASP:HA	1:A:29:GLU:H	6	0.28
(2,29)	1:A:28:CYS:HA	1:A:29:GLU:H	8	0.28
(2,29)	1:A:30:ASP:HA	1:A:29:GLU:H	8	0.28
(2,29)	1:A:28:CYS:HA	1:A:29:GLU:H	15	0.28
(2,29)	1:A:30:ASP:HA	1:A:29:GLU:H	15	0.28
(2,281)	1:A:10:CYS:HA	1:A:11:ASN:HD22	19	0.28
(2,281)	1:A:11:ASN:HA	1:A:11:ASN:HD22	19	0.28
(2,278)	1:A:41:MET:HA	1:A:42:ARG:H	2	0.28
(2,278)	1:A:42:ARG:HA	1:A:42:ARG:H	2	0.28
(2,278)	1:A:43:THR:HA	1:A:42:ARG:H	2	0.28
(2,278)	1:A:56:THR:HB	1:A:42:ARG:H	2	0.28
(2,278)	1:A:41:MET:HA	1:A:42:ARG:H	15	0.28

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,278)	1:A:42:ARG:HA	1:A:42:ARG:H	15	0.28
(2,278)	1:A:43:THR:HA	1:A:42:ARG:H	15	0.28
(2,278)	1:A:56:THR:HB	1:A:42:ARG:H	15	0.28
(2,277)	1:A:19:ARG:HG2	1:A:19:ARG:H	1	0.28
(2,277)	1:A:19:ARG:HG2	1:A:19:ARG:H	1	0.28
(2,277)	1:A:19:ARG:HG3	1:A:19:ARG:H	1	0.28
(2,277)	1:A:19:ARG:HG3	1:A:19:ARG:H	1	0.28
(2,277)	1:A:21:LYS:HD2	1:A:19:ARG:H	1	0.28
(2,277)	1:A:19:ARG:HG2	1:A:19:ARG:H	8	0.28
(2,277)	1:A:19:ARG:HG2	1:A:19:ARG:H	8	0.28
(2,277)	1:A:19:ARG:HG3	1:A:19:ARG:H	8	0.28
(2,277)	1:A:19:ARG:HG3	1:A:19:ARG:H	8	0.28
(2,277)	1:A:21:LYS:HD2	1:A:19:ARG:H	8	0.28
(2,25)	1:A:79:ASN:HD22	1:A:80:CYS:HA	15	0.28
(2,25)	1:A:86:SER:HA	1:A:80:CYS:HA	15	0.28
(2,246)	1:A:90:PHE:HB2	1:A:100:ARG:H	20	0.28
(2,246)	1:A:90:PHE:HB3	1:A:100:ARG:H	20	0.28
(2,24)	1:A:11:ASN:HB2	1:A:11:ASN:H	14	0.28
(2,24)	1:A:11:ASN:HB3	1:A:11:ASN:H	14	0.28
(2,24)	1:A:12:ASN:HB2	1:A:11:ASN:H	14	0.28
(2,24)	1:A:11:ASN:HB2	1:A:11:ASN:H	15	0.28
(2,24)	1:A:11:ASN:HB3	1:A:11:ASN:H	15	0.28
(2,24)	1:A:12:ASN:HB2	1:A:11:ASN:H	15	0.28
(2,238)	1:A:10:CYS:HB2	1:A:11:ASN:H	3	0.28
(2,238)	1:A:10:CYS:HB3	1:A:11:ASN:H	3	0.28
(2,238)	1:A:11:ASN:HB2	1:A:11:ASN:H	3	0.28
(2,238)	1:A:11:ASN:HB3	1:A:11:ASN:H	3	0.28
(2,238)	1:A:28:CYS:HB2	1:A:11:ASN:H	3	0.28
(2,238)	1:A:28:CYS:HB3	1:A:11:ASN:H	3	0.28
(2,238)	1:A:10:CYS:HB2	1:A:11:ASN:H	18	0.28
(2,238)	1:A:10:CYS:HB3	1:A:11:ASN:H	18	0.28
(2,238)	1:A:11:ASN:HB2	1:A:11:ASN:H	18	0.28
(2,238)	1:A:11:ASN:HB3	1:A:11:ASN:H	18	0.28
(2,238)	1:A:28:CYS:HB2	1:A:11:ASN:H	18	0.28
(2,238)	1:A:28:CYS:HB3	1:A:11:ASN:H	18	0.28
(2,227)	1:A:19:ARG:HG2	1:A:21:LYS:H	20	0.28
(2,227)	1:A:19:ARG:HG2	1:A:21:LYS:H	20	0.28
(2,227)	1:A:19:ARG:HG3	1:A:21:LYS:H	20	0.28
(2,227)	1:A:19:ARG:HG3	1:A:21:LYS:H	20	0.28
(2,227)	1:A:21:LYS:HB2	1:A:21:LYS:H	20	0.28
(2,227)	1:A:21:LYS:HB3	1:A:21:LYS:H	20	0.28
(2,227)	1:A:21:LYS:HD2	1:A:21:LYS:H	20	0.28

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,227)	1:A:21:LYS:HD3	1:A:21:LYS:H	20	0.28
(2,223)	1:A:45:ARG:HG2	1:A:45:ARG:H	14	0.28
(2,223)	1:A:45:ARG:HG3	1:A:45:ARG:H	14	0.28
(2,223)	1:A:46:ILE:HB	1:A:45:ARG:H	14	0.28
(2,216)	1:A:49:ILE:HD11	1:A:50:SER:H	5	0.28
(2,216)	1:A:49:ILE:HD12	1:A:50:SER:H	5	0.28
(2,216)	1:A:49:ILE:HD13	1:A:50:SER:H	5	0.28
(2,216)	1:A:49:ILE:HG12	1:A:50:SER:H	5	0.28
(2,216)	1:A:49:ILE:HG13	1:A:50:SER:H	5	0.28
(2,216)	1:A:49:ILE:HG21	1:A:50:SER:H	5	0.28
(2,216)	1:A:49:ILE:HG22	1:A:50:SER:H	5	0.28
(2,216)	1:A:49:ILE:HG23	1:A:50:SER:H	5	0.28
(2,216)	1:A:49:ILE:HD11	1:A:50:SER:H	13	0.28
(2,216)	1:A:49:ILE:HD12	1:A:50:SER:H	13	0.28
(2,216)	1:A:49:ILE:HD13	1:A:50:SER:H	13	0.28
(2,216)	1:A:49:ILE:HG12	1:A:50:SER:H	13	0.28
(2,216)	1:A:49:ILE:HG13	1:A:50:SER:H	13	0.28
(2,216)	1:A:49:ILE:HG21	1:A:50:SER:H	13	0.28
(2,216)	1:A:49:ILE:HG22	1:A:50:SER:H	13	0.28
(2,216)	1:A:49:ILE:HG23	1:A:50:SER:H	13	0.28
(2,202)	1:A:22:CYS:HA	1:A:23:ASP:H	4	0.28
(2,202)	1:A:23:ASP:HA	1:A:23:ASP:H	4	0.28
(2,202)	1:A:22:CYS:HA	1:A:23:ASP:H	9	0.28
(2,202)	1:A:23:ASP:HA	1:A:23:ASP:H	9	0.28
(2,202)	1:A:22:CYS:HA	1:A:23:ASP:H	12	0.28
(2,202)	1:A:23:ASP:HA	1:A:23:ASP:H	12	0.28
(2,202)	1:A:22:CYS:HA	1:A:23:ASP:H	14	0.28
(2,202)	1:A:23:ASP:HA	1:A:23:ASP:H	14	0.28
(2,202)	1:A:22:CYS:HA	1:A:23:ASP:H	16	0.28
(2,202)	1:A:23:ASP:HA	1:A:23:ASP:H	16	0.28
(2,202)	1:A:22:CYS:HA	1:A:23:ASP:H	17	0.28
(2,202)	1:A:23:ASP:HA	1:A:23:ASP:H	17	0.28
(2,200)	1:A:77:GLU:HG2	1:A:76:ASP:H	4	0.28
(2,200)	1:A:77:GLU:HG3	1:A:76:ASP:H	4	0.28
(2,200)	1:A:87:PRO:HG2	1:A:76:ASP:H	4	0.28
(2,200)	1:A:87:PRO:HG3	1:A:76:ASP:H	4	0.28
(2,164)	1:A:14:GLN:HB2	1:A:14:GLN:H	19	0.28
(2,164)	1:A:14:GLN:HB3	1:A:14:GLN:H	19	0.28
(2,163)	1:A:71:CYS:HA	1:A:77:GLU:H	8	0.28
(2,163)	1:A:77:GLU:HA	1:A:77:GLU:H	8	0.28
(2,162)	1:A:50:SER:HA	1:A:59:ILE:H	2	0.28
(2,162)	1:A:59:ILE:HA	1:A:59:ILE:H	2	0.28

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,162)	1:A:50:SER:HA	1:A:59:ILE:H	3	0.28
(2,162)	1:A:59:ILE:HA	1:A:59:ILE:H	3	0.28
(2,162)	1:A:50:SER:HA	1:A:59:ILE:H	7	0.28
(2,162)	1:A:59:ILE:HA	1:A:59:ILE:H	7	0.28
(2,162)	1:A:50:SER:HA	1:A:59:ILE:H	9	0.28
(2,162)	1:A:59:ILE:HA	1:A:59:ILE:H	9	0.28
(2,162)	1:A:50:SER:HA	1:A:59:ILE:H	12	0.28
(2,162)	1:A:59:ILE:HA	1:A:59:ILE:H	12	0.28
(2,162)	1:A:50:SER:HA	1:A:59:ILE:H	14	0.28
(2,162)	1:A:59:ILE:HA	1:A:59:ILE:H	14	0.28
(2,162)	1:A:50:SER:HA	1:A:59:ILE:H	16	0.28
(2,162)	1:A:59:ILE:HA	1:A:59:ILE:H	16	0.28
(2,151)	1:A:46:ILE:HD11	1:A:46:ILE:H	14	0.28
(2,151)	1:A:46:ILE:HD12	1:A:46:ILE:H	14	0.28
(2,151)	1:A:46:ILE:HD13	1:A:46:ILE:H	14	0.28
(2,151)	1:A:46:ILE:HG21	1:A:46:ILE:H	14	0.28
(2,151)	1:A:46:ILE:HG22	1:A:46:ILE:H	14	0.28
(2,151)	1:A:46:ILE:HG23	1:A:46:ILE:H	14	0.28
(2,135)	1:A:79:ASN:HB2	1:A:79:ASN:HD21	20	0.28
(2,135)	1:A:97:CYS:HB2	1:A:79:ASN:HD21	20	0.28
(2,116)	1:A:37:GLU:HB2	1:A:38:GLN:HE22	15	0.28
(2,116)	1:A:37:GLU:HB3	1:A:38:GLN:HE22	15	0.28
(2,116)	1:A:37:GLU:HB3	1:A:38:GLN:HE22	15	0.28
(2,116)	1:A:38:GLN:HB2	1:A:38:GLN:HE22	15	0.28
(2,116)	1:A:38:GLN:HB2	1:A:38:GLN:HE22	15	0.28
(2,116)	1:A:38:GLN:HB3	1:A:38:GLN:HE22	15	0.28
(2,116)	1:A:37:GLU:HB2	1:A:38:GLN:HE22	18	0.28
(2,116)	1:A:37:GLU:HB3	1:A:38:GLN:HE22	18	0.28
(2,116)	1:A:37:GLU:HB3	1:A:38:GLN:HE22	18	0.28
(2,116)	1:A:38:GLN:HB2	1:A:38:GLN:HE22	18	0.28
(2,116)	1:A:38:GLN:HB2	1:A:38:GLN:HE22	18	0.28
(2,116)	1:A:38:GLN:HB3	1:A:38:GLN:HE22	18	0.28
(2,114)	1:A:16:VAL:HG11	1:A:16:VAL:H	4	0.28
(2,114)	1:A:16:VAL:HG12	1:A:16:VAL:H	4	0.28
(2,114)	1:A:16:VAL:HG13	1:A:16:VAL:H	4	0.28
(2,114)	1:A:16:VAL:HG21	1:A:16:VAL:H	4	0.28
(2,114)	1:A:16:VAL:HG21	1:A:16:VAL:H	4	0.28
(2,114)	1:A:16:VAL:HG22	1:A:16:VAL:H	4	0.28
(2,114)	1:A:16:VAL:HG22	1:A:16:VAL:H	4	0.28
(2,114)	1:A:16:VAL:HG23	1:A:16:VAL:H	4	0.28
(2,114)	1:A:16:VAL:HG23	1:A:16:VAL:H	4	0.28
(2,114)	1:A:16:VAL:HG11	1:A:16:VAL:H	9	0.28

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,114)	1:A:16:VAL:HG12	1:A:16:VAL:H	9	0.28
(2,114)	1:A:16:VAL:HG13	1:A:16:VAL:H	9	0.28
(2,114)	1:A:16:VAL:HG21	1:A:16:VAL:H	9	0.28
(2,114)	1:A:16:VAL:HG21	1:A:16:VAL:H	9	0.28
(2,114)	1:A:16:VAL:HG22	1:A:16:VAL:H	9	0.28
(2,114)	1:A:16:VAL:HG22	1:A:16:VAL:H	9	0.28
(2,114)	1:A:16:VAL:HG23	1:A:16:VAL:H	9	0.28
(2,114)	1:A:16:VAL:HG23	1:A:16:VAL:H	9	0.28
(1,98)	1:A:98:ILE:HG12	1:A:99:SER:H	13	0.28
(1,98)	1:A:98:ILE:HG13	1:A:99:SER:H	13	0.28
(1,93)	1:A:8:PHE:H	1:A:7:ASP:HA	13	0.28
(1,93)	1:A:8:PHE:H	1:A:7:ASP:HA	15	0.28
(1,92)	1:A:7:ASP:HB2	1:A:8:PHE:H	2	0.28
(1,92)	1:A:7:ASP:HB3	1:A:8:PHE:H	2	0.28
(1,904)	1:A:105:ASN:HB2	1:A:105:ASN:HD21	1	0.28
(1,904)	1:A:105:ASN:HB3	1:A:105:ASN:HD21	1	0.28
(1,904)	1:A:105:ASN:HB2	1:A:105:ASN:HD21	5	0.28
(1,904)	1:A:105:ASN:HB3	1:A:105:ASN:HD21	5	0.28
(1,904)	1:A:105:ASN:HB2	1:A:105:ASN:HD21	8	0.28
(1,904)	1:A:105:ASN:HB3	1:A:105:ASN:HD21	8	0.28
(1,904)	1:A:105:ASN:HB2	1:A:105:ASN:HD21	9	0.28
(1,904)	1:A:105:ASN:HB3	1:A:105:ASN:HD21	9	0.28
(1,904)	1:A:105:ASN:HB2	1:A:105:ASN:HD21	10	0.28
(1,904)	1:A:105:ASN:HB3	1:A:105:ASN:HD21	10	0.28
(1,904)	1:A:105:ASN:HB2	1:A:105:ASN:HD21	13	0.28
(1,904)	1:A:105:ASN:HB3	1:A:105:ASN:HD21	13	0.28
(1,904)	1:A:105:ASN:HB2	1:A:105:ASN:HD21	20	0.28
(1,904)	1:A:105:ASN:HB3	1:A:105:ASN:HD21	20	0.28
(1,9)	1:A:12:ASN:H	1:A:11:ASN:H	1	0.28
(1,896)	1:A:64:ARG:H	1:A:66:ASP:H	9	0.28
(1,896)	1:A:64:ARG:H	1:A:66:ASP:H	16	0.28
(1,891)	1:A:64:ARG:H	1:A:80:CYS:HB2	7	0.28
(1,891)	1:A:64:ARG:H	1:A:80:CYS:HB3	7	0.28
(1,881)	1:A:48:GLU:H	1:A:45:ARG:H	9	0.28
(1,879)	1:A:48:GLU:H	1:A:45:ARG:H	9	0.28
(1,876)	1:A:39:CYS:HB2	1:A:43:THR:H	9	0.28
(1,876)	1:A:39:CYS:HB3	1:A:43:THR:H	9	0.28
(1,860)	1:A:16:VAL:HB	1:A:19:ARG:H	10	0.28
(1,859)	1:A:3:CYS:HB2	1:A:18:SER:H	19	0.28
(1,859)	1:A:3:CYS:HB3	1:A:18:SER:H	19	0.28
(1,85)	1:A:21:LYS:HG2	1:A:22:CYS:H	2	0.28
(1,85)	1:A:21:LYS:HG3	1:A:22:CYS:H	2	0.28

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,849)	1:A:33:ASP:H	1:A:11:ASN:H	3	0.28
(1,831)	1:A:73:SER:H	1:A:75:GLU:H	11	0.28
(1,81)	1:A:28:CYS:HA	1:A:33:ASP:H	8	0.28
(1,803)	1:A:101:ASN:HD21	1:A:99:SER:H	12	0.28
(1,801)	1:A:102:PHE:HB2	1:A:98:ILE:H	12	0.28
(1,801)	1:A:102:PHE:HB3	1:A:98:ILE:H	12	0.28
(1,801)	1:A:102:PHE:HB2	1:A:98:ILE:H	17	0.28
(1,801)	1:A:102:PHE:HB3	1:A:98:ILE:H	17	0.28
(1,800)	1:A:85:CYS:HB2	1:A:98:ILE:H	1	0.28
(1,800)	1:A:85:CYS:HB3	1:A:98:ILE:H	1	0.28
(1,800)	1:A:85:CYS:HB2	1:A:98:ILE:H	3	0.28
(1,800)	1:A:85:CYS:HB3	1:A:98:ILE:H	3	0.28
(1,800)	1:A:85:CYS:HB2	1:A:98:ILE:H	4	0.28
(1,800)	1:A:85:CYS:HB3	1:A:98:ILE:H	4	0.28
(1,794)	1:A:82:ASN:HD22	1:A:94:SER:H	10	0.28
(1,791)	1:A:85:CYS:HB2	1:A:89:GLU:H	18	0.28
(1,791)	1:A:85:CYS:HB3	1:A:89:GLU:H	18	0.28
(1,761)	1:A:72:ASP:H	1:A:57:GLN:HE21	5	0.28
(1,761)	1:A:72:ASP:H	1:A:57:GLN:HE21	13	0.28
(1,759)	1:A:57:GLN:HE21	1:A:71:CYS:HA	18	0.28
(1,750)	1:A:57:GLN:HB2	1:A:52:GLY:H	9	0.28
(1,750)	1:A:57:GLN:HB2	1:A:52:GLY:H	9	0.28
(1,750)	1:A:57:GLN:HB3	1:A:52:GLY:H	9	0.28
(1,750)	1:A:57:GLN:HB3	1:A:52:GLY:H	9	0.28
(1,731)	1:A:28:CYS:HB2	1:A:32:SER:H	2	0.28
(1,731)	1:A:28:CYS:HB3	1:A:32:SER:H	2	0.28
(1,726)	1:A:34:GLU:HG2	1:A:27:ASP:H	2	0.28
(1,726)	1:A:34:GLU:HG3	1:A:27:ASP:H	2	0.28
(1,718)	1:A:16:VAL:HB	1:A:20:TRP:HE1	16	0.28
(1,718)	1:A:16:VAL:HB	1:A:20:TRP:HE1	17	0.28
(1,704)	1:A:100:ARG:HG2	1:A:100:ARG:H	17	0.28
(1,704)	1:A:100:ARG:HG2	1:A:100:ARG:H	17	0.28
(1,704)	1:A:100:ARG:HG3	1:A:100:ARG:H	17	0.28
(1,704)	1:A:100:ARG:HG3	1:A:100:ARG:H	17	0.28
(1,698)	1:A:64:ARG:H	1:A:64:ARG:HG2	5	0.28
(1,698)	1:A:64:ARG:H	1:A:64:ARG:HG3	5	0.28
(1,679)	1:A:78:GLU:HG2	1:A:79:ASN:HD22	9	0.28
(1,679)	1:A:78:GLU:HG3	1:A:79:ASN:HD22	9	0.28
(1,679)	1:A:78:GLU:HG2	1:A:79:ASN:HD22	14	0.28
(1,679)	1:A:78:GLU:HG3	1:A:79:ASN:HD22	14	0.28
(1,667)	1:A:107:GLN:HG2	1:A:105:ASN:HD22	15	0.28
(1,667)	1:A:107:GLN:HG2	1:A:105:ASN:HD22	15	0.28

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,667)	1:A:107:GLN:HG3	1:A:105:ASN:HD22	15	0.28
(1,667)	1:A:107:GLN:HG3	1:A:105:ASN:HD22	15	0.28
(1,666)	1:A:105:ASN:HB2	1:A:105:ASN:HD21	1	0.28
(1,666)	1:A:105:ASN:HB3	1:A:105:ASN:HD21	1	0.28
(1,666)	1:A:105:ASN:HB2	1:A:105:ASN:HD21	5	0.28
(1,666)	1:A:105:ASN:HB3	1:A:105:ASN:HD21	5	0.28
(1,666)	1:A:105:ASN:HB2	1:A:105:ASN:HD21	8	0.28
(1,666)	1:A:105:ASN:HB3	1:A:105:ASN:HD21	8	0.28
(1,666)	1:A:105:ASN:HB2	1:A:105:ASN:HD21	9	0.28
(1,666)	1:A:105:ASN:HB3	1:A:105:ASN:HD21	9	0.28
(1,666)	1:A:105:ASN:HB2	1:A:105:ASN:HD21	10	0.28
(1,666)	1:A:105:ASN:HB3	1:A:105:ASN:HD21	10	0.28
(1,666)	1:A:105:ASN:HB2	1:A:105:ASN:HD21	13	0.28
(1,666)	1:A:105:ASN:HB3	1:A:105:ASN:HD21	13	0.28
(1,666)	1:A:105:ASN:HB2	1:A:105:ASN:HD21	20	0.28
(1,666)	1:A:105:ASN:HB3	1:A:105:ASN:HD21	20	0.28
(1,66)	1:A:23:ASP:H	1:A:24:GLY:H	6	0.28
(1,66)	1:A:23:ASP:H	1:A:24:GLY:H	7	0.28
(1,658)	1:A:102:PHE:HA	1:A:105:ASN:HD22	9	0.28
(1,60)	1:A:56:THR:H	1:A:57:GLN:H	14	0.28
(1,6)	1:A:23:ASP:H	1:A:24:GLY:H	3	0.28
(1,6)	1:A:23:ASP:H	1:A:24:GLY:H	4	0.28
(1,585)	1:A:28:CYS:H	1:A:27:ASP:H	3	0.28
(1,569)	1:A:85:CYS:H	1:A:84:THR:H	18	0.28
(1,55)	1:A:71:CYS:H	1:A:70:ASP:H	6	0.28
(1,545)	1:A:103:VAL:HA	1:A:105:ASN:H	5	0.28
(1,545)	1:A:103:VAL:HA	1:A:105:ASN:H	14	0.28
(1,545)	1:A:103:VAL:HA	1:A:105:ASN:H	20	0.28
(1,542)	1:A:112:ASP:H	1:A:114:SER:H	9	0.28
(1,526)	1:A:64:ARG:H	1:A:67:GLY:H	9	0.28
(1,526)	1:A:64:ARG:H	1:A:67:GLY:H	14	0.28
(1,499)	1:A:33:ASP:HB2	1:A:33:ASP:H	9	0.28
(1,499)	1:A:33:ASP:HB3	1:A:33:ASP:H	9	0.28
(1,483)	1:A:10:CYS:HB2	1:A:14:GLN:H	19	0.28
(1,483)	1:A:10:CYS:HB3	1:A:14:GLN:H	19	0.28
(1,480)	1:A:10:CYS:HB2	1:A:10:CYS:H	11	0.28
(1,480)	1:A:10:CYS:HB3	1:A:10:CYS:H	11	0.28
(1,445)	1:A:75:GLU:H	1:A:74:GLY:H	10	0.28
(1,414)	1:A:63:TRP:H	1:A:63:TRP:HB2	19	0.28
(1,414)	1:A:63:TRP:H	1:A:63:TRP:HB3	19	0.28
(1,397)	1:A:54:HIS:H	1:A:54:HIS:HB2	2	0.28
(1,397)	1:A:54:HIS:H	1:A:54:HIS:HB3	2	0.28

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,397)	1:A:54:HIS:H	1:A:54:HIS:HB2	11	0.28
(1,397)	1:A:54:HIS:H	1:A:54:HIS:HB3	11	0.28
(1,397)	1:A:54:HIS:H	1:A:54:HIS:HB2	14	0.28
(1,397)	1:A:54:HIS:H	1:A:54:HIS:HB3	14	0.28
(1,397)	1:A:54:HIS:H	1:A:54:HIS:HB2	15	0.28
(1,397)	1:A:54:HIS:H	1:A:54:HIS:HB3	15	0.28
(1,390)	1:A:51:CYS:HB2	1:A:52:GLY:H	17	0.28
(1,390)	1:A:51:CYS:HB3	1:A:52:GLY:H	17	0.28
(1,375)	1:A:48:GLU:HA	1:A:49:ILE:H	14	0.28
(1,375)	1:A:48:GLU:HA	1:A:49:ILE:H	15	0.28
(1,365)	1:A:43:THR:HB	1:A:43:THR:H	3	0.28
(1,351)	1:A:32:SER:H	1:A:33:ASP:H	5	0.28
(1,351)	1:A:32:SER:H	1:A:33:ASP:H	6	0.28
(1,349)	1:A:32:SER:H	1:A:33:ASP:H	5	0.28
(1,349)	1:A:32:SER:H	1:A:33:ASP:H	6	0.28
(1,347)	1:A:31:GLY:H	1:A:28:CYS:H	11	0.28
(1,343)	1:A:28:CYS:HB2	1:A:28:CYS:H	2	0.28
(1,343)	1:A:28:CYS:HB3	1:A:28:CYS:H	2	0.28
(1,323)	1:A:64:ARG:H	1:A:80:CYS:HB2	4	0.28
(1,323)	1:A:64:ARG:H	1:A:80:CYS:HB3	4	0.28
(1,319)	1:A:16:VAL:H	1:A:9:VAL:HA	15	0.28
(1,281)	1:A:5:GLU:HB2	1:A:6:SER:H	11	0.28
(1,281)	1:A:5:GLU:HB2	1:A:6:SER:H	11	0.28
(1,281)	1:A:5:GLU:HB3	1:A:6:SER:H	11	0.28
(1,281)	1:A:5:GLU:HB3	1:A:6:SER:H	11	0.28
(1,28)	1:A:118:ASP:H	1:A:117:LEU:H	7	0.28
(1,248)	1:A:83:ILE:HB	1:A:84:THR:H	5	0.28
(1,24)	1:A:104:CYS:H	1:A:105:ASN:H	1	0.28
(1,24)	1:A:104:CYS:H	1:A:105:ASN:H	10	0.28
(1,23)	1:A:104:CYS:H	1:A:105:ASN:H	1	0.28
(1,23)	1:A:104:CYS:H	1:A:105:ASN:H	10	0.28
(1,224)	1:A:92:CYS:HA	1:A:94:SER:H	2	0.28
(1,205)	1:A:98:ILE:HG12	1:A:98:ILE:H	8	0.28
(1,205)	1:A:98:ILE:HG13	1:A:98:ILE:H	8	0.28
(1,205)	1:A:98:ILE:HG12	1:A:98:ILE:H	14	0.28
(1,205)	1:A:98:ILE:HG13	1:A:98:ILE:H	14	0.28
(1,203)	1:A:89:GLU:HB2	1:A:98:ILE:H	15	0.28
(1,203)	1:A:89:GLU:HB3	1:A:98:ILE:H	15	0.28
(1,180)	1:A:99:SER:HB2	1:A:102:PHE:H	9	0.28
(1,180)	1:A:99:SER:HB3	1:A:102:PHE:H	9	0.28
(1,17)	1:A:81:GLY:H	1:A:80:CYS:H	11	0.28
(4,8)	1:A:8:PHE:O	1:A:16:VAL:H	15	0.27

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(4,2)	1:A:90:PHE:O	1:A:98:ILE:H	13	0.27
(2,97)	1:A:20:TRP:HB2	1:A:20:TRP:H	2	0.27
(2,97)	1:A:20:TRP:HB3	1:A:20:TRP:H	2	0.27
(2,97)	1:A:21:LYS:HA	1:A:20:TRP:H	2	0.27
(2,97)	1:A:20:TRP:HB2	1:A:20:TRP:H	10	0.27
(2,97)	1:A:20:TRP:HB3	1:A:20:TRP:H	10	0.27
(2,97)	1:A:21:LYS:HA	1:A:20:TRP:H	10	0.27
(2,97)	1:A:20:TRP:HB2	1:A:20:TRP:H	11	0.27
(2,97)	1:A:20:TRP:HB3	1:A:20:TRP:H	11	0.27
(2,97)	1:A:21:LYS:HA	1:A:20:TRP:H	11	0.27
(2,76)	1:A:28:CYS:HB2	1:A:32:SER:H	9	0.27
(2,76)	1:A:28:CYS:HB3	1:A:32:SER:H	9	0.27
(2,76)	1:A:29:GLU:HA	1:A:32:SER:H	9	0.27
(2,76)	1:A:32:SER:HA	1:A:32:SER:H	9	0.27
(2,76)	1:A:32:SER:HB2	1:A:32:SER:H	9	0.27
(2,76)	1:A:32:SER:HB3	1:A:32:SER:H	9	0.27
(2,76)	1:A:33:ASP:HA	1:A:32:SER:H	9	0.27
(2,76)	1:A:35:SER:HB2	1:A:32:SER:H	9	0.27
(2,76)	1:A:35:SER:HB3	1:A:32:SER:H	9	0.27
(2,66)	1:A:4:ALA:H	1:A:7:ASP:H	16	0.27
(2,66)	1:A:5:GLU:H	1:A:7:ASP:H	16	0.27
(2,54)	1:A:17:PRO:HB2	1:A:18:SER:H	18	0.27
(2,54)	1:A:17:PRO:HB3	1:A:18:SER:H	18	0.27
(2,54)	1:A:17:PRO:HG2	1:A:18:SER:H	18	0.27
(2,54)	1:A:17:PRO:HG3	1:A:18:SER:H	18	0.27
(2,43)	1:A:10:CYS:HA	1:A:14:GLN:H	4	0.27
(2,43)	1:A:11:ASN:HA	1:A:14:GLN:H	4	0.27
(2,43)	1:A:13:GLY:HA2	1:A:14:GLN:H	4	0.27
(2,43)	1:A:13:GLY:HA3	1:A:14:GLN:H	4	0.27
(2,43)	1:A:10:CYS:HA	1:A:14:GLN:H	6	0.27
(2,43)	1:A:11:ASN:HA	1:A:14:GLN:H	6	0.27
(2,43)	1:A:13:GLY:HA2	1:A:14:GLN:H	6	0.27
(2,43)	1:A:13:GLY:HA3	1:A:14:GLN:H	6	0.27
(2,43)	1:A:10:CYS:HA	1:A:14:GLN:H	8	0.27
(2,43)	1:A:11:ASN:HA	1:A:14:GLN:H	8	0.27
(2,43)	1:A:13:GLY:HA2	1:A:14:GLN:H	8	0.27
(2,43)	1:A:13:GLY:HA3	1:A:14:GLN:H	8	0.27
(2,43)	1:A:10:CYS:HA	1:A:14:GLN:H	15	0.27
(2,43)	1:A:11:ASN:HA	1:A:14:GLN:H	15	0.27
(2,43)	1:A:13:GLY:HA2	1:A:14:GLN:H	15	0.27
(2,43)	1:A:13:GLY:HA3	1:A:14:GLN:H	15	0.27
(2,342)	1:A:17:PRO:HB2	1:A:20:TRP:HE1	5	0.27

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,342)	1:A:17:PRO:HB3	1:A:20:TRP:HE1	5	0.27
(2,342)	1:A:19:ARG:HB2	1:A:20:TRP:HE1	5	0.27
(2,342)	1:A:19:ARG:HB3	1:A:20:TRP:HE1	5	0.27
(2,292)	1:A:3:CYS:HB2	1:A:8:PHE:H	11	0.27
(2,292)	1:A:3:CYS:HB3	1:A:8:PHE:H	11	0.27
(2,292)	1:A:7:ASP:HB2	1:A:8:PHE:H	11	0.27
(2,292)	1:A:7:ASP:HB3	1:A:8:PHE:H	11	0.27
(2,292)	1:A:8:PHE:HB2	1:A:8:PHE:H	11	0.27
(2,292)	1:A:8:PHE:HB3	1:A:8:PHE:H	11	0.27
(2,29)	1:A:28:CYS:HA	1:A:29:GLU:H	9	0.27
(2,29)	1:A:30:ASP:HA	1:A:29:GLU:H	9	0.27
(2,281)	1:A:10:CYS:HA	1:A:11:ASN:HD22	13	0.27
(2,281)	1:A:11:ASN:HA	1:A:11:ASN:HD22	13	0.27
(2,281)	1:A:10:CYS:HA	1:A:11:ASN:HD22	20	0.27
(2,281)	1:A:11:ASN:HA	1:A:11:ASN:HD22	20	0.27
(2,278)	1:A:41:MET:HA	1:A:42:ARG:H	6	0.27
(2,278)	1:A:42:ARG:HA	1:A:42:ARG:H	6	0.27
(2,278)	1:A:43:THR:HA	1:A:42:ARG:H	6	0.27
(2,278)	1:A:56:THR:HB	1:A:42:ARG:H	6	0.27
(2,263)	1:A:62:SER:HB2	1:A:63:TRP:H	7	0.27
(2,263)	1:A:62:SER:HB3	1:A:63:TRP:H	7	0.27
(2,263)	1:A:63:TRP:HB2	1:A:63:TRP:H	7	0.27
(2,263)	1:A:62:SER:HB2	1:A:63:TRP:H	19	0.27
(2,263)	1:A:62:SER:HB3	1:A:63:TRP:H	19	0.27
(2,263)	1:A:63:TRP:HB2	1:A:63:TRP:H	19	0.27
(2,262)	1:A:51:CYS:HB2	1:A:74:GLY:H	4	0.27
(2,262)	1:A:51:CYS:HB3	1:A:74:GLY:H	4	0.27
(2,262)	1:A:71:CYS:HB2	1:A:74:GLY:H	4	0.27
(2,262)	1:A:71:CYS:HB3	1:A:74:GLY:H	4	0.27
(2,262)	1:A:51:CYS:HB2	1:A:74:GLY:H	13	0.27
(2,262)	1:A:51:CYS:HB3	1:A:74:GLY:H	13	0.27
(2,262)	1:A:71:CYS:HB2	1:A:74:GLY:H	13	0.27
(2,262)	1:A:71:CYS:HB3	1:A:74:GLY:H	13	0.27
(2,262)	1:A:51:CYS:HB2	1:A:74:GLY:H	20	0.27
(2,262)	1:A:51:CYS:HB3	1:A:74:GLY:H	20	0.27
(2,262)	1:A:71:CYS:HB2	1:A:74:GLY:H	20	0.27
(2,262)	1:A:71:CYS:HB3	1:A:74:GLY:H	20	0.27
(2,259)	1:A:69:ASN:HB2	1:A:69:ASN:HD21	12	0.27
(2,259)	1:A:69:ASN:HB3	1:A:69:ASN:HD21	12	0.27
(2,259)	1:A:70:ASP:HB2	1:A:69:ASN:HD21	12	0.27
(2,259)	1:A:70:ASP:HB3	1:A:69:ASN:HD21	12	0.27
(2,259)	1:A:69:ASN:HB2	1:A:69:ASN:HD21	15	0.27

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,259)	1:A:69:ASN:HB3	1:A:69:ASN:HD21	15	0.27
(2,259)	1:A:70:ASP:HB2	1:A:69:ASN:HD21	15	0.27
(2,259)	1:A:70:ASP:HB3	1:A:69:ASN:HD21	15	0.27
(2,228)	1:A:28:CYS:HB2	1:A:28:CYS:H	5	0.27
(2,228)	1:A:28:CYS:HB3	1:A:28:CYS:H	5	0.27
(2,228)	1:A:29:GLU:HA	1:A:28:CYS:H	5	0.27
(2,228)	1:A:32:SER:HA	1:A:28:CYS:H	5	0.27
(2,227)	1:A:19:ARG:HG2	1:A:21:LYS:H	3	0.27
(2,227)	1:A:19:ARG:HG2	1:A:21:LYS:H	3	0.27
(2,227)	1:A:19:ARG:HG3	1:A:21:LYS:H	3	0.27
(2,227)	1:A:19:ARG:HG3	1:A:21:LYS:H	3	0.27
(2,227)	1:A:21:LYS:HB2	1:A:21:LYS:H	3	0.27
(2,227)	1:A:21:LYS:HB3	1:A:21:LYS:H	3	0.27
(2,227)	1:A:21:LYS:HD2	1:A:21:LYS:H	3	0.27
(2,227)	1:A:21:LYS:HD3	1:A:21:LYS:H	3	0.27
(2,227)	1:A:19:ARG:HG2	1:A:21:LYS:H	18	0.27
(2,227)	1:A:19:ARG:HG2	1:A:21:LYS:H	18	0.27
(2,227)	1:A:19:ARG:HG3	1:A:21:LYS:H	18	0.27
(2,227)	1:A:19:ARG:HG3	1:A:21:LYS:H	18	0.27
(2,227)	1:A:21:LYS:HB2	1:A:21:LYS:H	18	0.27
(2,227)	1:A:21:LYS:HB3	1:A:21:LYS:H	18	0.27
(2,227)	1:A:21:LYS:HD2	1:A:21:LYS:H	18	0.27
(2,227)	1:A:21:LYS:HD3	1:A:21:LYS:H	18	0.27
(2,223)	1:A:45:ARG:HG2	1:A:45:ARG:H	3	0.27
(2,223)	1:A:45:ARG:HG3	1:A:45:ARG:H	3	0.27
(2,223)	1:A:46:ILE:HB	1:A:45:ARG:H	3	0.27
(2,216)	1:A:49:ILE:HD11	1:A:50:SER:H	11	0.27
(2,216)	1:A:49:ILE:HD12	1:A:50:SER:H	11	0.27
(2,216)	1:A:49:ILE:HD13	1:A:50:SER:H	11	0.27
(2,216)	1:A:49:ILE:HG12	1:A:50:SER:H	11	0.27
(2,216)	1:A:49:ILE:HG13	1:A:50:SER:H	11	0.27
(2,216)	1:A:49:ILE:HG21	1:A:50:SER:H	11	0.27
(2,216)	1:A:49:ILE:HG22	1:A:50:SER:H	11	0.27
(2,216)	1:A:49:ILE:HG23	1:A:50:SER:H	11	0.27
(2,202)	1:A:22:CYS:HA	1:A:23:ASP:H	3	0.27
(2,202)	1:A:23:ASP:HA	1:A:23:ASP:H	3	0.27
(2,202)	1:A:22:CYS:HA	1:A:23:ASP:H	8	0.27
(2,202)	1:A:23:ASP:HA	1:A:23:ASP:H	8	0.27
(2,202)	1:A:22:CYS:HA	1:A:23:ASP:H	20	0.27
(2,202)	1:A:23:ASP:HA	1:A:23:ASP:H	20	0.27
(2,193)	1:A:98:ILE:HD11	1:A:109:ASP:H	4	0.27
(2,193)	1:A:98:ILE:HD12	1:A:109:ASP:H	4	0.27

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,193)	1:A:98:ILE:HD13	1:A:109:ASP:H	4	0.27
(2,193)	1:A:117:LEU:HD11	1:A:109:ASP:H	4	0.27
(2,193)	1:A:117:LEU:HD12	1:A:109:ASP:H	4	0.27
(2,193)	1:A:117:LEU:HD13	1:A:109:ASP:H	4	0.27
(2,193)	1:A:117:LEU:HD21	1:A:109:ASP:H	4	0.27
(2,193)	1:A:117:LEU:HD22	1:A:109:ASP:H	4	0.27
(2,193)	1:A:117:LEU:HD23	1:A:109:ASP:H	4	0.27
(2,177)	1:A:22:CYS:HB2	1:A:44:CYS:H	12	0.27
(2,177)	1:A:22:CYS:HB3	1:A:44:CYS:H	12	0.27
(2,177)	1:A:44:CYS:HB2	1:A:44:CYS:H	12	0.27
(2,177)	1:A:44:CYS:HB3	1:A:44:CYS:H	12	0.27
(2,162)	1:A:50:SER:HA	1:A:59:ILE:H	13	0.27
(2,162)	1:A:59:ILE:HA	1:A:59:ILE:H	13	0.27
(2,162)	1:A:50:SER:HA	1:A:59:ILE:H	20	0.27
(2,162)	1:A:59:ILE:HA	1:A:59:ILE:H	20	0.27
(2,160)	1:A:43:THR:HG1	1:A:43:THR:H	13	0.27
(2,160)	1:A:43:THR:HG1	1:A:43:THR:H	13	0.27
(2,160)	1:A:43:THR:HG21	1:A:43:THR:H	13	0.27
(2,160)	1:A:43:THR:HG21	1:A:43:THR:H	13	0.27
(2,160)	1:A:43:THR:HG22	1:A:43:THR:H	13	0.27
(2,160)	1:A:43:THR:HG22	1:A:43:THR:H	13	0.27
(2,160)	1:A:43:THR:HG23	1:A:43:THR:H	13	0.27
(2,160)	1:A:43:THR:HG23	1:A:43:THR:H	13	0.27
(2,160)	1:A:56:THR:HG1	1:A:43:THR:H	13	0.27
(2,160)	1:A:56:THR:HG21	1:A:43:THR:H	13	0.27
(2,160)	1:A:56:THR:HG22	1:A:43:THR:H	13	0.27
(2,160)	1:A:56:THR:HG23	1:A:43:THR:H	13	0.27
(2,160)	1:A:43:THR:HG1	1:A:43:THR:H	14	0.27
(2,160)	1:A:43:THR:HG1	1:A:43:THR:H	14	0.27
(2,160)	1:A:43:THR:HG21	1:A:43:THR:H	14	0.27
(2,160)	1:A:43:THR:HG21	1:A:43:THR:H	14	0.27
(2,160)	1:A:43:THR:HG22	1:A:43:THR:H	14	0.27
(2,160)	1:A:43:THR:HG22	1:A:43:THR:H	14	0.27
(2,160)	1:A:43:THR:HG23	1:A:43:THR:H	14	0.27
(2,160)	1:A:43:THR:HG23	1:A:43:THR:H	14	0.27
(2,160)	1:A:56:THR:HG1	1:A:43:THR:H	14	0.27
(2,160)	1:A:56:THR:HG21	1:A:43:THR:H	14	0.27
(2,160)	1:A:56:THR:HG22	1:A:43:THR:H	14	0.27
(2,160)	1:A:56:THR:HG23	1:A:43:THR:H	14	0.27
(2,134)	1:A:79:ASN:HB2	1:A:85:CYS:H	10	0.27
(2,134)	1:A:79:ASN:HB3	1:A:85:CYS:H	10	0.27
(2,134)	1:A:97:CYS:HB2	1:A:85:CYS:H	10	0.27

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,134)	1:A:97:CYS:HB3	1:A:85:CYS:H	10	0.27
(2,134)	1:A:79:ASN:HB2	1:A:85:CYS:H	17	0.27
(2,134)	1:A:79:ASN:HB3	1:A:85:CYS:H	17	0.27
(2,134)	1:A:97:CYS:HB2	1:A:85:CYS:H	17	0.27
(2,134)	1:A:97:CYS:HB3	1:A:85:CYS:H	17	0.27
(2,124)	1:A:43:THR:HG1	1:A:57:GLN:H	19	0.27
(2,124)	1:A:43:THR:HG1	1:A:57:GLN:H	19	0.27
(2,124)	1:A:43:THR:HG21	1:A:57:GLN:H	19	0.27
(2,124)	1:A:43:THR:HG21	1:A:57:GLN:H	19	0.27
(2,124)	1:A:43:THR:HG22	1:A:57:GLN:H	19	0.27
(2,124)	1:A:43:THR:HG22	1:A:57:GLN:H	19	0.27
(2,124)	1:A:43:THR:HG23	1:A:57:GLN:H	19	0.27
(2,124)	1:A:43:THR:HG23	1:A:57:GLN:H	19	0.27
(2,124)	1:A:56:THR:HG1	1:A:57:GLN:H	19	0.27
(2,124)	1:A:56:THR:HG21	1:A:57:GLN:H	19	0.27
(2,124)	1:A:56:THR:HG21	1:A:57:GLN:H	19	0.27
(2,124)	1:A:56:THR:HG22	1:A:57:GLN:H	19	0.27
(2,124)	1:A:56:THR:HG22	1:A:57:GLN:H	19	0.27
(2,124)	1:A:56:THR:HG23	1:A:57:GLN:H	19	0.27
(2,124)	1:A:56:THR:HG23	1:A:57:GLN:H	19	0.27
(2,124)	1:A:43:THR:HG1	1:A:57:GLN:H	20	0.27
(2,124)	1:A:43:THR:HG1	1:A:57:GLN:H	20	0.27
(2,124)	1:A:43:THR:HG21	1:A:57:GLN:H	20	0.27
(2,124)	1:A:43:THR:HG21	1:A:57:GLN:H	20	0.27
(2,124)	1:A:43:THR:HG22	1:A:57:GLN:H	20	0.27
(2,124)	1:A:43:THR:HG22	1:A:57:GLN:H	20	0.27
(2,124)	1:A:43:THR:HG23	1:A:57:GLN:H	20	0.27
(2,124)	1:A:43:THR:HG23	1:A:57:GLN:H	20	0.27
(2,124)	1:A:56:THR:HG1	1:A:57:GLN:H	20	0.27
(2,124)	1:A:56:THR:HG21	1:A:57:GLN:H	20	0.27
(2,124)	1:A:56:THR:HG21	1:A:57:GLN:H	20	0.27
(2,124)	1:A:56:THR:HG22	1:A:57:GLN:H	20	0.27
(2,124)	1:A:56:THR:HG22	1:A:57:GLN:H	20	0.27
(2,124)	1:A:56:THR:HG23	1:A:57:GLN:H	20	0.27
(2,124)	1:A:56:THR:HG23	1:A:57:GLN:H	20	0.27
(2,116)	1:A:37:GLU:HB2	1:A:38:GLN:HE22	4	0.27
(2,116)	1:A:37:GLU:HB3	1:A:38:GLN:HE22	4	0.27
(2,116)	1:A:37:GLU:HB3	1:A:38:GLN:HE22	4	0.27
(2,116)	1:A:38:GLN:HB2	1:A:38:GLN:HE22	4	0.27
(2,116)	1:A:38:GLN:HB2	1:A:38:GLN:HE22	4	0.27
(2,116)	1:A:38:GLN:HB3	1:A:38:GLN:HE22	4	0.27
(2,114)	1:A:16:VAL:HG11	1:A:16:VAL:H	20	0.27

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,114)	1:A:16:VAL:HG12	1:A:16:VAL:H	20	0.27
(2,114)	1:A:16:VAL:HG13	1:A:16:VAL:H	20	0.27
(2,114)	1:A:16:VAL:HG21	1:A:16:VAL:H	20	0.27
(2,114)	1:A:16:VAL:HG21	1:A:16:VAL:H	20	0.27
(2,114)	1:A:16:VAL:HG22	1:A:16:VAL:H	20	0.27
(2,114)	1:A:16:VAL:HG22	1:A:16:VAL:H	20	0.27
(2,114)	1:A:16:VAL:HG23	1:A:16:VAL:H	20	0.27
(2,114)	1:A:16:VAL:HG23	1:A:16:VAL:H	20	0.27
(1,97)	1:A:98:ILE:HD11	1:A:99:SER:H	1	0.27
(1,97)	1:A:98:ILE:HD12	1:A:99:SER:H	1	0.27
(1,97)	1:A:98:ILE:HD13	1:A:99:SER:H	1	0.27
(1,925)	1:A:8:PHE:HB3	1:A:16:VAL:HG21	1	0.27
(1,925)	1:A:8:PHE:HB3	1:A:16:VAL:HG22	1	0.27
(1,925)	1:A:8:PHE:HB3	1:A:16:VAL:HG23	1	0.27
(1,909)	1:A:43:THR:HG1	1:A:46:ILE:H	8	0.27
(1,909)	1:A:43:THR:HG21	1:A:46:ILE:H	8	0.27
(1,909)	1:A:43:THR:HG22	1:A:46:ILE:H	8	0.27
(1,909)	1:A:43:THR:HG23	1:A:46:ILE:H	8	0.27
(1,904)	1:A:105:ASN:HB2	1:A:105:ASN:HD21	6	0.27
(1,904)	1:A:105:ASN:HB3	1:A:105:ASN:HD21	6	0.27
(1,904)	1:A:105:ASN:HB2	1:A:105:ASN:HD21	11	0.27
(1,904)	1:A:105:ASN:HB3	1:A:105:ASN:HD21	11	0.27
(1,904)	1:A:105:ASN:HB2	1:A:105:ASN:HD21	19	0.27
(1,904)	1:A:105:ASN:HB3	1:A:105:ASN:HD21	19	0.27
(1,898)	1:A:57:GLN:HE22	1:A:71:CYS:H	14	0.27
(1,896)	1:A:64:ARG:H	1:A:66:ASP:H	7	0.27
(1,888)	1:A:49:ILE:HA	1:A:61:VAL:H	6	0.27
(1,881)	1:A:48:GLU:H	1:A:45:ARG:H	11	0.27
(1,879)	1:A:48:GLU:H	1:A:45:ARG:H	11	0.27
(1,873)	1:A:34:GLU:HB2	1:A:33:ASP:H	8	0.27
(1,873)	1:A:34:GLU:HB3	1:A:33:ASP:H	8	0.27
(1,863)	1:A:17:PRO:HD2	1:A:20:TRP:HE1	6	0.27
(1,863)	1:A:17:PRO:HD3	1:A:20:TRP:HE1	6	0.27
(1,860)	1:A:16:VAL:HB	1:A:19:ARG:H	16	0.27
(1,860)	1:A:16:VAL:HB	1:A:19:ARG:H	19	0.27
(1,859)	1:A:3:CYS:HB2	1:A:18:SER:H	20	0.27
(1,859)	1:A:3:CYS:HB3	1:A:18:SER:H	20	0.27
(1,856)	1:A:14:GLN:H	1:A:12:ASN:HD22	9	0.27
(1,85)	1:A:21:LYS:HG2	1:A:22:CYS:H	16	0.27
(1,85)	1:A:21:LYS:HG3	1:A:22:CYS:H	16	0.27
(1,849)	1:A:33:ASP:H	1:A:11:ASN:H	9	0.27
(1,838)	1:A:58:CYS:HA	1:A:52:GLY:H	19	0.27

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,822)	1:A:113:GLY:HA2	1:A:116:GLU:H	16	0.27
(1,822)	1:A:113:GLY:HA3	1:A:116:GLU:H	16	0.27
(1,809)	1:A:106:GLY:H	1:A:104:CYS:H	3	0.27
(1,803)	1:A:101:ASN:HD21	1:A:99:SER:H	14	0.27
(1,80)	1:A:44:CYS:HB2	1:A:45:ARG:H	3	0.27
(1,80)	1:A:44:CYS:HB3	1:A:45:ARG:H	3	0.27
(1,791)	1:A:85:CYS:HB2	1:A:89:GLU:H	2	0.27
(1,791)	1:A:85:CYS:HB3	1:A:89:GLU:H	2	0.27
(1,789)	1:A:85:CYS:H	1:A:84:THR:HB	3	0.27
(1,772)	1:A:68:GLU:H	1:A:64:ARG:H	6	0.27
(1,768)	1:A:58:CYS:HA	1:A:59:ILE:H	3	0.27
(1,759)	1:A:57:GLN:HE21	1:A:71:CYS:HA	14	0.27
(1,745)	1:A:48:GLU:HB2	1:A:49:ILE:H	16	0.27
(1,745)	1:A:48:GLU:HB3	1:A:49:ILE:H	16	0.27
(1,744)	1:A:48:GLU:H	1:A:47:HIS:H	4	0.27
(1,744)	1:A:48:GLU:H	1:A:47:HIS:H	16	0.27
(1,740)	1:A:35:SER:H	1:A:56:THR:HG1	4	0.27
(1,740)	1:A:35:SER:H	1:A:56:THR:HG21	4	0.27
(1,740)	1:A:35:SER:H	1:A:56:THR:HG22	4	0.27
(1,740)	1:A:35:SER:H	1:A:56:THR:HG23	4	0.27
(1,735)	1:A:28:CYS:HB2	1:A:33:ASP:H	19	0.27
(1,735)	1:A:28:CYS:HB3	1:A:33:ASP:H	19	0.27
(1,731)	1:A:28:CYS:HB2	1:A:32:SER:H	3	0.27
(1,731)	1:A:28:CYS:HB3	1:A:32:SER:H	3	0.27
(1,731)	1:A:28:CYS:HB2	1:A:32:SER:H	8	0.27
(1,731)	1:A:28:CYS:HB3	1:A:32:SER:H	8	0.27
(1,710)	1:A:8:PHE:H	1:A:21:LYS:HD2	14	0.27
(1,710)	1:A:8:PHE:H	1:A:21:LYS:HD3	14	0.27
(1,693)	1:A:21:LYS:HD2	1:A:21:LYS:H	3	0.27
(1,693)	1:A:21:LYS:HD3	1:A:21:LYS:H	3	0.27
(1,679)	1:A:78:GLU:HG2	1:A:79:ASN:HD22	7	0.27
(1,679)	1:A:78:GLU:HG3	1:A:79:ASN:HD22	7	0.27
(1,666)	1:A:105:ASN:HB2	1:A:105:ASN:HD21	6	0.27
(1,666)	1:A:105:ASN:HB3	1:A:105:ASN:HD21	6	0.27
(1,666)	1:A:105:ASN:HB2	1:A:105:ASN:HD21	11	0.27
(1,666)	1:A:105:ASN:HB3	1:A:105:ASN:HD21	11	0.27
(1,666)	1:A:105:ASN:HB2	1:A:105:ASN:HD21	19	0.27
(1,666)	1:A:105:ASN:HB3	1:A:105:ASN:HD21	19	0.27
(1,66)	1:A:23:ASP:H	1:A:24:GLY:H	1	0.27
(1,66)	1:A:23:ASP:H	1:A:24:GLY:H	2	0.27
(1,66)	1:A:23:ASP:H	1:A:24:GLY:H	10	0.27
(1,66)	1:A:23:ASP:H	1:A:24:GLY:H	16	0.27

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,642)	1:A:82:ASN:HA	1:A:82:ASN:HD22	14	0.27
(1,642)	1:A:82:ASN:HA	1:A:82:ASN:HD22	20	0.27
(1,628)	1:A:71:CYS:HB2	1:A:57:GLN:HE22	1	0.27
(1,628)	1:A:71:CYS:HB3	1:A:57:GLN:HE22	1	0.27
(1,60)	1:A:56:THR:H	1:A:57:GLN:H	12	0.27
(1,6)	1:A:23:ASP:H	1:A:24:GLY:H	14	0.27
(1,596)	1:A:74:GLY:HA2	1:A:69:ASN:HD21	20	0.27
(1,596)	1:A:74:GLY:HA3	1:A:69:ASN:HD21	20	0.27
(1,569)	1:A:85:CYS:H	1:A:84:THR:H	16	0.27
(1,562)	1:A:102:PHE:HB2	1:A:99:SER:H	10	0.27
(1,562)	1:A:102:PHE:HB3	1:A:99:SER:H	10	0.27
(1,557)	1:A:100:ARG:HB2	1:A:101:ASN:H	19	0.27
(1,557)	1:A:100:ARG:HB3	1:A:101:ASN:H	19	0.27
(1,55)	1:A:71:CYS:H	1:A:70:ASP:H	1	0.27
(1,545)	1:A:103:VAL:HA	1:A:105:ASN:H	2	0.27
(1,545)	1:A:103:VAL:HA	1:A:105:ASN:H	15	0.27
(1,543)	1:A:112:ASP:HB2	1:A:114:SER:H	2	0.27
(1,543)	1:A:112:ASP:HB3	1:A:114:SER:H	2	0.27
(1,542)	1:A:112:ASP:H	1:A:114:SER:H	5	0.27
(1,53)	1:A:77:GLU:H	1:A:76:ASP:H	14	0.27
(1,53)	1:A:77:GLU:H	1:A:76:ASP:H	18	0.27
(1,526)	1:A:64:ARG:H	1:A:67:GLY:H	2	0.27
(1,526)	1:A:64:ARG:H	1:A:67:GLY:H	13	0.27
(1,52)	1:A:76:ASP:H	1:A:77:GLU:H	14	0.27
(1,52)	1:A:76:ASP:H	1:A:77:GLU:H	18	0.27
(1,518)	1:A:49:ILE:H	1:A:61:VAL:H	19	0.27
(1,504)	1:A:39:CYS:HB2	1:A:39:CYS:H	19	0.27
(1,504)	1:A:39:CYS:HB3	1:A:39:CYS:H	19	0.27
(1,501)	1:A:34:GLU:HB2	1:A:34:GLU:H	19	0.27
(1,501)	1:A:34:GLU:HB3	1:A:34:GLU:H	19	0.27
(1,499)	1:A:33:ASP:HB2	1:A:33:ASP:H	7	0.27
(1,499)	1:A:33:ASP:HB3	1:A:33:ASP:H	7	0.27
(1,499)	1:A:33:ASP:HB2	1:A:33:ASP:H	19	0.27
(1,499)	1:A:33:ASP:HB3	1:A:33:ASP:H	19	0.27
(1,486)	1:A:7:ASP:HA	1:A:19:ARG:H	19	0.27
(1,483)	1:A:10:CYS:HB2	1:A:14:GLN:H	3	0.27
(1,483)	1:A:10:CYS:HB3	1:A:14:GLN:H	3	0.27
(1,480)	1:A:10:CYS:HB2	1:A:10:CYS:H	13	0.27
(1,480)	1:A:10:CYS:HB3	1:A:10:CYS:H	13	0.27
(1,480)	1:A:10:CYS:HB2	1:A:10:CYS:H	16	0.27
(1,480)	1:A:10:CYS:HB3	1:A:10:CYS:H	16	0.27
(1,466)	1:A:80:CYS:HA	1:A:79:ASN:H	13	0.27

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,446)	1:A:73:SER:H	1:A:74:GLY:H	8	0.27
(1,445)	1:A:75:GLU:H	1:A:74:GLY:H	4	0.27
(1,444)	1:A:76:ASP:H	1:A:74:GLY:H	6	0.27
(1,443)	1:A:73:SER:H	1:A:71:CYS:HB2	13	0.27
(1,443)	1:A:73:SER:H	1:A:71:CYS:HB3	13	0.27
(1,443)	1:A:73:SER:H	1:A:71:CYS:HB2	17	0.27
(1,443)	1:A:73:SER:H	1:A:71:CYS:HB3	17	0.27
(1,418)	1:A:64:ARG:HA	1:A:66:ASP:H	3	0.27
(1,397)	1:A:54:HIS:H	1:A:54:HIS:HB2	5	0.27
(1,397)	1:A:54:HIS:H	1:A:54:HIS:HB3	5	0.27
(1,397)	1:A:54:HIS:H	1:A:54:HIS:HB2	8	0.27
(1,397)	1:A:54:HIS:H	1:A:54:HIS:HB3	8	0.27
(1,397)	1:A:54:HIS:H	1:A:54:HIS:HB2	10	0.27
(1,397)	1:A:54:HIS:H	1:A:54:HIS:HB3	10	0.27
(1,390)	1:A:51:CYS:HB2	1:A:52:GLY:H	1	0.27
(1,390)	1:A:51:CYS:HB3	1:A:52:GLY:H	1	0.27
(1,379)	1:A:50:SER:H	1:A:50:SER:HA	4	0.27
(1,379)	1:A:50:SER:H	1:A:50:SER:HA	12	0.27
(1,375)	1:A:48:GLU:HA	1:A:49:ILE:H	8	0.27
(1,366)	1:A:42:ARG:HB2	1:A:43:THR:H	2	0.27
(1,366)	1:A:42:ARG:HB2	1:A:43:THR:H	2	0.27
(1,366)	1:A:42:ARG:HB3	1:A:43:THR:H	2	0.27
(1,366)	1:A:42:ARG:HB3	1:A:43:THR:H	2	0.27
(1,366)	1:A:42:ARG:HB2	1:A:43:THR:H	14	0.27
(1,366)	1:A:42:ARG:HB2	1:A:43:THR:H	14	0.27
(1,366)	1:A:42:ARG:HB3	1:A:43:THR:H	14	0.27
(1,366)	1:A:42:ARG:HB3	1:A:43:THR:H	14	0.27
(1,347)	1:A:31:GLY:H	1:A:28:CYS:H	16	0.27
(1,335)	1:A:45:ARG:HD2	1:A:24:GLY:H	6	0.27
(1,335)	1:A:45:ARG:HD3	1:A:24:GLY:H	6	0.27
(1,33)	1:A:115:ASP:H	1:A:114:SER:H	17	0.27
(1,328)	1:A:22:CYS:HB2	1:A:22:CYS:H	13	0.27
(1,328)	1:A:22:CYS:HB3	1:A:22:CYS:H	13	0.27
(1,312)	1:A:14:GLN:HG2	1:A:14:GLN:H	3	0.27
(1,312)	1:A:14:GLN:HG3	1:A:14:GLN:H	3	0.27
(1,298)	1:A:14:GLN:H	1:A:11:ASN:H	7	0.27
(1,283)	1:A:8:PHE:H	1:A:7:ASP:H	8	0.27
(1,28)	1:A:118:ASP:H	1:A:117:LEU:H	4	0.27
(1,248)	1:A:83:ILE:HB	1:A:84:THR:H	7	0.27
(1,24)	1:A:104:CYS:H	1:A:105:ASN:H	8	0.27
(1,23)	1:A:104:CYS:H	1:A:105:ASN:H	8	0.27
(1,203)	1:A:89:GLU:HB2	1:A:98:ILE:H	7	0.27

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,203)	1:A:89:GLU:HB3	1:A:98:ILE:H	7	0.27
(1,203)	1:A:89:GLU:HB2	1:A:98:ILE:H	17	0.27
(1,203)	1:A:89:GLU:HB3	1:A:98:ILE:H	17	0.27
(1,17)	1:A:81:GLY:H	1:A:80:CYS:H	1	0.27
(1,17)	1:A:81:GLY:H	1:A:80:CYS:H	5	0.27
(1,17)	1:A:81:GLY:H	1:A:80:CYS:H	15	0.27
(1,109)	1:A:119:CYS:H	1:A:117:LEU:HG	10	0.27
(2,97)	1:A:20:TRP:HB2	1:A:20:TRP:H	5	0.26
(2,97)	1:A:20:TRP:HB3	1:A:20:TRP:H	5	0.26
(2,97)	1:A:21:LYS:HA	1:A:20:TRP:H	5	0.26
(2,97)	1:A:20:TRP:HB2	1:A:20:TRP:H	9	0.26
(2,97)	1:A:20:TRP:HB3	1:A:20:TRP:H	9	0.26
(2,97)	1:A:21:LYS:HA	1:A:20:TRP:H	9	0.26
(2,91)	1:A:83:ILE:HD11	1:A:84:THR:H	4	0.26
(2,91)	1:A:83:ILE:HD12	1:A:84:THR:H	4	0.26
(2,91)	1:A:83:ILE:HD13	1:A:84:THR:H	4	0.26
(2,91)	1:A:83:ILE:HG21	1:A:84:THR:H	4	0.26
(2,91)	1:A:83:ILE:HG22	1:A:84:THR:H	4	0.26
(2,91)	1:A:83:ILE:HG23	1:A:84:THR:H	4	0.26
(2,91)	1:A:83:ILE:HD11	1:A:84:THR:H	18	0.26
(2,91)	1:A:83:ILE:HD12	1:A:84:THR:H	18	0.26
(2,91)	1:A:83:ILE:HD13	1:A:84:THR:H	18	0.26
(2,91)	1:A:83:ILE:HG21	1:A:84:THR:H	18	0.26
(2,91)	1:A:83:ILE:HG22	1:A:84:THR:H	18	0.26
(2,91)	1:A:83:ILE:HG23	1:A:84:THR:H	18	0.26
(2,89)	1:A:107:GLN:HB2	1:A:108:ASP:H	5	0.26
(2,89)	1:A:107:GLN:HB3	1:A:108:ASP:H	5	0.26
(2,80)	1:A:41:MET:HA	1:A:56:THR:H	9	0.26
(2,80)	1:A:42:ARG:HA	1:A:56:THR:H	9	0.26
(2,80)	1:A:56:THR:HB	1:A:56:THR:H	9	0.26
(2,80)	1:A:41:MET:HA	1:A:56:THR:H	17	0.26
(2,80)	1:A:42:ARG:HA	1:A:56:THR:H	17	0.26
(2,80)	1:A:56:THR:HB	1:A:56:THR:H	17	0.26
(2,66)	1:A:4:ALA:H	1:A:7:ASP:H	19	0.26
(2,66)	1:A:5:GLU:H	1:A:7:ASP:H	19	0.26
(2,54)	1:A:17:PRO:HB2	1:A:18:SER:H	3	0.26
(2,54)	1:A:17:PRO:HB3	1:A:18:SER:H	3	0.26
(2,54)	1:A:17:PRO:HG2	1:A:18:SER:H	3	0.26
(2,54)	1:A:17:PRO:HG3	1:A:18:SER:H	3	0.26
(2,43)	1:A:10:CYS:HA	1:A:14:GLN:H	11	0.26
(2,43)	1:A:11:ASN:HA	1:A:14:GLN:H	11	0.26
(2,43)	1:A:13:GLY:HA2	1:A:14:GLN:H	11	0.26

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,43)	1:A:13:GLY:HA3	1:A:14:GLN:H	11	0.26
(2,43)	1:A:10:CYS:HA	1:A:14:GLN:H	12	0.26
(2,43)	1:A:11:ASN:HA	1:A:14:GLN:H	12	0.26
(2,43)	1:A:13:GLY:HA2	1:A:14:GLN:H	12	0.26
(2,43)	1:A:13:GLY:HA3	1:A:14:GLN:H	12	0.26
(2,43)	1:A:10:CYS:HA	1:A:14:GLN:H	13	0.26
(2,43)	1:A:11:ASN:HA	1:A:14:GLN:H	13	0.26
(2,43)	1:A:13:GLY:HA2	1:A:14:GLN:H	13	0.26
(2,43)	1:A:13:GLY:HA3	1:A:14:GLN:H	13	0.26
(2,43)	1:A:10:CYS:HA	1:A:14:GLN:H	16	0.26
(2,43)	1:A:11:ASN:HA	1:A:14:GLN:H	16	0.26
(2,43)	1:A:13:GLY:HA2	1:A:14:GLN:H	16	0.26
(2,43)	1:A:13:GLY:HA3	1:A:14:GLN:H	16	0.26
(2,39)	1:A:98:ILE:HD11	1:A:115:ASP:H	10	0.26
(2,39)	1:A:98:ILE:HD12	1:A:115:ASP:H	10	0.26
(2,39)	1:A:98:ILE:HD13	1:A:115:ASP:H	10	0.26
(2,39)	1:A:117:LEU:HD11	1:A:115:ASP:H	10	0.26
(2,39)	1:A:117:LEU:HD12	1:A:115:ASP:H	10	0.26
(2,39)	1:A:117:LEU:HD13	1:A:115:ASP:H	10	0.26
(2,39)	1:A:117:LEU:HD21	1:A:115:ASP:H	10	0.26
(2,39)	1:A:117:LEU:HD22	1:A:115:ASP:H	10	0.26
(2,39)	1:A:117:LEU:HD23	1:A:115:ASP:H	10	0.26
(2,375)	1:A:48:GLU:HB2	1:A:61:VAL:H	1	0.26
(2,375)	1:A:48:GLU:HB3	1:A:61:VAL:H	1	0.26
(2,375)	1:A:60:PRO:HD3	1:A:61:VAL:H	1	0.26
(2,359)	1:A:83:ILE:HD11	1:A:98:ILE:H	3	0.26
(2,359)	1:A:83:ILE:HD12	1:A:98:ILE:H	3	0.26
(2,359)	1:A:83:ILE:HD13	1:A:98:ILE:H	3	0.26
(2,359)	1:A:98:ILE:HD11	1:A:98:ILE:H	3	0.26
(2,359)	1:A:98:ILE:HD12	1:A:98:ILE:H	3	0.26
(2,359)	1:A:98:ILE:HD13	1:A:98:ILE:H	3	0.26
(2,351)	1:A:12:ASN:HB2	1:A:12:ASN:H	6	0.26
(2,351)	1:A:12:ASN:HB3	1:A:12:ASN:H	6	0.26
(2,351)	1:A:13:GLY:HA2	1:A:12:ASN:H	6	0.26
(2,351)	1:A:13:GLY:HA3	1:A:12:ASN:H	6	0.26
(2,351)	1:A:12:ASN:HB2	1:A:12:ASN:H	8	0.26
(2,351)	1:A:12:ASN:HB3	1:A:12:ASN:H	8	0.26
(2,351)	1:A:13:GLY:HA2	1:A:12:ASN:H	8	0.26
(2,351)	1:A:13:GLY:HA3	1:A:12:ASN:H	8	0.26
(2,345)	1:A:84:THR:HG1	1:A:85:CYS:H	19	0.26
(2,345)	1:A:84:THR:HG21	1:A:85:CYS:H	19	0.26
(2,345)	1:A:84:THR:HG22	1:A:85:CYS:H	19	0.26

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,345)	1:A:84:THR:HG23	1:A:85:CYS:H	19	0.26
(2,345)	1:A:91:THR:HG21	1:A:85:CYS:H	19	0.26
(2,345)	1:A:91:THR:HG22	1:A:85:CYS:H	19	0.26
(2,345)	1:A:91:THR:HG23	1:A:85:CYS:H	19	0.26
(2,331)	1:A:2:THR:H	1:A:99:SER:H	4	0.26
(2,331)	1:A:3:CYS:H	1:A:99:SER:H	4	0.26
(2,331)	1:A:80:CYS:H	1:A:99:SER:H	4	0.26
(2,331)	1:A:81:GLY:H	1:A:99:SER:H	4	0.26
(2,331)	1:A:101:ASN:H	1:A:99:SER:H	4	0.26
(2,306)	1:A:71:CYS:HB2	1:A:77:GLU:H	8	0.26
(2,306)	1:A:71:CYS:HB3	1:A:77:GLU:H	8	0.26
(2,306)	1:A:80:CYS:HB2	1:A:77:GLU:H	8	0.26
(2,306)	1:A:80:CYS:HB3	1:A:77:GLU:H	8	0.26
(2,300)	1:A:44:CYS:HB2	1:A:48:GLU:H	16	0.26
(2,300)	1:A:44:CYS:HB3	1:A:48:GLU:H	16	0.26
(2,300)	1:A:48:GLU:HG2	1:A:48:GLU:H	16	0.26
(2,300)	1:A:48:GLU:HG3	1:A:48:GLU:H	16	0.26
(2,29)	1:A:28:CYS:HA	1:A:29:GLU:H	1	0.26
(2,29)	1:A:30:ASP:HA	1:A:29:GLU:H	1	0.26
(2,29)	1:A:28:CYS:HA	1:A:29:GLU:H	2	0.26
(2,29)	1:A:30:ASP:HA	1:A:29:GLU:H	2	0.26
(2,29)	1:A:28:CYS:HA	1:A:29:GLU:H	3	0.26
(2,29)	1:A:30:ASP:HA	1:A:29:GLU:H	3	0.26
(2,29)	1:A:28:CYS:HA	1:A:29:GLU:H	10	0.26
(2,29)	1:A:30:ASP:HA	1:A:29:GLU:H	10	0.26
(2,29)	1:A:28:CYS:HA	1:A:29:GLU:H	17	0.26
(2,29)	1:A:30:ASP:HA	1:A:29:GLU:H	17	0.26
(2,278)	1:A:41:MET:HA	1:A:42:ARG:H	4	0.26
(2,278)	1:A:42:ARG:HA	1:A:42:ARG:H	4	0.26
(2,278)	1:A:43:THR:HA	1:A:42:ARG:H	4	0.26
(2,278)	1:A:56:THR:HB	1:A:42:ARG:H	4	0.26
(2,278)	1:A:41:MET:HA	1:A:42:ARG:H	7	0.26
(2,278)	1:A:42:ARG:HA	1:A:42:ARG:H	7	0.26
(2,278)	1:A:43:THR:HA	1:A:42:ARG:H	7	0.26
(2,278)	1:A:56:THR:HB	1:A:42:ARG:H	7	0.26
(2,278)	1:A:41:MET:HA	1:A:42:ARG:H	17	0.26
(2,278)	1:A:42:ARG:HA	1:A:42:ARG:H	17	0.26
(2,278)	1:A:43:THR:HA	1:A:42:ARG:H	17	0.26
(2,278)	1:A:56:THR:HB	1:A:42:ARG:H	17	0.26
(2,278)	1:A:41:MET:HA	1:A:42:ARG:H	19	0.26
(2,278)	1:A:42:ARG:HA	1:A:42:ARG:H	19	0.26
(2,278)	1:A:43:THR:HA	1:A:42:ARG:H	19	0.26

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,278)	1:A:56:THR:HB	1:A:42:ARG:H	19	0.26
(2,259)	1:A:69:ASN:HB2	1:A:69:ASN:HD21	19	0.26
(2,259)	1:A:69:ASN:HB3	1:A:69:ASN:HD21	19	0.26
(2,259)	1:A:70:ASP:HB2	1:A:69:ASN:HD21	19	0.26
(2,259)	1:A:70:ASP:HB3	1:A:69:ASN:HD21	19	0.26
(2,24)	1:A:11:ASN:HB2	1:A:11:ASN:H	10	0.26
(2,24)	1:A:11:ASN:HB3	1:A:11:ASN:H	10	0.26
(2,24)	1:A:12:ASN:HB2	1:A:11:ASN:H	10	0.26
(2,228)	1:A:28:CYS:HB2	1:A:28:CYS:H	15	0.26
(2,228)	1:A:28:CYS:HB3	1:A:28:CYS:H	15	0.26
(2,228)	1:A:29:GLU:HA	1:A:28:CYS:H	15	0.26
(2,228)	1:A:32:SER:HA	1:A:28:CYS:H	15	0.26
(2,227)	1:A:19:ARG:HG2	1:A:21:LYS:H	4	0.26
(2,227)	1:A:19:ARG:HG2	1:A:21:LYS:H	4	0.26
(2,227)	1:A:19:ARG:HG3	1:A:21:LYS:H	4	0.26
(2,227)	1:A:19:ARG:HG3	1:A:21:LYS:H	4	0.26
(2,227)	1:A:21:LYS:HB2	1:A:21:LYS:H	4	0.26
(2,227)	1:A:21:LYS:HB3	1:A:21:LYS:H	4	0.26
(2,227)	1:A:21:LYS:HD2	1:A:21:LYS:H	4	0.26
(2,227)	1:A:21:LYS:HD3	1:A:21:LYS:H	4	0.26
(2,227)	1:A:19:ARG:HG2	1:A:21:LYS:H	14	0.26
(2,227)	1:A:19:ARG:HG2	1:A:21:LYS:H	14	0.26
(2,227)	1:A:19:ARG:HG3	1:A:21:LYS:H	14	0.26
(2,227)	1:A:19:ARG:HG3	1:A:21:LYS:H	14	0.26
(2,227)	1:A:21:LYS:HB2	1:A:21:LYS:H	14	0.26
(2,227)	1:A:21:LYS:HB3	1:A:21:LYS:H	14	0.26
(2,227)	1:A:21:LYS:HD2	1:A:21:LYS:H	14	0.26
(2,227)	1:A:21:LYS:HD3	1:A:21:LYS:H	14	0.26
(2,223)	1:A:45:ARG:HG2	1:A:45:ARG:H	12	0.26
(2,223)	1:A:45:ARG:HG3	1:A:45:ARG:H	12	0.26
(2,223)	1:A:46:ILE:HB	1:A:45:ARG:H	12	0.26
(2,202)	1:A:22:CYS:HA	1:A:23:ASP:H	5	0.26
(2,202)	1:A:23:ASP:HA	1:A:23:ASP:H	5	0.26
(2,202)	1:A:22:CYS:HA	1:A:23:ASP:H	19	0.26
(2,202)	1:A:23:ASP:HA	1:A:23:ASP:H	19	0.26
(2,200)	1:A:77:GLU:HG2	1:A:76:ASP:H	12	0.26
(2,200)	1:A:77:GLU:HG3	1:A:76:ASP:H	12	0.26
(2,200)	1:A:87:PRO:HG2	1:A:76:ASP:H	12	0.26
(2,200)	1:A:87:PRO:HG3	1:A:76:ASP:H	12	0.26
(2,20)	1:A:82:ASN:H	1:A:83:ILE:H	12	0.26
(2,20)	1:A:85:CYS:H	1:A:83:ILE:H	12	0.26
(2,164)	1:A:14:GLN:HB2	1:A:14:GLN:H	9	0.26

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,164)	1:A:14:GLN:HB3	1:A:14:GLN:H	9	0.26
(2,163)	1:A:71:CYS:HA	1:A:77:GLU:H	1	0.26
(2,163)	1:A:77:GLU:HA	1:A:77:GLU:H	1	0.26
(2,163)	1:A:71:CYS:HA	1:A:77:GLU:H	6	0.26
(2,163)	1:A:77:GLU:HA	1:A:77:GLU:H	6	0.26
(2,162)	1:A:50:SER:HA	1:A:59:ILE:H	15	0.26
(2,162)	1:A:59:ILE:HA	1:A:59:ILE:H	15	0.26
(2,162)	1:A:50:SER:HA	1:A:59:ILE:H	19	0.26
(2,162)	1:A:59:ILE:HA	1:A:59:ILE:H	19	0.26
(2,156)	1:A:51:CYS:HB2	1:A:71:CYS:H	5	0.26
(2,156)	1:A:51:CYS:HB3	1:A:71:CYS:H	5	0.26
(2,156)	1:A:71:CYS:HB2	1:A:71:CYS:H	5	0.26
(2,156)	1:A:71:CYS:HB3	1:A:71:CYS:H	5	0.26
(2,156)	1:A:51:CYS:HB2	1:A:71:CYS:H	11	0.26
(2,156)	1:A:51:CYS:HB3	1:A:71:CYS:H	11	0.26
(2,156)	1:A:71:CYS:HB2	1:A:71:CYS:H	11	0.26
(2,156)	1:A:71:CYS:HB3	1:A:71:CYS:H	11	0.26
(2,134)	1:A:79:ASN:HB2	1:A:85:CYS:H	4	0.26
(2,134)	1:A:79:ASN:HB3	1:A:85:CYS:H	4	0.26
(2,134)	1:A:97:CYS:HB2	1:A:85:CYS:H	4	0.26
(2,134)	1:A:97:CYS:HB3	1:A:85:CYS:H	4	0.26
(2,123)	1:A:16:VAL:HG11	1:A:33:ASP:H	1	0.26
(2,123)	1:A:16:VAL:HG12	1:A:33:ASP:H	1	0.26
(2,123)	1:A:16:VAL:HG13	1:A:33:ASP:H	1	0.26
(2,123)	1:A:16:VAL:HG21	1:A:33:ASP:H	1	0.26
(2,123)	1:A:16:VAL:HG22	1:A:33:ASP:H	1	0.26
(2,123)	1:A:16:VAL:HG23	1:A:33:ASP:H	1	0.26
(2,109)	1:A:89:GLU:HB2	1:A:100:ARG:H	6	0.26
(2,109)	1:A:89:GLU:HB3	1:A:100:ARG:H	6	0.26
(2,109)	1:A:100:ARG:HB2	1:A:100:ARG:H	6	0.26
(2,109)	1:A:100:ARG:HB3	1:A:100:ARG:H	6	0.26
(2,109)	1:A:89:GLU:HB2	1:A:100:ARG:H	14	0.26
(2,109)	1:A:89:GLU:HB3	1:A:100:ARG:H	14	0.26
(2,109)	1:A:100:ARG:HB2	1:A:100:ARG:H	14	0.26
(2,109)	1:A:100:ARG:HB3	1:A:100:ARG:H	14	0.26
(1,98)	1:A:98:ILE:HG12	1:A:99:SER:H	14	0.26
(1,98)	1:A:98:ILE:HG13	1:A:99:SER:H	14	0.26
(1,96)	1:A:100:ARG:H	1:A:89:GLU:HA	7	0.26
(1,926)	1:A:16:VAL:HG11	1:A:20:TRP:HZ3	17	0.26
(1,926)	1:A:16:VAL:HG12	1:A:20:TRP:HZ3	17	0.26
(1,926)	1:A:16:VAL:HG13	1:A:20:TRP:HZ3	17	0.26
(1,925)	1:A:8:PHE:HB3	1:A:16:VAL:HG21	2	0.26

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,925)	1:A:8:PHE:HB3	1:A:16:VAL:HG22	2	0.26
(1,925)	1:A:8:PHE:HB3	1:A:16:VAL:HG23	2	0.26
(1,916)	1:A:77:GLU:HB2	1:A:77:GLU:H	8	0.26
(1,916)	1:A:77:GLU:HB3	1:A:77:GLU:H	8	0.26
(1,907)	1:A:39:CYS:H	1:A:41:MET:H	3	0.26
(1,907)	1:A:39:CYS:H	1:A:41:MET:H	12	0.26
(1,904)	1:A:105:ASN:HB2	1:A:105:ASN:HD21	2	0.26
(1,904)	1:A:105:ASN:HB3	1:A:105:ASN:HD21	2	0.26
(1,904)	1:A:105:ASN:HB2	1:A:105:ASN:HD21	3	0.26
(1,904)	1:A:105:ASN:HB3	1:A:105:ASN:HD21	3	0.26
(1,904)	1:A:105:ASN:HB2	1:A:105:ASN:HD21	7	0.26
(1,904)	1:A:105:ASN:HB3	1:A:105:ASN:HD21	7	0.26
(1,904)	1:A:105:ASN:HB2	1:A:105:ASN:HD21	17	0.26
(1,904)	1:A:105:ASN:HB3	1:A:105:ASN:HD21	17	0.26
(1,900)	1:A:83:ILE:HG12	1:A:82:ASN:H	1	0.26
(1,900)	1:A:83:ILE:HG13	1:A:82:ASN:H	1	0.26
(1,9)	1:A:12:ASN:H	1:A:11:ASN:H	2	0.26
(1,897)	1:A:77:GLU:HB2	1:A:69:ASN:HD22	18	0.26
(1,897)	1:A:77:GLU:HB3	1:A:69:ASN:HD22	18	0.26
(1,896)	1:A:64:ARG:H	1:A:66:ASP:H	3	0.26
(1,896)	1:A:64:ARG:H	1:A:66:ASP:H	11	0.26
(1,896)	1:A:64:ARG:H	1:A:66:ASP:H	20	0.26
(1,891)	1:A:64:ARG:H	1:A:80:CYS:HB2	13	0.26
(1,891)	1:A:64:ARG:H	1:A:80:CYS:HB3	13	0.26
(1,888)	1:A:49:ILE:HA	1:A:61:VAL:H	7	0.26
(1,876)	1:A:39:CYS:HB2	1:A:43:THR:H	6	0.26
(1,876)	1:A:39:CYS:HB3	1:A:43:THR:H	6	0.26
(1,869)	1:A:14:GLN:HE22	1:A:28:CYS:H	11	0.26
(1,869)	1:A:14:GLN:HE22	1:A:28:CYS:H	12	0.26
(1,869)	1:A:14:GLN:HE22	1:A:28:CYS:H	16	0.26
(1,860)	1:A:16:VAL:HB	1:A:19:ARG:H	11	0.26
(1,853)	1:A:10:CYS:HB2	1:A:12:ASN:H	6	0.26
(1,853)	1:A:10:CYS:HB3	1:A:12:ASN:H	6	0.26
(1,849)	1:A:33:ASP:H	1:A:11:ASN:H	2	0.26
(1,849)	1:A:33:ASP:H	1:A:11:ASN:H	20	0.26
(1,842)	1:A:80:CYS:HA	1:A:84:THR:H	17	0.26
(1,838)	1:A:58:CYS:HA	1:A:52:GLY:H	13	0.26
(1,837)	1:A:50:SER:H	1:A:45:ARG:HD2	8	0.26
(1,837)	1:A:50:SER:H	1:A:45:ARG:HD3	8	0.26
(1,820)	1:A:110:CYS:H	1:A:115:ASP:H	1	0.26
(1,808)	1:A:116:GLU:HB2	1:A:104:CYS:H	12	0.26
(1,808)	1:A:116:GLU:HB3	1:A:104:CYS:H	12	0.26

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,808)	1:A:116:GLU:HB2	1:A:104:CYS:H	15	0.26
(1,808)	1:A:116:GLU:HB3	1:A:104:CYS:H	15	0.26
(1,806)	1:A:101:ASN:HD21	1:A:102:PHE:H	3	0.26
(1,803)	1:A:101:ASN:HD21	1:A:99:SER:H	6	0.26
(1,801)	1:A:102:PHE:HB2	1:A:98:ILE:H	5	0.26
(1,801)	1:A:102:PHE:HB3	1:A:98:ILE:H	5	0.26
(1,801)	1:A:102:PHE:HB2	1:A:98:ILE:H	13	0.26
(1,801)	1:A:102:PHE:HB3	1:A:98:ILE:H	13	0.26
(1,801)	1:A:102:PHE:HB2	1:A:98:ILE:H	20	0.26
(1,801)	1:A:102:PHE:HB3	1:A:98:ILE:H	20	0.26
(1,800)	1:A:85:CYS:HB2	1:A:98:ILE:H	11	0.26
(1,800)	1:A:85:CYS:HB3	1:A:98:ILE:H	11	0.26
(1,794)	1:A:82:ASN:HD22	1:A:94:SER:H	5	0.26
(1,794)	1:A:82:ASN:HD22	1:A:94:SER:H	16	0.26
(1,789)	1:A:85:CYS:H	1:A:84:THR:HB	9	0.26
(1,789)	1:A:85:CYS:H	1:A:84:THR:HB	10	0.26
(1,781)	1:A:73:SER:H	1:A:71:CYS:HB2	2	0.26
(1,781)	1:A:73:SER:H	1:A:71:CYS:HB3	2	0.26
(1,772)	1:A:68:GLU:H	1:A:64:ARG:H	2	0.26
(1,768)	1:A:58:CYS:HA	1:A:59:ILE:H	11	0.26
(1,768)	1:A:58:CYS:HA	1:A:59:ILE:H	16	0.26
(1,750)	1:A:57:GLN:HB2	1:A:52:GLY:H	16	0.26
(1,750)	1:A:57:GLN:HB2	1:A:52:GLY:H	16	0.26
(1,750)	1:A:57:GLN:HB3	1:A:52:GLY:H	16	0.26
(1,750)	1:A:57:GLN:HB3	1:A:52:GLY:H	16	0.26
(1,745)	1:A:48:GLU:HB2	1:A:49:ILE:H	20	0.26
(1,745)	1:A:48:GLU:HB3	1:A:49:ILE:H	20	0.26
(1,740)	1:A:35:SER:H	1:A:56:THR:HG1	18	0.26
(1,740)	1:A:35:SER:H	1:A:56:THR:HG21	18	0.26
(1,740)	1:A:35:SER:H	1:A:56:THR:HG22	18	0.26
(1,740)	1:A:35:SER:H	1:A:56:THR:HG23	18	0.26
(1,724)	1:A:34:GLU:HB2	1:A:25:ASP:H	15	0.26
(1,724)	1:A:34:GLU:HB3	1:A:25:ASP:H	15	0.26
(1,724)	1:A:34:GLU:HB2	1:A:25:ASP:H	18	0.26
(1,724)	1:A:34:GLU:HB3	1:A:25:ASP:H	18	0.26
(1,708)	1:A:44:CYS:HB2	1:A:45:ARG:H	8	0.26
(1,708)	1:A:44:CYS:HB3	1:A:45:ARG:H	8	0.26
(1,698)	1:A:64:ARG:H	1:A:64:ARG:HG2	19	0.26
(1,698)	1:A:64:ARG:H	1:A:64:ARG:HG3	19	0.26
(1,696)	1:A:44:CYS:HB2	1:A:34:GLU:H	5	0.26
(1,696)	1:A:44:CYS:HB3	1:A:34:GLU:H	5	0.26
(1,696)	1:A:44:CYS:HB2	1:A:34:GLU:H	17	0.26

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,696)	1:A:44:CYS:HB3	1:A:34:GLU:H	17	0.26
(1,693)	1:A:21:LYS:HD2	1:A:21:LYS:H	10	0.26
(1,693)	1:A:21:LYS:HD3	1:A:21:LYS:H	10	0.26
(1,690)	1:A:61:VAL:HG11	1:A:49:ILE:H	19	0.26
(1,690)	1:A:61:VAL:HG12	1:A:49:ILE:H	19	0.26
(1,690)	1:A:61:VAL:HG13	1:A:49:ILE:H	19	0.26
(1,690)	1:A:61:VAL:HG21	1:A:49:ILE:H	19	0.26
(1,690)	1:A:61:VAL:HG22	1:A:49:ILE:H	19	0.26
(1,690)	1:A:61:VAL:HG23	1:A:49:ILE:H	19	0.26
(1,683)	1:A:78:GLU:HG2	1:A:79:ASN:HD21	15	0.26
(1,683)	1:A:78:GLU:HG3	1:A:79:ASN:HD21	15	0.26
(1,683)	1:A:78:GLU:HG2	1:A:79:ASN:HD21	17	0.26
(1,683)	1:A:78:GLU:HG3	1:A:79:ASN:HD21	17	0.26
(1,673)	1:A:17:PRO:HB2	1:A:20:TRP:HE1	14	0.26
(1,673)	1:A:17:PRO:HB3	1:A:20:TRP:HE1	14	0.26
(1,667)	1:A:107:GLN:HG2	1:A:105:ASN:HD22	10	0.26
(1,667)	1:A:107:GLN:HG2	1:A:105:ASN:HD22	10	0.26
(1,667)	1:A:107:GLN:HG3	1:A:105:ASN:HD22	10	0.26
(1,667)	1:A:107:GLN:HG3	1:A:105:ASN:HD22	10	0.26
(1,666)	1:A:105:ASN:HB2	1:A:105:ASN:HD21	2	0.26
(1,666)	1:A:105:ASN:HB3	1:A:105:ASN:HD21	2	0.26
(1,666)	1:A:105:ASN:HB2	1:A:105:ASN:HD21	3	0.26
(1,666)	1:A:105:ASN:HB3	1:A:105:ASN:HD21	3	0.26
(1,666)	1:A:105:ASN:HB2	1:A:105:ASN:HD21	7	0.26
(1,666)	1:A:105:ASN:HB3	1:A:105:ASN:HD21	7	0.26
(1,666)	1:A:105:ASN:HB2	1:A:105:ASN:HD21	17	0.26
(1,666)	1:A:105:ASN:HB3	1:A:105:ASN:HD21	17	0.26
(1,66)	1:A:23:ASP:H	1:A:24:GLY:H	5	0.26
(1,658)	1:A:102:PHE:HA	1:A:105:ASN:HD22	6	0.26
(1,658)	1:A:102:PHE:HA	1:A:105:ASN:HD22	7	0.26
(1,658)	1:A:102:PHE:HA	1:A:105:ASN:HD22	19	0.26
(1,627)	1:A:72:ASP:HA	1:A:57:GLN:HE22	19	0.26
(1,591)	1:A:69:ASN:HB2	1:A:69:ASN:HD21	12	0.26
(1,591)	1:A:69:ASN:HB3	1:A:69:ASN:HD21	12	0.26
(1,591)	1:A:69:ASN:HB2	1:A:69:ASN:HD21	15	0.26
(1,591)	1:A:69:ASN:HB3	1:A:69:ASN:HD21	15	0.26
(1,569)	1:A:85:CYS:H	1:A:84:THR:H	9	0.26
(1,569)	1:A:85:CYS:H	1:A:84:THR:H	14	0.26
(1,545)	1:A:103:VAL:HA	1:A:105:ASN:H	1	0.26
(1,545)	1:A:103:VAL:HA	1:A:105:ASN:H	8	0.26
(1,545)	1:A:103:VAL:HA	1:A:105:ASN:H	17	0.26
(1,545)	1:A:103:VAL:HA	1:A:105:ASN:H	18	0.26

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,542)	1:A:112:ASP:H	1:A:114:SER:H	16	0.26
(1,526)	1:A:64:ARG:H	1:A:67:GLY:H	6	0.26
(1,526)	1:A:64:ARG:H	1:A:67:GLY:H	17	0.26
(1,518)	1:A:49:ILE:H	1:A:61:VAL:H	2	0.26
(1,518)	1:A:49:ILE:H	1:A:61:VAL:H	7	0.26
(1,516)	1:A:49:ILE:H	1:A:59:ILE:H	8	0.26
(1,51)	1:A:78:GLU:H	1:A:77:GLU:H	2	0.26
(1,501)	1:A:34:GLU:HB2	1:A:34:GLU:H	10	0.26
(1,501)	1:A:34:GLU:HB3	1:A:34:GLU:H	10	0.26
(1,49)	1:A:94:SER:H	1:A:93:SER:H	11	0.26
(1,486)	1:A:7:ASP:HA	1:A:19:ARG:H	8	0.26
(1,414)	1:A:63:TRP:H	1:A:63:TRP:HB2	7	0.26
(1,414)	1:A:63:TRP:H	1:A:63:TRP:HB3	7	0.26
(1,397)	1:A:54:HIS:H	1:A:54:HIS:HB2	1	0.26
(1,397)	1:A:54:HIS:H	1:A:54:HIS:HB3	1	0.26
(1,397)	1:A:54:HIS:H	1:A:54:HIS:HB2	18	0.26
(1,397)	1:A:54:HIS:H	1:A:54:HIS:HB3	18	0.26
(1,386)	1:A:51:CYS:HB2	1:A:51:CYS:H	1	0.26
(1,386)	1:A:51:CYS:HB3	1:A:51:CYS:H	1	0.26
(1,386)	1:A:51:CYS:HB2	1:A:51:CYS:H	3	0.26
(1,386)	1:A:51:CYS:HB3	1:A:51:CYS:H	3	0.26
(1,386)	1:A:51:CYS:HB2	1:A:51:CYS:H	5	0.26
(1,386)	1:A:51:CYS:HB3	1:A:51:CYS:H	5	0.26
(1,386)	1:A:51:CYS:HB2	1:A:51:CYS:H	19	0.26
(1,386)	1:A:51:CYS:HB3	1:A:51:CYS:H	19	0.26
(1,369)	1:A:43:THR:HB	1:A:44:CYS:H	10	0.26
(1,365)	1:A:43:THR:HB	1:A:43:THR:H	5	0.26
(1,365)	1:A:43:THR:HB	1:A:43:THR:H	9	0.26
(1,351)	1:A:32:SER:H	1:A:33:ASP:H	3	0.26
(1,351)	1:A:32:SER:H	1:A:33:ASP:H	10	0.26
(1,349)	1:A:32:SER:H	1:A:33:ASP:H	3	0.26
(1,349)	1:A:32:SER:H	1:A:33:ASP:H	10	0.26
(1,343)	1:A:28:CYS:HB2	1:A:28:CYS:H	1	0.26
(1,343)	1:A:28:CYS:HB3	1:A:28:CYS:H	1	0.26
(1,339)	1:A:25:ASP:H	1:A:20:TRP:HB2	1	0.26
(1,339)	1:A:25:ASP:H	1:A:20:TRP:HB3	1	0.26
(1,339)	1:A:25:ASP:H	1:A:20:TRP:HB2	5	0.26
(1,339)	1:A:25:ASP:H	1:A:20:TRP:HB3	5	0.26
(1,339)	1:A:25:ASP:H	1:A:20:TRP:HB2	17	0.26
(1,339)	1:A:25:ASP:H	1:A:20:TRP:HB3	17	0.26
(1,320)	1:A:7:ASP:HA	1:A:18:SER:H	6	0.26
(1,296)	1:A:10:CYS:HB2	1:A:10:CYS:H	7	0.26

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,296)	1:A:10:CYS:HB3	1:A:10:CYS:H	7	0.26
(1,228)	1:A:92:CYS:HB2	1:A:93:SER:H	13	0.26
(1,228)	1:A:92:CYS:HB3	1:A:93:SER:H	13	0.26
(1,224)	1:A:92:CYS:HA	1:A:94:SER:H	8	0.26
(1,205)	1:A:98:ILE:HG12	1:A:98:ILE:H	6	0.26
(1,205)	1:A:98:ILE:HG13	1:A:98:ILE:H	6	0.26
(1,205)	1:A:98:ILE:HG12	1:A:98:ILE:H	11	0.26
(1,205)	1:A:98:ILE:HG13	1:A:98:ILE:H	11	0.26
(1,205)	1:A:98:ILE:HG12	1:A:98:ILE:H	13	0.26
(1,205)	1:A:98:ILE:HG13	1:A:98:ILE:H	13	0.26
(1,204)	1:A:98:ILE:HG12	1:A:98:ILE:H	10	0.26
(1,204)	1:A:98:ILE:HG13	1:A:98:ILE:H	10	0.26
(1,187)	1:A:103:VAL:HG11	1:A:102:PHE:H	14	0.26
(1,187)	1:A:103:VAL:HG12	1:A:102:PHE:H	14	0.26
(1,187)	1:A:103:VAL:HG13	1:A:102:PHE:H	14	0.26
(1,187)	1:A:103:VAL:HG21	1:A:102:PHE:H	14	0.26
(1,187)	1:A:103:VAL:HG22	1:A:102:PHE:H	14	0.26
(1,187)	1:A:103:VAL:HG23	1:A:102:PHE:H	14	0.26
(1,187)	1:A:103:VAL:HG11	1:A:102:PHE:H	16	0.26
(1,187)	1:A:103:VAL:HG12	1:A:102:PHE:H	16	0.26
(1,187)	1:A:103:VAL:HG13	1:A:102:PHE:H	16	0.26
(1,187)	1:A:103:VAL:HG21	1:A:102:PHE:H	16	0.26
(1,187)	1:A:103:VAL:HG22	1:A:102:PHE:H	16	0.26
(1,187)	1:A:103:VAL:HG23	1:A:102:PHE:H	16	0.26
(1,17)	1:A:81:GLY:H	1:A:80:CYS:H	13	0.26
(1,158)	1:A:104:CYS:HA	1:A:105:ASN:H	11	0.26
(1,128)	1:A:114:SER:HA	1:A:114:SER:H	16	0.26
(1,123)	1:A:115:ASP:HB2	1:A:115:ASP:H	12	0.26
(1,123)	1:A:115:ASP:HB3	1:A:115:ASP:H	12	0.26
(4,8)	1:A:8:PHE:O	1:A:16:VAL:H	12	0.25
(4,2)	1:A:90:PHE:O	1:A:98:ILE:H	3	0.25
(4,2)	1:A:90:PHE:O	1:A:98:ILE:H	12	0.25
(2,98)	1:A:28:CYS:HB2	1:A:11:ASN:H	1	0.25
(2,98)	1:A:28:CYS:HB3	1:A:11:ASN:H	1	0.25
(2,98)	1:A:32:SER:HB2	1:A:11:ASN:H	1	0.25
(2,98)	1:A:32:SER:HB3	1:A:11:ASN:H	1	0.25
(2,97)	1:A:20:TRP:HB2	1:A:20:TRP:H	8	0.25
(2,97)	1:A:20:TRP:HB3	1:A:20:TRP:H	8	0.25
(2,97)	1:A:21:LYS:HA	1:A:20:TRP:H	8	0.25
(2,97)	1:A:20:TRP:HB2	1:A:20:TRP:H	17	0.25
(2,97)	1:A:20:TRP:HB3	1:A:20:TRP:H	17	0.25
(2,97)	1:A:21:LYS:HA	1:A:20:TRP:H	17	0.25

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,80)	1:A:41:MET:HA	1:A:56:THR:H	13	0.25
(2,80)	1:A:42:ARG:HA	1:A:56:THR:H	13	0.25
(2,80)	1:A:56:THR:HB	1:A:56:THR:H	13	0.25
(2,80)	1:A:41:MET:HA	1:A:56:THR:H	20	0.25
(2,80)	1:A:42:ARG:HA	1:A:56:THR:H	20	0.25
(2,80)	1:A:56:THR:HB	1:A:56:THR:H	20	0.25
(2,76)	1:A:28:CYS:HB2	1:A:32:SER:H	6	0.25
(2,76)	1:A:28:CYS:HB3	1:A:32:SER:H	6	0.25
(2,76)	1:A:29:GLU:HA	1:A:32:SER:H	6	0.25
(2,76)	1:A:32:SER:HA	1:A:32:SER:H	6	0.25
(2,76)	1:A:32:SER:HB2	1:A:32:SER:H	6	0.25
(2,76)	1:A:32:SER:HB3	1:A:32:SER:H	6	0.25
(2,76)	1:A:33:ASP:HA	1:A:32:SER:H	6	0.25
(2,76)	1:A:35:SER:HB2	1:A:32:SER:H	6	0.25
(2,76)	1:A:35:SER:HB3	1:A:32:SER:H	6	0.25
(2,66)	1:A:4:ALA:H	1:A:7:ASP:H	7	0.25
(2,66)	1:A:5:GLU:H	1:A:7:ASP:H	7	0.25
(2,66)	1:A:4:ALA:H	1:A:7:ASP:H	11	0.25
(2,66)	1:A:5:GLU:H	1:A:7:ASP:H	11	0.25
(2,43)	1:A:10:CYS:HA	1:A:14:GLN:H	7	0.25
(2,43)	1:A:11:ASN:HA	1:A:14:GLN:H	7	0.25
(2,43)	1:A:13:GLY:HA2	1:A:14:GLN:H	7	0.25
(2,43)	1:A:13:GLY:HA3	1:A:14:GLN:H	7	0.25
(2,43)	1:A:10:CYS:HA	1:A:14:GLN:H	20	0.25
(2,43)	1:A:11:ASN:HA	1:A:14:GLN:H	20	0.25
(2,43)	1:A:13:GLY:HA2	1:A:14:GLN:H	20	0.25
(2,43)	1:A:13:GLY:HA3	1:A:14:GLN:H	20	0.25
(2,365)	1:A:69:ASN:HA	1:A:70:ASP:H	10	0.25
(2,365)	1:A:70:ASP:HA	1:A:70:ASP:H	10	0.25
(2,351)	1:A:12:ASN:HB2	1:A:12:ASN:H	9	0.25
(2,351)	1:A:12:ASN:HB3	1:A:12:ASN:H	9	0.25
(2,351)	1:A:13:GLY:HA2	1:A:12:ASN:H	9	0.25
(2,351)	1:A:13:GLY:HA3	1:A:12:ASN:H	9	0.25
(2,342)	1:A:17:PRO:HB2	1:A:20:TRP:HE1	2	0.25
(2,342)	1:A:17:PRO:HB3	1:A:20:TRP:HE1	2	0.25
(2,342)	1:A:19:ARG:HB2	1:A:20:TRP:HE1	2	0.25
(2,342)	1:A:19:ARG:HB3	1:A:20:TRP:HE1	2	0.25
(2,328)	1:A:49:ILE:HG21	1:A:62:SER:H	6	0.25
(2,328)	1:A:49:ILE:HG22	1:A:62:SER:H	6	0.25
(2,328)	1:A:49:ILE:HG23	1:A:62:SER:H	6	0.25
(2,328)	1:A:59:ILE:HD11	1:A:62:SER:H	6	0.25
(2,328)	1:A:59:ILE:HD12	1:A:62:SER:H	6	0.25

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,328)	1:A:59:ILE:HD13	1:A:62:SER:H	6	0.25
(2,328)	1:A:60:PRO:HB2	1:A:62:SER:H	6	0.25
(2,328)	1:A:60:PRO:HB3	1:A:62:SER:H	6	0.25
(2,328)	1:A:61:VAL:HG11	1:A:62:SER:H	6	0.25
(2,328)	1:A:61:VAL:HG12	1:A:62:SER:H	6	0.25
(2,328)	1:A:61:VAL:HG13	1:A:62:SER:H	6	0.25
(2,328)	1:A:61:VAL:HG21	1:A:62:SER:H	6	0.25
(2,328)	1:A:61:VAL:HG21	1:A:62:SER:H	6	0.25
(2,328)	1:A:61:VAL:HG22	1:A:62:SER:H	6	0.25
(2,328)	1:A:61:VAL:HG22	1:A:62:SER:H	6	0.25
(2,328)	1:A:61:VAL:HG23	1:A:62:SER:H	6	0.25
(2,328)	1:A:61:VAL:HG23	1:A:62:SER:H	6	0.25
(2,327)	1:A:64:ARG:HG2	1:A:71:CYS:H	12	0.25
(2,327)	1:A:64:ARG:HG3	1:A:71:CYS:H	12	0.25
(2,327)	1:A:68:GLU:HG2	1:A:71:CYS:H	12	0.25
(2,327)	1:A:68:GLU:HG3	1:A:71:CYS:H	12	0.25
(2,323)	1:A:64:ARG:HG2	1:A:68:GLU:H	1	0.25
(2,323)	1:A:64:ARG:HG3	1:A:68:GLU:H	1	0.25
(2,323)	1:A:68:GLU:HG3	1:A:68:GLU:H	1	0.25
(2,323)	1:A:64:ARG:HG2	1:A:68:GLU:H	11	0.25
(2,323)	1:A:64:ARG:HG3	1:A:68:GLU:H	11	0.25
(2,323)	1:A:68:GLU:HG3	1:A:68:GLU:H	11	0.25
(2,300)	1:A:44:CYS:HB2	1:A:48:GLU:H	14	0.25
(2,300)	1:A:44:CYS:HB3	1:A:48:GLU:H	14	0.25
(2,300)	1:A:48:GLU:HG2	1:A:48:GLU:H	14	0.25
(2,300)	1:A:48:GLU:HG3	1:A:48:GLU:H	14	0.25
(2,29)	1:A:28:CYS:HA	1:A:29:GLU:H	13	0.25
(2,29)	1:A:30:ASP:HA	1:A:29:GLU:H	13	0.25
(2,281)	1:A:10:CYS:HA	1:A:11:ASN:HD22	7	0.25
(2,281)	1:A:11:ASN:HA	1:A:11:ASN:HD22	7	0.25
(2,278)	1:A:41:MET:HA	1:A:42:ARG:H	1	0.25
(2,278)	1:A:42:ARG:HA	1:A:42:ARG:H	1	0.25
(2,278)	1:A:43:THR:HA	1:A:42:ARG:H	1	0.25
(2,278)	1:A:56:THR:HB	1:A:42:ARG:H	1	0.25
(2,278)	1:A:41:MET:HA	1:A:42:ARG:H	3	0.25
(2,278)	1:A:42:ARG:HA	1:A:42:ARG:H	3	0.25
(2,278)	1:A:43:THR:HA	1:A:42:ARG:H	3	0.25
(2,278)	1:A:56:THR:HB	1:A:42:ARG:H	3	0.25
(2,278)	1:A:41:MET:HA	1:A:42:ARG:H	5	0.25
(2,278)	1:A:42:ARG:HA	1:A:42:ARG:H	5	0.25
(2,278)	1:A:43:THR:HA	1:A:42:ARG:H	5	0.25
(2,278)	1:A:56:THR:HB	1:A:42:ARG:H	5	0.25

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,278)	1:A:41:MET:HA	1:A:42:ARG:H	11	0.25
(2,278)	1:A:42:ARG:HA	1:A:42:ARG:H	11	0.25
(2,278)	1:A:43:THR:HA	1:A:42:ARG:H	11	0.25
(2,278)	1:A:56:THR:HB	1:A:42:ARG:H	11	0.25
(2,278)	1:A:41:MET:HA	1:A:42:ARG:H	12	0.25
(2,278)	1:A:42:ARG:HA	1:A:42:ARG:H	12	0.25
(2,278)	1:A:43:THR:HA	1:A:42:ARG:H	12	0.25
(2,278)	1:A:56:THR:HB	1:A:42:ARG:H	12	0.25
(2,278)	1:A:41:MET:HA	1:A:42:ARG:H	13	0.25
(2,278)	1:A:42:ARG:HA	1:A:42:ARG:H	13	0.25
(2,278)	1:A:43:THR:HA	1:A:42:ARG:H	13	0.25
(2,278)	1:A:56:THR:HB	1:A:42:ARG:H	13	0.25
(2,278)	1:A:41:MET:HA	1:A:42:ARG:H	20	0.25
(2,278)	1:A:42:ARG:HA	1:A:42:ARG:H	20	0.25
(2,278)	1:A:43:THR:HA	1:A:42:ARG:H	20	0.25
(2,278)	1:A:56:THR:HB	1:A:42:ARG:H	20	0.25
(2,262)	1:A:51:CYS:HB2	1:A:74:GLY:H	11	0.25
(2,262)	1:A:51:CYS:HB3	1:A:74:GLY:H	11	0.25
(2,262)	1:A:71:CYS:HB2	1:A:74:GLY:H	11	0.25
(2,262)	1:A:71:CYS:HB3	1:A:74:GLY:H	11	0.25
(2,262)	1:A:51:CYS:HB2	1:A:74:GLY:H	14	0.25
(2,262)	1:A:51:CYS:HB3	1:A:74:GLY:H	14	0.25
(2,262)	1:A:71:CYS:HB2	1:A:74:GLY:H	14	0.25
(2,262)	1:A:71:CYS:HB3	1:A:74:GLY:H	14	0.25
(2,24)	1:A:11:ASN:HB2	1:A:11:ASN:H	4	0.25
(2,24)	1:A:11:ASN:HB3	1:A:11:ASN:H	4	0.25
(2,24)	1:A:12:ASN:HB2	1:A:11:ASN:H	4	0.25
(2,227)	1:A:19:ARG:HG2	1:A:21:LYS:H	12	0.25
(2,227)	1:A:19:ARG:HG2	1:A:21:LYS:H	12	0.25
(2,227)	1:A:19:ARG:HG3	1:A:21:LYS:H	12	0.25
(2,227)	1:A:19:ARG:HG3	1:A:21:LYS:H	12	0.25
(2,227)	1:A:21:LYS:HB2	1:A:21:LYS:H	12	0.25
(2,227)	1:A:21:LYS:HB3	1:A:21:LYS:H	12	0.25
(2,227)	1:A:21:LYS:HD2	1:A:21:LYS:H	12	0.25
(2,227)	1:A:21:LYS:HD3	1:A:21:LYS:H	12	0.25
(2,227)	1:A:19:ARG:HG2	1:A:21:LYS:H	15	0.25
(2,227)	1:A:19:ARG:HG2	1:A:21:LYS:H	15	0.25
(2,227)	1:A:19:ARG:HG3	1:A:21:LYS:H	15	0.25
(2,227)	1:A:19:ARG:HG3	1:A:21:LYS:H	15	0.25
(2,227)	1:A:21:LYS:HB2	1:A:21:LYS:H	15	0.25
(2,227)	1:A:21:LYS:HB3	1:A:21:LYS:H	15	0.25
(2,227)	1:A:21:LYS:HD2	1:A:21:LYS:H	15	0.25

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,227)	1:A:21:LYS:HD3	1:A:21:LYS:H	15	0.25
(2,193)	1:A:98:ILE:HD11	1:A:109:ASP:H	8	0.25
(2,193)	1:A:98:ILE:HD12	1:A:109:ASP:H	8	0.25
(2,193)	1:A:98:ILE:HD13	1:A:109:ASP:H	8	0.25
(2,193)	1:A:117:LEU:HD11	1:A:109:ASP:H	8	0.25
(2,193)	1:A:117:LEU:HD12	1:A:109:ASP:H	8	0.25
(2,193)	1:A:117:LEU:HD13	1:A:109:ASP:H	8	0.25
(2,193)	1:A:117:LEU:HD21	1:A:109:ASP:H	8	0.25
(2,193)	1:A:117:LEU:HD22	1:A:109:ASP:H	8	0.25
(2,193)	1:A:117:LEU:HD23	1:A:109:ASP:H	8	0.25
(2,184)	1:A:16:VAL:HG11	1:A:15:CYS:H	19	0.25
(2,184)	1:A:16:VAL:HG11	1:A:15:CYS:H	19	0.25
(2,184)	1:A:16:VAL:HG11	1:A:15:CYS:H	19	0.25
(2,184)	1:A:16:VAL:HG12	1:A:15:CYS:H	19	0.25
(2,184)	1:A:16:VAL:HG12	1:A:15:CYS:H	19	0.25
(2,184)	1:A:16:VAL:HG12	1:A:15:CYS:H	19	0.25
(2,184)	1:A:16:VAL:HG12	1:A:15:CYS:H	19	0.25
(2,184)	1:A:16:VAL:HG13	1:A:15:CYS:H	19	0.25
(2,184)	1:A:16:VAL:HG13	1:A:15:CYS:H	19	0.25
(2,184)	1:A:16:VAL:HG13	1:A:15:CYS:H	19	0.25
(2,184)	1:A:16:VAL:HG21	1:A:15:CYS:H	19	0.25
(2,184)	1:A:16:VAL:HG21	1:A:15:CYS:H	19	0.25
(2,184)	1:A:16:VAL:HG21	1:A:15:CYS:H	19	0.25
(2,184)	1:A:16:VAL:HG22	1:A:15:CYS:H	19	0.25
(2,184)	1:A:16:VAL:HG22	1:A:15:CYS:H	19	0.25
(2,184)	1:A:16:VAL:HG22	1:A:15:CYS:H	19	0.25
(2,184)	1:A:16:VAL:HG22	1:A:15:CYS:H	19	0.25
(2,184)	1:A:16:VAL:HG23	1:A:15:CYS:H	19	0.25
(2,184)	1:A:16:VAL:HG23	1:A:15:CYS:H	19	0.25
(2,184)	1:A:16:VAL:HG23	1:A:15:CYS:H	19	0.25
(2,182)	1:A:34:GLU:HG2	1:A:22:CYS:H	10	0.25
(2,182)	1:A:34:GLU:HG3	1:A:22:CYS:H	10	0.25
(2,182)	1:A:41:MET:HB2	1:A:22:CYS:H	10	0.25
(2,182)	1:A:41:MET:HB3	1:A:22:CYS:H	10	0.25
(2,163)	1:A:71:CYS:HA	1:A:77:GLU:H	12	0.25
(2,163)	1:A:77:GLU:HA	1:A:77:GLU:H	12	0.25
(2,160)	1:A:43:THR:HG1	1:A:43:THR:H	12	0.25
(2,160)	1:A:43:THR:HG1	1:A:43:THR:H	12	0.25
(2,160)	1:A:43:THR:HG21	1:A:43:THR:H	12	0.25
(2,160)	1:A:43:THR:HG21	1:A:43:THR:H	12	0.25
(2,160)	1:A:43:THR:HG22	1:A:43:THR:H	12	0.25
(2,160)	1:A:43:THR:HG22	1:A:43:THR:H	12	0.25
(2,160)	1:A:43:THR:HG23	1:A:43:THR:H	12	0.25
(2,160)	1:A:43:THR:HG23	1:A:43:THR:H	12	0.25

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,160)	1:A:56:THR:HG1	1:A:43:THR:H	12	0.25
(2,160)	1:A:56:THR:HG21	1:A:43:THR:H	12	0.25
(2,160)	1:A:56:THR:HG22	1:A:43:THR:H	12	0.25
(2,160)	1:A:56:THR:HG23	1:A:43:THR:H	12	0.25
(2,156)	1:A:51:CYS:HB2	1:A:71:CYS:H	9	0.25
(2,156)	1:A:51:CYS:HB3	1:A:71:CYS:H	9	0.25
(2,156)	1:A:71:CYS:HB2	1:A:71:CYS:H	9	0.25
(2,156)	1:A:71:CYS:HB3	1:A:71:CYS:H	9	0.25
(2,135)	1:A:79:ASN:HB2	1:A:79:ASN:HD21	16	0.25
(2,135)	1:A:97:CYS:HB2	1:A:79:ASN:HD21	16	0.25
(2,124)	1:A:43:THR:HG1	1:A:57:GLN:H	9	0.25
(2,124)	1:A:43:THR:HG1	1:A:57:GLN:H	9	0.25
(2,124)	1:A:43:THR:HG21	1:A:57:GLN:H	9	0.25
(2,124)	1:A:43:THR:HG21	1:A:57:GLN:H	9	0.25
(2,124)	1:A:43:THR:HG22	1:A:57:GLN:H	9	0.25
(2,124)	1:A:43:THR:HG22	1:A:57:GLN:H	9	0.25
(2,124)	1:A:43:THR:HG23	1:A:57:GLN:H	9	0.25
(2,124)	1:A:43:THR:HG23	1:A:57:GLN:H	9	0.25
(2,124)	1:A:56:THR:HG1	1:A:57:GLN:H	9	0.25
(2,124)	1:A:56:THR:HG21	1:A:57:GLN:H	9	0.25
(2,124)	1:A:56:THR:HG21	1:A:57:GLN:H	9	0.25
(2,124)	1:A:56:THR:HG22	1:A:57:GLN:H	9	0.25
(2,124)	1:A:56:THR:HG22	1:A:57:GLN:H	9	0.25
(2,124)	1:A:56:THR:HG23	1:A:57:GLN:H	9	0.25
(2,124)	1:A:56:THR:HG23	1:A:57:GLN:H	9	0.25
(2,124)	1:A:43:THR:HG1	1:A:57:GLN:H	17	0.25
(2,124)	1:A:43:THR:HG1	1:A:57:GLN:H	17	0.25
(2,124)	1:A:43:THR:HG21	1:A:57:GLN:H	17	0.25
(2,124)	1:A:43:THR:HG21	1:A:57:GLN:H	17	0.25
(2,124)	1:A:43:THR:HG22	1:A:57:GLN:H	17	0.25
(2,124)	1:A:43:THR:HG22	1:A:57:GLN:H	17	0.25
(2,124)	1:A:43:THR:HG23	1:A:57:GLN:H	17	0.25
(2,124)	1:A:43:THR:HG23	1:A:57:GLN:H	17	0.25
(2,124)	1:A:56:THR:HG1	1:A:57:GLN:H	17	0.25
(2,124)	1:A:56:THR:HG21	1:A:57:GLN:H	17	0.25
(2,124)	1:A:56:THR:HG21	1:A:57:GLN:H	17	0.25
(2,124)	1:A:56:THR:HG22	1:A:57:GLN:H	17	0.25
(2,124)	1:A:56:THR:HG22	1:A:57:GLN:H	17	0.25
(2,124)	1:A:56:THR:HG23	1:A:57:GLN:H	17	0.25
(2,124)	1:A:56:THR:HG23	1:A:57:GLN:H	17	0.25
(2,112)	1:A:83:ILE:HG12	1:A:84:THR:H	12	0.25
(2,112)	1:A:83:ILE:HG13	1:A:84:THR:H	12	0.25

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,112)	1:A:84:THR:HG1	1:A:84:THR:H	12	0.25
(2,112)	1:A:84:THR:HG21	1:A:84:THR:H	12	0.25
(2,112)	1:A:84:THR:HG22	1:A:84:THR:H	12	0.25
(2,112)	1:A:84:THR:HG23	1:A:84:THR:H	12	0.25
(2,109)	1:A:89:GLU:HB2	1:A:100:ARG:H	1	0.25
(2,109)	1:A:89:GLU:HB3	1:A:100:ARG:H	1	0.25
(2,109)	1:A:100:ARG:HB2	1:A:100:ARG:H	1	0.25
(2,109)	1:A:100:ARG:HB3	1:A:100:ARG:H	1	0.25
(1,99)	1:A:98:ILE:HG12	1:A:99:SER:H	16	0.25
(1,99)	1:A:98:ILE:HG13	1:A:99:SER:H	16	0.25
(1,92)	1:A:7:ASP:HB2	1:A:8:PHE:H	7	0.25
(1,92)	1:A:7:ASP:HB3	1:A:8:PHE:H	7	0.25
(1,92)	1:A:7:ASP:HB2	1:A:8:PHE:H	12	0.25
(1,92)	1:A:7:ASP:HB3	1:A:8:PHE:H	12	0.25
(1,916)	1:A:77:GLU:HB2	1:A:77:GLU:H	13	0.25
(1,916)	1:A:77:GLU:HB3	1:A:77:GLU:H	13	0.25
(1,907)	1:A:39:CYS:H	1:A:41:MET:H	4	0.25
(1,904)	1:A:105:ASN:HB2	1:A:105:ASN:HD21	4	0.25
(1,904)	1:A:105:ASN:HB3	1:A:105:ASN:HD21	4	0.25
(1,900)	1:A:83:ILE:HG12	1:A:82:ASN:H	17	0.25
(1,900)	1:A:83:ILE:HG13	1:A:82:ASN:H	17	0.25
(1,891)	1:A:64:ARG:H	1:A:80:CYS:HB2	2	0.25
(1,891)	1:A:64:ARG:H	1:A:80:CYS:HB3	2	0.25
(1,886)	1:A:51:CYS:H	1:A:58:CYS:H	16	0.25
(1,886)	1:A:51:CYS:H	1:A:58:CYS:H	18	0.25
(1,869)	1:A:14:GLN:HE22	1:A:28:CYS:H	4	0.25
(1,869)	1:A:14:GLN:HE22	1:A:28:CYS:H	13	0.25
(1,863)	1:A:17:PRO:HD2	1:A:20:TRP:HE1	4	0.25
(1,863)	1:A:17:PRO:HD3	1:A:20:TRP:HE1	4	0.25
(1,863)	1:A:17:PRO:HD2	1:A:20:TRP:HE1	9	0.25
(1,863)	1:A:17:PRO:HD3	1:A:20:TRP:HE1	9	0.25
(1,863)	1:A:17:PRO:HD2	1:A:20:TRP:HE1	14	0.25
(1,863)	1:A:17:PRO:HD3	1:A:20:TRP:HE1	14	0.25
(1,860)	1:A:16:VAL:HB	1:A:19:ARG:H	4	0.25
(1,860)	1:A:16:VAL:HB	1:A:19:ARG:H	15	0.25
(1,85)	1:A:21:LYS:HG2	1:A:22:CYS:H	7	0.25
(1,85)	1:A:21:LYS:HG3	1:A:22:CYS:H	7	0.25
(1,847)	1:A:13:GLY:H	1:A:10:CYS:H	9	0.25
(1,844)	1:A:79:ASN:HB2	1:A:92:CYS:H	20	0.25
(1,844)	1:A:79:ASN:HB3	1:A:92:CYS:H	20	0.25
(1,842)	1:A:80:CYS:HA	1:A:84:THR:H	4	0.25
(1,842)	1:A:80:CYS:HA	1:A:84:THR:H	5	0.25

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,84)	1:A:14:GLN:HG2	1:A:29:GLU:H	12	0.25
(1,84)	1:A:14:GLN:HG3	1:A:29:GLU:H	12	0.25
(1,837)	1:A:50:SER:H	1:A:45:ARG:HD2	11	0.25
(1,837)	1:A:50:SER:H	1:A:45:ARG:HD3	11	0.25
(1,822)	1:A:113:GLY:HA2	1:A:116:GLU:H	9	0.25
(1,822)	1:A:113:GLY:HA3	1:A:116:GLU:H	9	0.25
(1,803)	1:A:101:ASN:HD21	1:A:99:SER:H	13	0.25
(1,801)	1:A:102:PHE:HB2	1:A:98:ILE:H	16	0.25
(1,801)	1:A:102:PHE:HB3	1:A:98:ILE:H	16	0.25
(1,800)	1:A:85:CYS:HB2	1:A:98:ILE:H	9	0.25
(1,800)	1:A:85:CYS:HB3	1:A:98:ILE:H	9	0.25
(1,794)	1:A:82:ASN:HD22	1:A:94:SER:H	6	0.25
(1,794)	1:A:82:ASN:HD22	1:A:94:SER:H	8	0.25
(1,794)	1:A:82:ASN:HD22	1:A:94:SER:H	14	0.25
(1,792)	1:A:97:CYS:HB2	1:A:91:THR:H	15	0.25
(1,792)	1:A:97:CYS:HB3	1:A:91:THR:H	15	0.25
(1,791)	1:A:85:CYS:HB2	1:A:89:GLU:H	13	0.25
(1,791)	1:A:85:CYS:HB3	1:A:89:GLU:H	13	0.25
(1,768)	1:A:58:CYS:HA	1:A:59:ILE:H	9	0.25
(1,761)	1:A:72:ASP:H	1:A:57:GLN:HE21	9	0.25
(1,759)	1:A:57:GLN:HE21	1:A:71:CYS:HA	19	0.25
(1,744)	1:A:48:GLU:H	1:A:47:HIS:H	18	0.25
(1,740)	1:A:35:SER:H	1:A:56:THR:HG1	20	0.25
(1,740)	1:A:35:SER:H	1:A:56:THR:HG21	20	0.25
(1,740)	1:A:35:SER:H	1:A:56:THR:HG22	20	0.25
(1,740)	1:A:35:SER:H	1:A:56:THR:HG23	20	0.25
(1,737)	1:A:33:ASP:HB2	1:A:34:GLU:H	5	0.25
(1,737)	1:A:33:ASP:HB3	1:A:34:GLU:H	5	0.25
(1,731)	1:A:28:CYS:HB2	1:A:32:SER:H	18	0.25
(1,731)	1:A:28:CYS:HB3	1:A:32:SER:H	18	0.25
(1,711)	1:A:10:CYS:HB2	1:A:11:ASN:H	4	0.25
(1,711)	1:A:10:CYS:HB3	1:A:11:ASN:H	4	0.25
(1,698)	1:A:64:ARG:H	1:A:64:ARG:HG2	11	0.25
(1,698)	1:A:64:ARG:H	1:A:64:ARG:HG3	11	0.25
(1,693)	1:A:21:LYS:HD2	1:A:21:LYS:H	9	0.25
(1,693)	1:A:21:LYS:HD3	1:A:21:LYS:H	9	0.25
(1,693)	1:A:21:LYS:HD2	1:A:21:LYS:H	18	0.25
(1,693)	1:A:21:LYS:HD3	1:A:21:LYS:H	18	0.25
(1,673)	1:A:17:PRO:HB2	1:A:20:TRP:HE1	4	0.25
(1,673)	1:A:17:PRO:HB3	1:A:20:TRP:HE1	4	0.25
(1,666)	1:A:105:ASN:HB2	1:A:105:ASN:HD21	4	0.25
(1,666)	1:A:105:ASN:HB3	1:A:105:ASN:HD21	4	0.25

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,623)	1:A:30:ASP:HB2	1:A:12:ASN:HD22	4	0.25
(1,623)	1:A:30:ASP:HB3	1:A:12:ASN:HD22	4	0.25
(1,6)	1:A:23:ASP:H	1:A:24:GLY:H	18	0.25
(1,6)	1:A:23:ASP:H	1:A:24:GLY:H	20	0.25
(1,591)	1:A:69:ASN:HB2	1:A:69:ASN:HD21	19	0.25
(1,591)	1:A:69:ASN:HB3	1:A:69:ASN:HD21	19	0.25
(1,585)	1:A:28:CYS:H	1:A:27:ASP:H	15	0.25
(1,569)	1:A:85:CYS:H	1:A:84:THR:H	7	0.25
(1,569)	1:A:85:CYS:H	1:A:84:THR:H	12	0.25
(1,569)	1:A:85:CYS:H	1:A:84:THR:H	19	0.25
(1,553)	1:A:115:ASP:HB2	1:A:104:CYS:H	10	0.25
(1,553)	1:A:115:ASP:HB3	1:A:104:CYS:H	10	0.25
(1,545)	1:A:103:VAL:HA	1:A:105:ASN:H	10	0.25
(1,545)	1:A:103:VAL:HA	1:A:105:ASN:H	12	0.25
(1,545)	1:A:103:VAL:HA	1:A:105:ASN:H	13	0.25
(1,545)	1:A:103:VAL:HA	1:A:105:ASN:H	19	0.25
(1,542)	1:A:112:ASP:H	1:A:114:SER:H	19	0.25
(1,504)	1:A:39:CYS:HB2	1:A:39:CYS:H	10	0.25
(1,504)	1:A:39:CYS:HB3	1:A:39:CYS:H	10	0.25
(1,504)	1:A:39:CYS:HB2	1:A:39:CYS:H	11	0.25
(1,504)	1:A:39:CYS:HB3	1:A:39:CYS:H	11	0.25
(1,504)	1:A:39:CYS:HB2	1:A:39:CYS:H	13	0.25
(1,504)	1:A:39:CYS:HB3	1:A:39:CYS:H	13	0.25
(1,501)	1:A:34:GLU:HB2	1:A:34:GLU:H	5	0.25
(1,501)	1:A:34:GLU:HB3	1:A:34:GLU:H	5	0.25
(1,501)	1:A:34:GLU:HB2	1:A:34:GLU:H	11	0.25
(1,501)	1:A:34:GLU:HB3	1:A:34:GLU:H	11	0.25
(1,499)	1:A:33:ASP:HB2	1:A:33:ASP:H	10	0.25
(1,499)	1:A:33:ASP:HB3	1:A:33:ASP:H	10	0.25
(1,483)	1:A:10:CYS:HB2	1:A:14:GLN:H	8	0.25
(1,483)	1:A:10:CYS:HB3	1:A:14:GLN:H	8	0.25
(1,483)	1:A:10:CYS:HB2	1:A:14:GLN:H	18	0.25
(1,483)	1:A:10:CYS:HB3	1:A:14:GLN:H	18	0.25
(1,480)	1:A:10:CYS:HB2	1:A:10:CYS:H	20	0.25
(1,480)	1:A:10:CYS:HB3	1:A:10:CYS:H	20	0.25
(1,470)	1:A:79:ASN:HB2	1:A:79:ASN:H	8	0.25
(1,470)	1:A:79:ASN:HB3	1:A:79:ASN:H	8	0.25
(1,444)	1:A:76:ASP:H	1:A:74:GLY:H	17	0.25
(1,443)	1:A:73:SER:H	1:A:71:CYS:HB2	11	0.25
(1,443)	1:A:73:SER:H	1:A:71:CYS:HB3	11	0.25
(1,399)	1:A:54:HIS:H	1:A:53:ALA:HB1	16	0.25
(1,399)	1:A:54:HIS:H	1:A:53:ALA:HB2	16	0.25

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,399)	1:A:54:HIS:H	1:A:53:ALA:HB3	16	0.25
(1,375)	1:A:48:GLU:HA	1:A:49:ILE:H	5	0.25
(1,365)	1:A:43:THR:HB	1:A:43:THR:H	4	0.25
(1,365)	1:A:43:THR:HB	1:A:43:THR:H	15	0.25
(1,351)	1:A:32:SER:H	1:A:33:ASP:H	9	0.25
(1,349)	1:A:32:SER:H	1:A:33:ASP:H	9	0.25
(1,335)	1:A:45:ARG:HD2	1:A:24:GLY:H	16	0.25
(1,335)	1:A:45:ARG:HD3	1:A:24:GLY:H	16	0.25
(1,328)	1:A:22:CYS:HB2	1:A:22:CYS:H	7	0.25
(1,328)	1:A:22:CYS:HB3	1:A:22:CYS:H	7	0.25
(1,328)	1:A:22:CYS:HB2	1:A:22:CYS:H	20	0.25
(1,328)	1:A:22:CYS:HB3	1:A:22:CYS:H	20	0.25
(1,323)	1:A:64:ARG:H	1:A:80:CYS:HB2	17	0.25
(1,323)	1:A:64:ARG:H	1:A:80:CYS:HB3	17	0.25
(1,320)	1:A:7:ASP:HA	1:A:18:SER:H	3	0.25
(1,319)	1:A:16:VAL:H	1:A:9:VAL:HA	14	0.25
(1,312)	1:A:14:GLN:HG2	1:A:14:GLN:H	11	0.25
(1,312)	1:A:14:GLN:HG3	1:A:14:GLN:H	11	0.25
(1,298)	1:A:14:GLN:H	1:A:11:ASN:H	19	0.25
(1,283)	1:A:8:PHE:H	1:A:7:ASP:H	5	0.25
(1,283)	1:A:8:PHE:H	1:A:7:ASP:H	13	0.25
(1,283)	1:A:8:PHE:H	1:A:7:ASP:H	17	0.25
(1,283)	1:A:8:PHE:H	1:A:7:ASP:H	20	0.25
(1,281)	1:A:5:GLU:HB2	1:A:6:SER:H	14	0.25
(1,281)	1:A:5:GLU:HB2	1:A:6:SER:H	14	0.25
(1,281)	1:A:5:GLU:HB3	1:A:6:SER:H	14	0.25
(1,281)	1:A:5:GLU:HB3	1:A:6:SER:H	14	0.25
(1,279)	1:A:6:SER:HB2	1:A:6:SER:H	7	0.25
(1,279)	1:A:6:SER:HB3	1:A:6:SER:H	7	0.25
(1,279)	1:A:6:SER:HB2	1:A:6:SER:H	10	0.25
(1,279)	1:A:6:SER:HB3	1:A:6:SER:H	10	0.25
(1,279)	1:A:6:SER:HB2	1:A:6:SER:H	20	0.25
(1,279)	1:A:6:SER:HB3	1:A:6:SER:H	20	0.25
(1,277)	1:A:6:SER:HB2	1:A:6:SER:H	7	0.25
(1,277)	1:A:6:SER:HB3	1:A:6:SER:H	7	0.25
(1,277)	1:A:6:SER:HB2	1:A:6:SER:H	10	0.25
(1,277)	1:A:6:SER:HB3	1:A:6:SER:H	10	0.25
(1,277)	1:A:6:SER:HB2	1:A:6:SER:H	20	0.25
(1,277)	1:A:6:SER:HB3	1:A:6:SER:H	20	0.25
(1,240)	1:A:90:PHE:H	1:A:98:ILE:HD11	5	0.25
(1,240)	1:A:90:PHE:H	1:A:98:ILE:HD12	5	0.25
(1,240)	1:A:90:PHE:H	1:A:98:ILE:HD13	5	0.25

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,24)	1:A:104:CYS:H	1:A:105:ASN:H	5	0.25
(1,24)	1:A:104:CYS:H	1:A:105:ASN:H	9	0.25
(1,24)	1:A:104:CYS:H	1:A:105:ASN:H	16	0.25
(1,23)	1:A:104:CYS:H	1:A:105:ASN:H	5	0.25
(1,23)	1:A:104:CYS:H	1:A:105:ASN:H	9	0.25
(1,23)	1:A:104:CYS:H	1:A:105:ASN:H	16	0.25
(1,224)	1:A:92:CYS:HA	1:A:94:SER:H	1	0.25
(1,15)	1:A:109:ASP:H	1:A:110:CYS:H	11	0.25
(1,15)	1:A:109:ASP:H	1:A:110:CYS:H	12	0.25
(1,136)	1:A:112:ASP:H	1:A:110:CYS:H	3	0.25
(1,134)	1:A:110:CYS:H	1:A:109:ASP:HB2	4	0.25
(1,134)	1:A:110:CYS:H	1:A:109:ASP:HB2	4	0.25
(1,134)	1:A:110:CYS:H	1:A:109:ASP:HB3	4	0.25
(1,134)	1:A:110:CYS:H	1:A:109:ASP:HB3	4	0.25
(1,128)	1:A:114:SER:HA	1:A:114:SER:H	9	0.25
(1,109)	1:A:119:CYS:H	1:A:117:LEU:HG	9	0.25
(4,7)	1:A:8:PHE:H	1:A:16:VAL:O	7	0.24
(4,2)	1:A:90:PHE:O	1:A:98:ILE:H	17	0.24
(3,7)	2:A:202:CA:CA	1:A:63:TRP:O	7	0.24
(2,98)	1:A:28:CYS:HB2	1:A:11:ASN:H	2	0.24
(2,98)	1:A:28:CYS:HB3	1:A:11:ASN:H	2	0.24
(2,98)	1:A:32:SER:HB2	1:A:11:ASN:H	2	0.24
(2,98)	1:A:32:SER:HB3	1:A:11:ASN:H	2	0.24
(2,80)	1:A:41:MET:HA	1:A:56:THR:H	1	0.24
(2,80)	1:A:42:ARG:HA	1:A:56:THR:H	1	0.24
(2,80)	1:A:56:THR:HB	1:A:56:THR:H	1	0.24
(2,56)	1:A:114:SER:HA	1:A:117:LEU:H	20	0.24
(2,52)	1:A:60:PRO:HD2	1:A:63:TRP:HE1	10	0.24
(2,52)	1:A:60:PRO:HD3	1:A:63:TRP:HE1	10	0.24
(2,52)	1:A:80:CYS:HB2	1:A:63:TRP:HE1	10	0.24
(2,52)	1:A:80:CYS:HB3	1:A:63:TRP:HE1	10	0.24
(2,388)	1:A:64:ARG:HD2	1:A:68:GLU:H	19	0.24
(2,388)	1:A:64:ARG:HD3	1:A:68:GLU:H	19	0.24
(2,388)	1:A:66:ASP:HB2	1:A:68:GLU:H	19	0.24
(2,388)	1:A:66:ASP:HB3	1:A:68:GLU:H	19	0.24
(2,381)	1:A:85:CYS:HB2	1:A:90:PHE:H	16	0.24
(2,381)	1:A:85:CYS:HB3	1:A:90:PHE:H	16	0.24
(2,381)	1:A:100:ARG:HD3	1:A:90:PHE:H	16	0.24
(2,359)	1:A:83:ILE:HD11	1:A:98:ILE:H	10	0.24
(2,359)	1:A:83:ILE:HD12	1:A:98:ILE:H	10	0.24
(2,359)	1:A:83:ILE:HD13	1:A:98:ILE:H	10	0.24
(2,359)	1:A:98:ILE:HD11	1:A:98:ILE:H	10	0.24

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,359)	1:A:98:ILE:HD12	1:A:98:ILE:H	10	0.24
(2,359)	1:A:98:ILE:HD13	1:A:98:ILE:H	10	0.24
(2,351)	1:A:12:ASN:HB2	1:A:12:ASN:H	4	0.24
(2,351)	1:A:12:ASN:HB3	1:A:12:ASN:H	4	0.24
(2,351)	1:A:13:GLY:HA2	1:A:12:ASN:H	4	0.24
(2,351)	1:A:13:GLY:HA3	1:A:12:ASN:H	4	0.24
(2,351)	1:A:12:ASN:HB2	1:A:12:ASN:H	14	0.24
(2,351)	1:A:12:ASN:HB3	1:A:12:ASN:H	14	0.24
(2,351)	1:A:13:GLY:HA2	1:A:12:ASN:H	14	0.24
(2,351)	1:A:13:GLY:HA3	1:A:12:ASN:H	14	0.24
(2,351)	1:A:12:ASN:HB2	1:A:12:ASN:H	17	0.24
(2,351)	1:A:12:ASN:HB3	1:A:12:ASN:H	17	0.24
(2,351)	1:A:13:GLY:HA2	1:A:12:ASN:H	17	0.24
(2,351)	1:A:13:GLY:HA3	1:A:12:ASN:H	17	0.24
(2,346)	1:A:63:TRP:HB2	1:A:77:GLU:H	6	0.24
(2,346)	1:A:63:TRP:HB3	1:A:77:GLU:H	6	0.24
(2,346)	1:A:75:GLU:HA	1:A:77:GLU:H	6	0.24
(2,342)	1:A:17:PRO:HB2	1:A:20:TRP:HE1	9	0.24
(2,342)	1:A:17:PRO:HB3	1:A:20:TRP:HE1	9	0.24
(2,342)	1:A:19:ARG:HB2	1:A:20:TRP:HE1	9	0.24
(2,342)	1:A:19:ARG:HB3	1:A:20:TRP:HE1	9	0.24
(2,341)	1:A:78:GLU:HG2	1:A:78:GLU:H	5	0.24
(2,341)	1:A:78:GLU:HG3	1:A:78:GLU:H	5	0.24
(2,341)	1:A:87:PRO:HB2	1:A:78:GLU:H	5	0.24
(2,341)	1:A:87:PRO:HB3	1:A:78:GLU:H	5	0.24
(2,323)	1:A:64:ARG:HG2	1:A:68:GLU:H	5	0.24
(2,323)	1:A:64:ARG:HG3	1:A:68:GLU:H	5	0.24
(2,323)	1:A:68:GLU:HG3	1:A:68:GLU:H	5	0.24
(2,300)	1:A:44:CYS:HB2	1:A:48:GLU:H	13	0.24
(2,300)	1:A:44:CYS:HB3	1:A:48:GLU:H	13	0.24
(2,300)	1:A:48:GLU:HG2	1:A:48:GLU:H	13	0.24
(2,300)	1:A:48:GLU:HG3	1:A:48:GLU:H	13	0.24
(2,293)	1:A:18:SER:HA	1:A:8:PHE:H	19	0.24
(2,293)	1:A:18:SER:HB2	1:A:8:PHE:H	19	0.24
(2,293)	1:A:18:SER:HB3	1:A:8:PHE:H	19	0.24
(2,292)	1:A:3:CYS:HB2	1:A:8:PHE:H	7	0.24
(2,292)	1:A:3:CYS:HB3	1:A:8:PHE:H	7	0.24
(2,292)	1:A:7:ASP:HB2	1:A:8:PHE:H	7	0.24
(2,292)	1:A:7:ASP:HB3	1:A:8:PHE:H	7	0.24
(2,292)	1:A:8:PHE:HB2	1:A:8:PHE:H	7	0.24
(2,292)	1:A:8:PHE:HB3	1:A:8:PHE:H	7	0.24
(2,292)	1:A:3:CYS:HB2	1:A:8:PHE:H	16	0.24

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,292)	1:A:3:CYS:HB3	1:A:8:PHE:H	16	0.24
(2,292)	1:A:7:ASP:HB2	1:A:8:PHE:H	16	0.24
(2,292)	1:A:7:ASP:HB3	1:A:8:PHE:H	16	0.24
(2,292)	1:A:8:PHE:HB2	1:A:8:PHE:H	16	0.24
(2,292)	1:A:8:PHE:HB3	1:A:8:PHE:H	16	0.24
(2,29)	1:A:28:CYS:HA	1:A:29:GLU:H	4	0.24
(2,29)	1:A:30:ASP:HA	1:A:29:GLU:H	4	0.24
(2,29)	1:A:28:CYS:HA	1:A:29:GLU:H	18	0.24
(2,29)	1:A:30:ASP:HA	1:A:29:GLU:H	18	0.24
(2,29)	1:A:28:CYS:HA	1:A:29:GLU:H	20	0.24
(2,29)	1:A:30:ASP:HA	1:A:29:GLU:H	20	0.24
(2,278)	1:A:41:MET:HA	1:A:42:ARG:H	8	0.24
(2,278)	1:A:42:ARG:HA	1:A:42:ARG:H	8	0.24
(2,278)	1:A:43:THR:HA	1:A:42:ARG:H	8	0.24
(2,278)	1:A:56:THR:HB	1:A:42:ARG:H	8	0.24
(2,278)	1:A:41:MET:HA	1:A:42:ARG:H	9	0.24
(2,278)	1:A:42:ARG:HA	1:A:42:ARG:H	9	0.24
(2,278)	1:A:43:THR:HA	1:A:42:ARG:H	9	0.24
(2,278)	1:A:56:THR:HB	1:A:42:ARG:H	9	0.24
(2,278)	1:A:41:MET:HA	1:A:42:ARG:H	14	0.24
(2,278)	1:A:42:ARG:HA	1:A:42:ARG:H	14	0.24
(2,278)	1:A:43:THR:HA	1:A:42:ARG:H	14	0.24
(2,278)	1:A:56:THR:HB	1:A:42:ARG:H	14	0.24
(2,277)	1:A:19:ARG:HG2	1:A:19:ARG:H	17	0.24
(2,277)	1:A:19:ARG:HG2	1:A:19:ARG:H	17	0.24
(2,277)	1:A:19:ARG:HG3	1:A:19:ARG:H	17	0.24
(2,277)	1:A:19:ARG:HG3	1:A:19:ARG:H	17	0.24
(2,277)	1:A:21:LYS:HD2	1:A:19:ARG:H	17	0.24
(2,276)	1:A:42:ARG:HA	1:A:57:GLN:H	3	0.24
(2,276)	1:A:43:THR:HA	1:A:57:GLN:H	3	0.24
(2,276)	1:A:56:THR:HB	1:A:57:GLN:H	3	0.24
(2,272)	1:A:19:ARG:HD2	1:A:19:ARG:H	4	0.24
(2,272)	1:A:19:ARG:HD3	1:A:19:ARG:H	4	0.24
(2,272)	1:A:20:TRP:HB2	1:A:19:ARG:H	4	0.24
(2,272)	1:A:20:TRP:HB3	1:A:19:ARG:H	4	0.24
(2,263)	1:A:62:SER:HB2	1:A:63:TRP:H	20	0.24
(2,263)	1:A:62:SER:HB3	1:A:63:TRP:H	20	0.24
(2,263)	1:A:63:TRP:HB2	1:A:63:TRP:H	20	0.24
(2,261)	1:A:110:CYS:HB2	1:A:110:CYS:H	9	0.24
(2,261)	1:A:110:CYS:HB3	1:A:110:CYS:H	9	0.24
(2,261)	1:A:111:SER:HB2	1:A:110:CYS:H	9	0.24
(2,261)	1:A:113:GLY:HA2	1:A:110:CYS:H	9	0.24

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,261)	1:A:113:GLY:HA3	1:A:110:CYS:H	9	0.24
(2,259)	1:A:69:ASN:HB2	1:A:69:ASN:HD21	17	0.24
(2,259)	1:A:69:ASN:HB3	1:A:69:ASN:HD21	17	0.24
(2,259)	1:A:70:ASP:HB2	1:A:69:ASN:HD21	17	0.24
(2,259)	1:A:70:ASP:HB3	1:A:69:ASN:HD21	17	0.24
(2,25)	1:A:79:ASN:HD22	1:A:80:CYS:HA	6	0.24
(2,25)	1:A:86:SER:HA	1:A:80:CYS:HA	6	0.24
(2,22)	1:A:75:GLU:HA	1:A:78:GLU:H	14	0.24
(2,22)	1:A:87:PRO:HD2	1:A:78:GLU:H	14	0.24
(2,177)	1:A:22:CYS:HB2	1:A:44:CYS:H	6	0.24
(2,177)	1:A:22:CYS:HB3	1:A:44:CYS:H	6	0.24
(2,177)	1:A:44:CYS:HB2	1:A:44:CYS:H	6	0.24
(2,177)	1:A:44:CYS:HB3	1:A:44:CYS:H	6	0.24
(2,177)	1:A:22:CYS:HB2	1:A:44:CYS:H	15	0.24
(2,177)	1:A:22:CYS:HB3	1:A:44:CYS:H	15	0.24
(2,177)	1:A:44:CYS:HB2	1:A:44:CYS:H	15	0.24
(2,177)	1:A:44:CYS:HB3	1:A:44:CYS:H	15	0.24
(2,168)	1:A:37:GLU:HG2	1:A:38:GLN:H	12	0.24
(2,168)	1:A:37:GLU:HG3	1:A:38:GLN:H	12	0.24
(2,168)	1:A:38:GLN:HG2	1:A:38:GLN:H	12	0.24
(2,168)	1:A:38:GLN:HG3	1:A:38:GLN:H	12	0.24
(2,168)	1:A:39:CYS:HB2	1:A:38:GLN:H	12	0.24
(2,168)	1:A:39:CYS:HB3	1:A:38:GLN:H	12	0.24
(2,164)	1:A:14:GLN:HB2	1:A:14:GLN:H	6	0.24
(2,164)	1:A:14:GLN:HB3	1:A:14:GLN:H	6	0.24
(2,164)	1:A:14:GLN:HB2	1:A:14:GLN:H	10	0.24
(2,164)	1:A:14:GLN:HB3	1:A:14:GLN:H	10	0.24
(2,163)	1:A:71:CYS:HA	1:A:77:GLU:H	15	0.24
(2,163)	1:A:77:GLU:HA	1:A:77:GLU:H	15	0.24
(2,156)	1:A:51:CYS:HB2	1:A:71:CYS:H	16	0.24
(2,156)	1:A:51:CYS:HB3	1:A:71:CYS:H	16	0.24
(2,156)	1:A:71:CYS:HB2	1:A:71:CYS:H	16	0.24
(2,156)	1:A:71:CYS:HB3	1:A:71:CYS:H	16	0.24
(2,149)	1:A:49:ILE:HG21	1:A:59:ILE:H	14	0.24
(2,149)	1:A:49:ILE:HG22	1:A:59:ILE:H	14	0.24
(2,149)	1:A:49:ILE:HG23	1:A:59:ILE:H	14	0.24
(2,149)	1:A:59:ILE:HD11	1:A:59:ILE:H	14	0.24
(2,149)	1:A:59:ILE:HD12	1:A:59:ILE:H	14	0.24
(2,149)	1:A:59:ILE:HD13	1:A:59:ILE:H	14	0.24
(2,149)	1:A:59:ILE:HG21	1:A:59:ILE:H	14	0.24
(2,149)	1:A:59:ILE:HG22	1:A:59:ILE:H	14	0.24
(2,149)	1:A:59:ILE:HG23	1:A:59:ILE:H	14	0.24

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,109)	1:A:89:GLU:HB2	1:A:100:ARG:H	2	0.24
(2,109)	1:A:89:GLU:HB3	1:A:100:ARG:H	2	0.24
(2,109)	1:A:100:ARG:HB2	1:A:100:ARG:H	2	0.24
(2,109)	1:A:100:ARG:HB3	1:A:100:ARG:H	2	0.24
(2,109)	1:A:89:GLU:HB2	1:A:100:ARG:H	4	0.24
(2,109)	1:A:89:GLU:HB3	1:A:100:ARG:H	4	0.24
(2,109)	1:A:100:ARG:HB2	1:A:100:ARG:H	4	0.24
(2,109)	1:A:100:ARG:HB3	1:A:100:ARG:H	4	0.24
(2,109)	1:A:89:GLU:HB2	1:A:100:ARG:H	8	0.24
(2,109)	1:A:89:GLU:HB3	1:A:100:ARG:H	8	0.24
(2,109)	1:A:100:ARG:HB2	1:A:100:ARG:H	8	0.24
(2,109)	1:A:100:ARG:HB3	1:A:100:ARG:H	8	0.24
(2,109)	1:A:89:GLU:HB2	1:A:100:ARG:H	13	0.24
(2,109)	1:A:89:GLU:HB3	1:A:100:ARG:H	13	0.24
(2,109)	1:A:100:ARG:HB2	1:A:100:ARG:H	13	0.24
(2,109)	1:A:100:ARG:HB3	1:A:100:ARG:H	13	0.24
(2,101)	1:A:37:GLU:HB2	1:A:38:GLN:HE21	20	0.24
(2,101)	1:A:37:GLU:HB3	1:A:38:GLN:HE21	20	0.24
(2,101)	1:A:38:GLN:HB2	1:A:38:GLN:HE21	20	0.24
(2,101)	1:A:38:GLN:HB3	1:A:38:GLN:HE21	20	0.24
(1,96)	1:A:100:ARG:H	1:A:89:GLU:HA	9	0.24
(1,96)	1:A:100:ARG:H	1:A:89:GLU:HA	18	0.24
(1,94)	1:A:120:ALA:H	1:A:119:CYS:HB2	9	0.24
(1,94)	1:A:120:ALA:H	1:A:119:CYS:HB3	9	0.24
(1,92)	1:A:7:ASP:HB2	1:A:8:PHE:H	16	0.24
(1,92)	1:A:7:ASP:HB3	1:A:8:PHE:H	16	0.24
(1,915)	1:A:51:CYS:HA	1:A:71:CYS:H	6	0.24
(1,909)	1:A:43:THR:HG1	1:A:46:ILE:H	20	0.24
(1,909)	1:A:43:THR:HG21	1:A:46:ILE:H	20	0.24
(1,909)	1:A:43:THR:HG22	1:A:46:ILE:H	20	0.24
(1,909)	1:A:43:THR:HG23	1:A:46:ILE:H	20	0.24
(1,900)	1:A:83:ILE:HG12	1:A:82:ASN:H	13	0.24
(1,900)	1:A:83:ILE:HG13	1:A:82:ASN:H	13	0.24
(1,9)	1:A:12:ASN:H	1:A:11:ASN:H	19	0.24
(1,896)	1:A:64:ARG:H	1:A:66:ASP:H	8	0.24
(1,888)	1:A:49:ILE:HA	1:A:61:VAL:H	2	0.24
(1,886)	1:A:51:CYS:H	1:A:58:CYS:H	12	0.24
(1,886)	1:A:51:CYS:H	1:A:58:CYS:H	13	0.24
(1,886)	1:A:51:CYS:H	1:A:58:CYS:H	19	0.24
(1,884)	1:A:50:SER:H	1:A:59:ILE:H	20	0.24
(1,872)	1:A:32:SER:H	1:A:33:ASP:HB2	9	0.24
(1,872)	1:A:32:SER:H	1:A:33:ASP:HB3	9	0.24

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,869)	1:A:14:GLN:HE22	1:A:28:CYS:H	17	0.24
(1,863)	1:A:17:PRO:HD2	1:A:20:TRP:HE1	10	0.24
(1,863)	1:A:17:PRO:HD3	1:A:20:TRP:HE1	10	0.24
(1,862)	1:A:21:LYS:HE2	1:A:19:ARG:H	16	0.24
(1,862)	1:A:21:LYS:HE3	1:A:19:ARG:H	16	0.24
(1,860)	1:A:16:VAL:HB	1:A:19:ARG:H	7	0.24
(1,859)	1:A:3:CYS:HB2	1:A:18:SER:H	8	0.24
(1,859)	1:A:3:CYS:HB3	1:A:18:SER:H	8	0.24
(1,85)	1:A:21:LYS:HG2	1:A:22:CYS:H	17	0.24
(1,85)	1:A:21:LYS:HG3	1:A:22:CYS:H	17	0.24
(1,85)	1:A:21:LYS:HG2	1:A:22:CYS:H	19	0.24
(1,85)	1:A:21:LYS:HG3	1:A:22:CYS:H	19	0.24
(1,849)	1:A:33:ASP:H	1:A:11:ASN:H	11	0.24
(1,842)	1:A:80:CYS:HA	1:A:84:THR:H	9	0.24
(1,838)	1:A:58:CYS:HA	1:A:52:GLY:H	18	0.24
(1,809)	1:A:106:GLY:H	1:A:104:CYS:H	7	0.24
(1,803)	1:A:101:ASN:HD21	1:A:99:SER:H	11	0.24
(1,803)	1:A:101:ASN:HD21	1:A:99:SER:H	15	0.24
(1,801)	1:A:102:PHE:HB2	1:A:98:ILE:H	14	0.24
(1,801)	1:A:102:PHE:HB3	1:A:98:ILE:H	14	0.24
(1,796)	1:A:96:ARG:H	1:A:83:ILE:HG21	3	0.24
(1,796)	1:A:96:ARG:H	1:A:83:ILE:HG22	3	0.24
(1,796)	1:A:96:ARG:H	1:A:83:ILE:HG23	3	0.24
(1,794)	1:A:82:ASN:HD22	1:A:94:SER:H	2	0.24
(1,791)	1:A:85:CYS:HB2	1:A:89:GLU:H	15	0.24
(1,791)	1:A:85:CYS:HB3	1:A:89:GLU:H	15	0.24
(1,783)	1:A:71:CYS:HB2	1:A:74:GLY:H	6	0.24
(1,783)	1:A:71:CYS:HB3	1:A:74:GLY:H	6	0.24
(1,768)	1:A:58:CYS:HA	1:A:59:ILE:H	1	0.24
(1,768)	1:A:58:CYS:HA	1:A:59:ILE:H	17	0.24
(1,766)	1:A:48:GLU:HB2	1:A:58:CYS:H	9	0.24
(1,766)	1:A:48:GLU:HB3	1:A:58:CYS:H	9	0.24
(1,761)	1:A:72:ASP:H	1:A:57:GLN:HE21	1	0.24
(1,761)	1:A:72:ASP:H	1:A:57:GLN:HE21	16	0.24
(1,740)	1:A:35:SER:H	1:A:56:THR:HG1	14	0.24
(1,740)	1:A:35:SER:H	1:A:56:THR:HG21	14	0.24
(1,740)	1:A:35:SER:H	1:A:56:THR:HG22	14	0.24
(1,740)	1:A:35:SER:H	1:A:56:THR:HG23	14	0.24
(1,734)	1:A:32:SER:H	1:A:11:ASN:H	5	0.24
(1,733)	1:A:32:SER:H	1:A:28:CYS:H	12	0.24
(1,731)	1:A:28:CYS:HB2	1:A:32:SER:H	15	0.24
(1,731)	1:A:28:CYS:HB3	1:A:32:SER:H	15	0.24

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,729)	1:A:32:SER:H	1:A:28:CYS:H	12	0.24
(1,726)	1:A:34:GLU:HG2	1:A:27:ASP:H	14	0.24
(1,726)	1:A:34:GLU:HG3	1:A:27:ASP:H	14	0.24
(1,724)	1:A:34:GLU:HB2	1:A:25:ASP:H	3	0.24
(1,724)	1:A:34:GLU:HB3	1:A:25:ASP:H	3	0.24
(1,724)	1:A:34:GLU:HB2	1:A:25:ASP:H	8	0.24
(1,724)	1:A:34:GLU:HB3	1:A:25:ASP:H	8	0.24
(1,718)	1:A:16:VAL:HB	1:A:20:TRP:HE1	7	0.24
(1,712)	1:A:32:SER:H	1:A:11:ASN:H	5	0.24
(1,711)	1:A:10:CYS:HB2	1:A:11:ASN:H	12	0.24
(1,711)	1:A:10:CYS:HB3	1:A:11:ASN:H	12	0.24
(1,690)	1:A:61:VAL:HG11	1:A:49:ILE:H	13	0.24
(1,690)	1:A:61:VAL:HG12	1:A:49:ILE:H	13	0.24
(1,690)	1:A:61:VAL:HG13	1:A:49:ILE:H	13	0.24
(1,690)	1:A:61:VAL:HG21	1:A:49:ILE:H	13	0.24
(1,690)	1:A:61:VAL:HG22	1:A:49:ILE:H	13	0.24
(1,690)	1:A:61:VAL:HG23	1:A:49:ILE:H	13	0.24
(1,681)	1:A:79:ASN:HD21	1:A:87:PRO:HD2	20	0.24
(1,681)	1:A:79:ASN:HD21	1:A:87:PRO:HD3	20	0.24
(1,667)	1:A:107:GLN:HG2	1:A:105:ASN:HD22	4	0.24
(1,667)	1:A:107:GLN:HG2	1:A:105:ASN:HD22	4	0.24
(1,667)	1:A:107:GLN:HG3	1:A:105:ASN:HD22	4	0.24
(1,667)	1:A:107:GLN:HG3	1:A:105:ASN:HD22	4	0.24
(1,658)	1:A:102:PHE:HA	1:A:105:ASN:HD22	3	0.24
(1,658)	1:A:102:PHE:HA	1:A:105:ASN:HD22	5	0.24
(1,639)	1:A:82:ASN:H	1:A:82:ASN:HD21	15	0.24
(1,596)	1:A:74:GLY:HA2	1:A:69:ASN:HD21	3	0.24
(1,596)	1:A:74:GLY:HA3	1:A:69:ASN:HD21	3	0.24
(1,592)	1:A:74:GLY:HA2	1:A:69:ASN:HD21	1	0.24
(1,592)	1:A:74:GLY:HA3	1:A:69:ASN:HD21	1	0.24
(1,592)	1:A:74:GLY:HA2	1:A:69:ASN:HD21	5	0.24
(1,592)	1:A:74:GLY:HA3	1:A:69:ASN:HD21	5	0.24
(1,591)	1:A:69:ASN:HB2	1:A:69:ASN:HD21	17	0.24
(1,591)	1:A:69:ASN:HB3	1:A:69:ASN:HD21	17	0.24
(1,585)	1:A:28:CYS:H	1:A:27:ASP:H	4	0.24
(1,585)	1:A:28:CYS:H	1:A:27:ASP:H	7	0.24
(1,569)	1:A:85:CYS:H	1:A:84:THR:H	20	0.24
(1,560)	1:A:90:PHE:H	1:A:99:SER:H	12	0.24
(1,560)	1:A:90:PHE:H	1:A:99:SER:H	15	0.24
(1,549)	1:A:115:ASP:HA	1:A:104:CYS:H	1	0.24
(1,545)	1:A:103:VAL:HA	1:A:105:ASN:H	11	0.24
(1,54)	1:A:73:SER:H	1:A:74:GLY:H	10	0.24

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,518)	1:A:49:ILE:H	1:A:61:VAL:H	20	0.24
(1,516)	1:A:49:ILE:H	1:A:59:ILE:H	6	0.24
(1,516)	1:A:49:ILE:H	1:A:59:ILE:H	18	0.24
(1,510)	1:A:48:GLU:HB2	1:A:48:GLU:H	9	0.24
(1,510)	1:A:48:GLU:HB3	1:A:48:GLU:H	9	0.24
(1,51)	1:A:78:GLU:H	1:A:77:GLU:H	13	0.24
(1,504)	1:A:39:CYS:HB2	1:A:39:CYS:H	5	0.24
(1,504)	1:A:39:CYS:HB3	1:A:39:CYS:H	5	0.24
(1,504)	1:A:39:CYS:HB2	1:A:39:CYS:H	9	0.24
(1,504)	1:A:39:CYS:HB3	1:A:39:CYS:H	9	0.24
(1,504)	1:A:39:CYS:HB2	1:A:39:CYS:H	16	0.24
(1,504)	1:A:39:CYS:HB3	1:A:39:CYS:H	16	0.24
(1,504)	1:A:39:CYS:HB2	1:A:39:CYS:H	17	0.24
(1,504)	1:A:39:CYS:HB3	1:A:39:CYS:H	17	0.24
(1,504)	1:A:39:CYS:HB2	1:A:39:CYS:H	20	0.24
(1,504)	1:A:39:CYS:HB3	1:A:39:CYS:H	20	0.24
(1,501)	1:A:34:GLU:HB2	1:A:34:GLU:H	4	0.24
(1,501)	1:A:34:GLU:HB3	1:A:34:GLU:H	4	0.24
(1,499)	1:A:33:ASP:HB2	1:A:33:ASP:H	12	0.24
(1,499)	1:A:33:ASP:HB3	1:A:33:ASP:H	12	0.24
(1,49)	1:A:94:SER:H	1:A:93:SER:H	12	0.24
(1,476)	1:A:7:ASP:H	1:A:3:CYS:HB2	9	0.24
(1,476)	1:A:7:ASP:H	1:A:3:CYS:HB3	9	0.24
(1,454)	1:A:78:GLU:HG2	1:A:76:ASP:H	16	0.24
(1,454)	1:A:78:GLU:HG3	1:A:76:ASP:H	16	0.24
(1,443)	1:A:73:SER:H	1:A:71:CYS:HB2	9	0.24
(1,443)	1:A:73:SER:H	1:A:71:CYS:HB3	9	0.24
(1,443)	1:A:73:SER:H	1:A:71:CYS:HB2	19	0.24
(1,443)	1:A:73:SER:H	1:A:71:CYS:HB3	19	0.24
(1,437)	1:A:72:ASP:H	1:A:71:CYS:H	15	0.24
(1,418)	1:A:64:ARG:HA	1:A:66:ASP:H	16	0.24
(1,418)	1:A:64:ARG:HA	1:A:66:ASP:H	20	0.24
(1,399)	1:A:54:HIS:H	1:A:53:ALA:HB1	20	0.24
(1,399)	1:A:54:HIS:H	1:A:53:ALA:HB2	20	0.24
(1,399)	1:A:54:HIS:H	1:A:53:ALA:HB3	20	0.24
(1,375)	1:A:48:GLU:HA	1:A:49:ILE:H	2	0.24
(1,375)	1:A:48:GLU:HA	1:A:49:ILE:H	3	0.24
(1,375)	1:A:48:GLU:HA	1:A:49:ILE:H	7	0.24
(1,372)	1:A:48:GLU:H	1:A:48:GLU:HA	2	0.24
(1,347)	1:A:31:GLY:H	1:A:28:CYS:H	20	0.24
(1,339)	1:A:25:ASP:H	1:A:20:TRP:HB2	3	0.24
(1,339)	1:A:25:ASP:H	1:A:20:TRP:HB3	3	0.24

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,339)	1:A:25:ASP:H	1:A:20:TRP:HB2	6	0.24
(1,339)	1:A:25:ASP:H	1:A:20:TRP:HB3	6	0.24
(1,339)	1:A:25:ASP:H	1:A:20:TRP:HB2	18	0.24
(1,339)	1:A:25:ASP:H	1:A:20:TRP:HB3	18	0.24
(1,328)	1:A:22:CYS:HB2	1:A:22:CYS:H	11	0.24
(1,328)	1:A:22:CYS:HB3	1:A:22:CYS:H	11	0.24
(1,328)	1:A:22:CYS:HB2	1:A:22:CYS:H	12	0.24
(1,328)	1:A:22:CYS:HB3	1:A:22:CYS:H	12	0.24
(1,323)	1:A:64:ARG:H	1:A:80:CYS:HB2	14	0.24
(1,323)	1:A:64:ARG:H	1:A:80:CYS:HB3	14	0.24
(1,319)	1:A:16:VAL:H	1:A:9:VAL:HA	4	0.24
(1,312)	1:A:14:GLN:HG2	1:A:14:GLN:H	13	0.24
(1,312)	1:A:14:GLN:HG3	1:A:14:GLN:H	13	0.24
(1,298)	1:A:14:GLN:H	1:A:11:ASN:H	1	0.24
(1,283)	1:A:8:PHE:H	1:A:7:ASP:H	1	0.24
(1,279)	1:A:6:SER:HB2	1:A:6:SER:H	16	0.24
(1,279)	1:A:6:SER:HB3	1:A:6:SER:H	16	0.24
(1,277)	1:A:6:SER:HB2	1:A:6:SER:H	16	0.24
(1,277)	1:A:6:SER:HB3	1:A:6:SER:H	16	0.24
(1,248)	1:A:83:ILE:HB	1:A:84:THR:H	18	0.24
(1,228)	1:A:92:CYS:HB2	1:A:93:SER:H	7	0.24
(1,228)	1:A:92:CYS:HB3	1:A:93:SER:H	7	0.24
(1,205)	1:A:98:ILE:HG12	1:A:98:ILE:H	5	0.24
(1,205)	1:A:98:ILE:HG13	1:A:98:ILE:H	5	0.24
(1,205)	1:A:98:ILE:HG12	1:A:98:ILE:H	18	0.24
(1,205)	1:A:98:ILE:HG13	1:A:98:ILE:H	18	0.24
(1,204)	1:A:98:ILE:HG12	1:A:98:ILE:H	2	0.24
(1,204)	1:A:98:ILE:HG13	1:A:98:ILE:H	2	0.24
(1,204)	1:A:98:ILE:HG12	1:A:98:ILE:H	3	0.24
(1,204)	1:A:98:ILE:HG13	1:A:98:ILE:H	3	0.24
(1,203)	1:A:89:GLU:HB2	1:A:98:ILE:H	5	0.24
(1,203)	1:A:89:GLU:HB3	1:A:98:ILE:H	5	0.24
(1,203)	1:A:89:GLU:HB2	1:A:98:ILE:H	13	0.24
(1,203)	1:A:89:GLU:HB3	1:A:98:ILE:H	13	0.24
(1,17)	1:A:81:GLY:H	1:A:80:CYS:H	16	0.24
(1,165)	1:A:104:CYS:H	1:A:116:GLU:HA	19	0.24
(1,15)	1:A:109:ASP:H	1:A:110:CYS:H	18	0.24
(1,15)	1:A:109:ASP:H	1:A:110:CYS:H	20	0.24
(1,139)	1:A:109:ASP:H	1:A:109:ASP:HB2	5	0.24
(1,139)	1:A:109:ASP:H	1:A:109:ASP:HB3	5	0.24
(1,134)	1:A:110:CYS:H	1:A:109:ASP:HB2	7	0.24
(1,134)	1:A:110:CYS:H	1:A:109:ASP:HB2	7	0.24

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,134)	1:A:110:CYS:H	1:A:109:ASP:HB3	7	0.24
(1,134)	1:A:110:CYS:H	1:A:109:ASP:HB3	7	0.24
(1,123)	1:A:115:ASP:HB2	1:A:115:ASP:H	5	0.24
(1,123)	1:A:115:ASP:HB3	1:A:115:ASP:H	5	0.24
(1,109)	1:A:119:CYS:H	1:A:117:LEU:HG	17	0.24
(4,6)	1:A:51:CYS:H	1:A:57:GLN:O	15	0.23
(3,7)	2:A:202:CA:CA	1:A:63:TRP:O	1	0.23
(2,98)	1:A:28:CYS:HB2	1:A:11:ASN:H	17	0.23
(2,98)	1:A:28:CYS:HB3	1:A:11:ASN:H	17	0.23
(2,98)	1:A:32:SER:HB2	1:A:11:ASN:H	17	0.23
(2,98)	1:A:32:SER:HB3	1:A:11:ASN:H	17	0.23
(2,97)	1:A:20:TRP:HB2	1:A:20:TRP:H	13	0.23
(2,97)	1:A:20:TRP:HB3	1:A:20:TRP:H	13	0.23
(2,97)	1:A:21:LYS:HA	1:A:20:TRP:H	13	0.23
(2,72)	1:A:110:CYS:HB2	1:A:113:GLY:H	7	0.23
(2,72)	1:A:110:CYS:HB3	1:A:113:GLY:H	7	0.23
(2,72)	1:A:112:ASP:HB2	1:A:113:GLY:H	7	0.23
(2,72)	1:A:112:ASP:HB3	1:A:113:GLY:H	7	0.23
(2,64)	1:A:45:ARG:HB2	1:A:46:ILE:H	10	0.23
(2,64)	1:A:45:ARG:HB3	1:A:46:ILE:H	10	0.23
(2,64)	1:A:46:ILE:HG12	1:A:46:ILE:H	10	0.23
(2,64)	1:A:46:ILE:HG13	1:A:46:ILE:H	10	0.23
(2,39)	1:A:98:ILE:HD11	1:A:115:ASP:H	19	0.23
(2,39)	1:A:98:ILE:HD12	1:A:115:ASP:H	19	0.23
(2,39)	1:A:98:ILE:HD13	1:A:115:ASP:H	19	0.23
(2,39)	1:A:117:LEU:HD11	1:A:115:ASP:H	19	0.23
(2,39)	1:A:117:LEU:HD12	1:A:115:ASP:H	19	0.23
(2,39)	1:A:117:LEU:HD13	1:A:115:ASP:H	19	0.23
(2,39)	1:A:117:LEU:HD21	1:A:115:ASP:H	19	0.23
(2,39)	1:A:117:LEU:HD22	1:A:115:ASP:H	19	0.23
(2,39)	1:A:117:LEU:HD23	1:A:115:ASP:H	19	0.23
(2,382)	1:A:72:ASP:HB2	1:A:73:SER:H	6	0.23
(2,382)	1:A:72:ASP:HB3	1:A:73:SER:H	6	0.23
(2,359)	1:A:83:ILE:HD11	1:A:98:ILE:H	16	0.23
(2,359)	1:A:83:ILE:HD12	1:A:98:ILE:H	16	0.23
(2,359)	1:A:83:ILE:HD13	1:A:98:ILE:H	16	0.23
(2,359)	1:A:98:ILE:HD11	1:A:98:ILE:H	16	0.23
(2,359)	1:A:98:ILE:HD12	1:A:98:ILE:H	16	0.23
(2,359)	1:A:98:ILE:HD13	1:A:98:ILE:H	16	0.23
(2,351)	1:A:12:ASN:HB2	1:A:12:ASN:H	2	0.23
(2,351)	1:A:12:ASN:HB3	1:A:12:ASN:H	2	0.23
(2,351)	1:A:13:GLY:HA2	1:A:12:ASN:H	2	0.23

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,351)	1:A:13:GLY:HA3	1:A:12:ASN:H	2	0.23
(2,351)	1:A:12:ASN:HB2	1:A:12:ASN:H	10	0.23
(2,351)	1:A:12:ASN:HB3	1:A:12:ASN:H	10	0.23
(2,351)	1:A:13:GLY:HA2	1:A:12:ASN:H	10	0.23
(2,351)	1:A:13:GLY:HA3	1:A:12:ASN:H	10	0.23
(2,349)	1:A:99:SER:HB2	1:A:101:ASN:H	2	0.23
(2,349)	1:A:99:SER:HB3	1:A:101:ASN:H	2	0.23
(2,349)	1:A:102:PHE:HB2	1:A:101:ASN:H	2	0.23
(2,349)	1:A:102:PHE:HB3	1:A:101:ASN:H	2	0.23
(2,345)	1:A:84:THR:HG1	1:A:85:CYS:H	16	0.23
(2,345)	1:A:84:THR:HG21	1:A:85:CYS:H	16	0.23
(2,345)	1:A:84:THR:HG22	1:A:85:CYS:H	16	0.23
(2,345)	1:A:84:THR:HG23	1:A:85:CYS:H	16	0.23
(2,345)	1:A:91:THR:HG21	1:A:85:CYS:H	16	0.23
(2,345)	1:A:91:THR:HG22	1:A:85:CYS:H	16	0.23
(2,345)	1:A:91:THR:HG23	1:A:85:CYS:H	16	0.23
(2,345)	1:A:84:THR:HG1	1:A:85:CYS:H	18	0.23
(2,345)	1:A:84:THR:HG21	1:A:85:CYS:H	18	0.23
(2,345)	1:A:84:THR:HG22	1:A:85:CYS:H	18	0.23
(2,345)	1:A:84:THR:HG23	1:A:85:CYS:H	18	0.23
(2,345)	1:A:91:THR:HG21	1:A:85:CYS:H	18	0.23
(2,345)	1:A:91:THR:HG22	1:A:85:CYS:H	18	0.23
(2,345)	1:A:91:THR:HG23	1:A:85:CYS:H	18	0.23
(2,342)	1:A:17:PRO:HB2	1:A:20:TRP:HE1	17	0.23
(2,342)	1:A:17:PRO:HB3	1:A:20:TRP:HE1	17	0.23
(2,342)	1:A:19:ARG:HB2	1:A:20:TRP:HE1	17	0.23
(2,342)	1:A:19:ARG:HB3	1:A:20:TRP:HE1	17	0.23
(2,34)	1:A:3:CYS:HB2	1:A:16:VAL:H	4	0.23
(2,34)	1:A:3:CYS:HB3	1:A:16:VAL:H	4	0.23
(2,34)	1:A:15:CYS:HB2	1:A:16:VAL:H	4	0.23
(2,34)	1:A:15:CYS:HB3	1:A:16:VAL:H	4	0.23
(2,323)	1:A:64:ARG:HG2	1:A:68:GLU:H	6	0.23
(2,323)	1:A:64:ARG:HG3	1:A:68:GLU:H	6	0.23
(2,323)	1:A:68:GLU:HG3	1:A:68:GLU:H	6	0.23
(2,306)	1:A:71:CYS:HB2	1:A:77:GLU:H	4	0.23
(2,306)	1:A:71:CYS:HB3	1:A:77:GLU:H	4	0.23
(2,306)	1:A:80:CYS:HB2	1:A:77:GLU:H	4	0.23
(2,306)	1:A:80:CYS:HB3	1:A:77:GLU:H	4	0.23
(2,306)	1:A:71:CYS:HB2	1:A:77:GLU:H	18	0.23
(2,306)	1:A:71:CYS:HB3	1:A:77:GLU:H	18	0.23
(2,306)	1:A:80:CYS:HB2	1:A:77:GLU:H	18	0.23
(2,306)	1:A:80:CYS:HB3	1:A:77:GLU:H	18	0.23

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,303)	1:A:75:GLU:HB2	1:A:77:GLU:H	11	0.23
(2,303)	1:A:75:GLU:HB3	1:A:77:GLU:H	11	0.23
(2,303)	1:A:77:GLU:HG2	1:A:77:GLU:H	11	0.23
(2,303)	1:A:77:GLU:HG3	1:A:77:GLU:H	11	0.23
(2,303)	1:A:78:GLU:HB2	1:A:77:GLU:H	11	0.23
(2,303)	1:A:78:GLU:HB3	1:A:77:GLU:H	11	0.23
(2,303)	1:A:87:PRO:HG2	1:A:77:GLU:H	11	0.23
(2,303)	1:A:87:PRO:HG3	1:A:77:GLU:H	11	0.23
(2,296)	1:A:113:GLY:HA2	1:A:117:LEU:H	7	0.23
(2,296)	1:A:113:GLY:HA3	1:A:117:LEU:H	7	0.23
(2,296)	1:A:114:SER:HB2	1:A:117:LEU:H	7	0.23
(2,296)	1:A:114:SER:HB3	1:A:117:LEU:H	7	0.23
(2,292)	1:A:3:CYS:HB2	1:A:8:PHE:H	17	0.23
(2,292)	1:A:3:CYS:HB3	1:A:8:PHE:H	17	0.23
(2,292)	1:A:7:ASP:HB2	1:A:8:PHE:H	17	0.23
(2,292)	1:A:7:ASP:HB3	1:A:8:PHE:H	17	0.23
(2,292)	1:A:8:PHE:HB2	1:A:8:PHE:H	17	0.23
(2,292)	1:A:8:PHE:HB3	1:A:8:PHE:H	17	0.23
(2,279)	1:A:10:CYS:HA	1:A:11:ASN:H	4	0.23
(2,279)	1:A:11:ASN:HA	1:A:11:ASN:H	4	0.23
(2,277)	1:A:19:ARG:HG2	1:A:19:ARG:H	6	0.23
(2,277)	1:A:19:ARG:HG2	1:A:19:ARG:H	6	0.23
(2,277)	1:A:19:ARG:HG3	1:A:19:ARG:H	6	0.23
(2,277)	1:A:19:ARG:HG3	1:A:19:ARG:H	6	0.23
(2,277)	1:A:21:LYS:HD2	1:A:19:ARG:H	6	0.23
(2,263)	1:A:62:SER:HB2	1:A:63:TRP:H	4	0.23
(2,263)	1:A:62:SER:HB3	1:A:63:TRP:H	4	0.23
(2,263)	1:A:63:TRP:HB2	1:A:63:TRP:H	4	0.23
(2,263)	1:A:62:SER:HB2	1:A:63:TRP:H	9	0.23
(2,263)	1:A:62:SER:HB3	1:A:63:TRP:H	9	0.23
(2,263)	1:A:63:TRP:HB2	1:A:63:TRP:H	9	0.23
(2,262)	1:A:51:CYS:HB2	1:A:74:GLY:H	2	0.23
(2,262)	1:A:51:CYS:HB3	1:A:74:GLY:H	2	0.23
(2,262)	1:A:71:CYS:HB2	1:A:74:GLY:H	2	0.23
(2,262)	1:A:71:CYS:HB3	1:A:74:GLY:H	2	0.23
(2,262)	1:A:51:CYS:HB2	1:A:74:GLY:H	15	0.23
(2,262)	1:A:51:CYS:HB3	1:A:74:GLY:H	15	0.23
(2,262)	1:A:71:CYS:HB2	1:A:74:GLY:H	15	0.23
(2,262)	1:A:71:CYS:HB3	1:A:74:GLY:H	15	0.23
(2,262)	1:A:51:CYS:HB2	1:A:74:GLY:H	19	0.23
(2,262)	1:A:51:CYS:HB3	1:A:74:GLY:H	19	0.23
(2,262)	1:A:71:CYS:HB2	1:A:74:GLY:H	19	0.23

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,262)	1:A:71:CYS:HB3	1:A:74:GLY:H	19	0.23
(2,259)	1:A:69:ASN:HB2	1:A:69:ASN:HD21	2	0.23
(2,259)	1:A:69:ASN:HB3	1:A:69:ASN:HD21	2	0.23
(2,259)	1:A:70:ASP:HB2	1:A:69:ASN:HD21	2	0.23
(2,259)	1:A:70:ASP:HB3	1:A:69:ASN:HD21	2	0.23
(2,246)	1:A:90:PHE:HB2	1:A:100:ARG:H	15	0.23
(2,246)	1:A:90:PHE:HB3	1:A:100:ARG:H	15	0.23
(2,244)	1:A:45:ARG:HA	1:A:47:HIS:H	3	0.23
(2,244)	1:A:60:PRO:HA	1:A:47:HIS:H	3	0.23
(2,177)	1:A:22:CYS:HB2	1:A:44:CYS:H	4	0.23
(2,177)	1:A:22:CYS:HB3	1:A:44:CYS:H	4	0.23
(2,177)	1:A:44:CYS:HB2	1:A:44:CYS:H	4	0.23
(2,177)	1:A:44:CYS:HB3	1:A:44:CYS:H	4	0.23
(2,177)	1:A:22:CYS:HB2	1:A:44:CYS:H	14	0.23
(2,177)	1:A:22:CYS:HB3	1:A:44:CYS:H	14	0.23
(2,177)	1:A:44:CYS:HB2	1:A:44:CYS:H	14	0.23
(2,177)	1:A:44:CYS:HB3	1:A:44:CYS:H	14	0.23
(2,163)	1:A:71:CYS:HA	1:A:77:GLU:H	2	0.23
(2,163)	1:A:77:GLU:HA	1:A:77:GLU:H	2	0.23
(2,163)	1:A:71:CYS:HA	1:A:77:GLU:H	3	0.23
(2,163)	1:A:77:GLU:HA	1:A:77:GLU:H	3	0.23
(2,163)	1:A:71:CYS:HA	1:A:77:GLU:H	5	0.23
(2,163)	1:A:77:GLU:HA	1:A:77:GLU:H	5	0.23
(2,163)	1:A:71:CYS:HA	1:A:77:GLU:H	9	0.23
(2,163)	1:A:77:GLU:HA	1:A:77:GLU:H	9	0.23
(2,163)	1:A:71:CYS:HA	1:A:77:GLU:H	11	0.23
(2,163)	1:A:77:GLU:HA	1:A:77:GLU:H	11	0.23
(2,163)	1:A:71:CYS:HA	1:A:77:GLU:H	19	0.23
(2,163)	1:A:77:GLU:HA	1:A:77:GLU:H	19	0.23
(2,163)	1:A:71:CYS:HA	1:A:77:GLU:H	20	0.23
(2,163)	1:A:77:GLU:HA	1:A:77:GLU:H	20	0.23
(2,160)	1:A:43:THR:HG1	1:A:43:THR:H	2	0.23
(2,160)	1:A:43:THR:HG1	1:A:43:THR:H	2	0.23
(2,160)	1:A:43:THR:HG21	1:A:43:THR:H	2	0.23
(2,160)	1:A:43:THR:HG21	1:A:43:THR:H	2	0.23
(2,160)	1:A:43:THR:HG22	1:A:43:THR:H	2	0.23
(2,160)	1:A:43:THR:HG22	1:A:43:THR:H	2	0.23
(2,160)	1:A:43:THR:HG23	1:A:43:THR:H	2	0.23
(2,160)	1:A:43:THR:HG23	1:A:43:THR:H	2	0.23
(2,160)	1:A:56:THR:HG1	1:A:43:THR:H	2	0.23
(2,160)	1:A:56:THR:HG21	1:A:43:THR:H	2	0.23
(2,160)	1:A:56:THR:HG22	1:A:43:THR:H	2	0.23

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,160)	1:A:56:THR:HG23	1:A:43:THR:H	2	0.23
(2,160)	1:A:43:THR:HG1	1:A:43:THR:H	6	0.23
(2,160)	1:A:43:THR:HG1	1:A:43:THR:H	6	0.23
(2,160)	1:A:43:THR:HG21	1:A:43:THR:H	6	0.23
(2,160)	1:A:43:THR:HG21	1:A:43:THR:H	6	0.23
(2,160)	1:A:43:THR:HG22	1:A:43:THR:H	6	0.23
(2,160)	1:A:43:THR:HG22	1:A:43:THR:H	6	0.23
(2,160)	1:A:43:THR:HG23	1:A:43:THR:H	6	0.23
(2,160)	1:A:43:THR:HG23	1:A:43:THR:H	6	0.23
(2,160)	1:A:56:THR:HG1	1:A:43:THR:H	6	0.23
(2,160)	1:A:56:THR:HG21	1:A:43:THR:H	6	0.23
(2,160)	1:A:56:THR:HG22	1:A:43:THR:H	6	0.23
(2,160)	1:A:56:THR:HG23	1:A:43:THR:H	6	0.23
(2,156)	1:A:51:CYS:HB2	1:A:71:CYS:H	13	0.23
(2,156)	1:A:51:CYS:HB3	1:A:71:CYS:H	13	0.23
(2,156)	1:A:71:CYS:HB2	1:A:71:CYS:H	13	0.23
(2,156)	1:A:71:CYS:HB3	1:A:71:CYS:H	13	0.23
(2,137)	1:A:116:GLU:HB2	1:A:117:LEU:H	5	0.23
(2,137)	1:A:116:GLU:HB3	1:A:117:LEU:H	5	0.23
(2,137)	1:A:117:LEU:HB2	1:A:117:LEU:H	5	0.23
(2,137)	1:A:117:LEU:HB3	1:A:117:LEU:H	5	0.23
(2,124)	1:A:43:THR:HG1	1:A:57:GLN:H	1	0.23
(2,124)	1:A:43:THR:HG1	1:A:57:GLN:H	1	0.23
(2,124)	1:A:43:THR:HG21	1:A:57:GLN:H	1	0.23
(2,124)	1:A:43:THR:HG21	1:A:57:GLN:H	1	0.23
(2,124)	1:A:43:THR:HG22	1:A:57:GLN:H	1	0.23
(2,124)	1:A:43:THR:HG22	1:A:57:GLN:H	1	0.23
(2,124)	1:A:43:THR:HG23	1:A:57:GLN:H	1	0.23
(2,124)	1:A:43:THR:HG23	1:A:57:GLN:H	1	0.23
(2,124)	1:A:56:THR:HG1	1:A:57:GLN:H	1	0.23
(2,124)	1:A:56:THR:HG21	1:A:57:GLN:H	1	0.23
(2,124)	1:A:56:THR:HG21	1:A:57:GLN:H	1	0.23
(2,124)	1:A:56:THR:HG22	1:A:57:GLN:H	1	0.23
(2,124)	1:A:56:THR:HG22	1:A:57:GLN:H	1	0.23
(2,124)	1:A:56:THR:HG23	1:A:57:GLN:H	1	0.23
(2,124)	1:A:56:THR:HG23	1:A:57:GLN:H	1	0.23
(2,116)	1:A:37:GLU:HB2	1:A:38:GLN:HE22	14	0.23
(2,116)	1:A:37:GLU:HB3	1:A:38:GLN:HE22	14	0.23
(2,116)	1:A:37:GLU:HB3	1:A:38:GLN:HE22	14	0.23
(2,116)	1:A:38:GLN:HB2	1:A:38:GLN:HE22	14	0.23
(2,116)	1:A:38:GLN:HB2	1:A:38:GLN:HE22	14	0.23
(2,116)	1:A:38:GLN:HB3	1:A:38:GLN:HE22	14	0.23

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,109)	1:A:89:GLU:HB2	1:A:100:ARG:H	11	0.23
(2,109)	1:A:89:GLU:HB3	1:A:100:ARG:H	11	0.23
(2,109)	1:A:100:ARG:HB2	1:A:100:ARG:H	11	0.23
(2,109)	1:A:100:ARG:HB3	1:A:100:ARG:H	11	0.23
(1,98)	1:A:98:ILE:HG12	1:A:99:SER:H	20	0.23
(1,98)	1:A:98:ILE:HG13	1:A:99:SER:H	20	0.23
(1,94)	1:A:120:ALA:H	1:A:119:CYS:HB2	6	0.23
(1,94)	1:A:120:ALA:H	1:A:119:CYS:HB3	6	0.23
(1,925)	1:A:8:PHE:HB3	1:A:16:VAL:HG21	12	0.23
(1,925)	1:A:8:PHE:HB3	1:A:16:VAL:HG22	12	0.23
(1,925)	1:A:8:PHE:HB3	1:A:16:VAL:HG23	12	0.23
(1,924)	1:A:8:PHE:HB2	1:A:16:VAL:HG11	2	0.23
(1,924)	1:A:8:PHE:HB2	1:A:16:VAL:HG12	2	0.23
(1,924)	1:A:8:PHE:HB2	1:A:16:VAL:HG13	2	0.23
(1,924)	1:A:8:PHE:HB2	1:A:16:VAL:HG21	2	0.23
(1,924)	1:A:8:PHE:HB2	1:A:16:VAL:HG22	2	0.23
(1,924)	1:A:8:PHE:HB2	1:A:16:VAL:HG23	2	0.23
(1,916)	1:A:77:GLU:HB2	1:A:77:GLU:H	2	0.23
(1,916)	1:A:77:GLU:HB3	1:A:77:GLU:H	2	0.23
(1,900)	1:A:83:ILE:HG12	1:A:82:ASN:H	4	0.23
(1,900)	1:A:83:ILE:HG13	1:A:82:ASN:H	4	0.23
(1,891)	1:A:64:ARG:H	1:A:80:CYS:HB2	6	0.23
(1,891)	1:A:64:ARG:H	1:A:80:CYS:HB3	6	0.23
(1,886)	1:A:51:CYS:H	1:A:58:CYS:H	9	0.23
(1,886)	1:A:51:CYS:H	1:A:58:CYS:H	11	0.23
(1,881)	1:A:48:GLU:H	1:A:45:ARG:H	20	0.23
(1,879)	1:A:48:GLU:H	1:A:45:ARG:H	20	0.23
(1,869)	1:A:14:GLN:HE22	1:A:28:CYS:H	20	0.23
(1,863)	1:A:17:PRO:HD2	1:A:20:TRP:HE1	20	0.23
(1,863)	1:A:17:PRO:HD3	1:A:20:TRP:HE1	20	0.23
(1,860)	1:A:16:VAL:HB	1:A:19:ARG:H	3	0.23
(1,860)	1:A:16:VAL:HB	1:A:19:ARG:H	13	0.23
(1,859)	1:A:3:CYS:HB2	1:A:18:SER:H	15	0.23
(1,859)	1:A:3:CYS:HB3	1:A:18:SER:H	15	0.23
(1,859)	1:A:3:CYS:HB2	1:A:18:SER:H	16	0.23
(1,859)	1:A:3:CYS:HB3	1:A:18:SER:H	16	0.23
(1,844)	1:A:79:ASN:HB2	1:A:92:CYS:H	11	0.23
(1,844)	1:A:79:ASN:HB3	1:A:92:CYS:H	11	0.23
(1,840)	1:A:71:CYS:HB2	1:A:77:GLU:H	10	0.23
(1,840)	1:A:71:CYS:HB3	1:A:77:GLU:H	10	0.23
(1,826)	1:A:114:SER:H	1:A:117:LEU:H	16	0.23
(1,810)	1:A:101:ASN:HD21	1:A:105:ASN:HD22	5	0.23

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,810)	1:A:101:ASN:HD21	1:A:105:ASN:HD22	8	0.23
(1,810)	1:A:101:ASN:HD21	1:A:105:ASN:HD22	10	0.23
(1,809)	1:A:106:GLY:H	1:A:104:CYS:H	4	0.23
(1,806)	1:A:101:ASN:HD21	1:A:102:PHE:H	6	0.23
(1,806)	1:A:101:ASN:HD21	1:A:102:PHE:H	7	0.23
(1,799)	1:A:85:CYS:HA	1:A:97:CYS:H	7	0.23
(1,796)	1:A:96:ARG:H	1:A:83:ILE:HG21	9	0.23
(1,796)	1:A:96:ARG:H	1:A:83:ILE:HG22	9	0.23
(1,796)	1:A:96:ARG:H	1:A:83:ILE:HG23	9	0.23
(1,794)	1:A:82:ASN:HD22	1:A:94:SER:H	7	0.23
(1,794)	1:A:82:ASN:HD22	1:A:94:SER:H	9	0.23
(1,792)	1:A:97:CYS:HB2	1:A:91:THR:H	14	0.23
(1,792)	1:A:97:CYS:HB3	1:A:91:THR:H	14	0.23
(1,789)	1:A:85:CYS:H	1:A:84:THR:HB	18	0.23
(1,768)	1:A:58:CYS:HA	1:A:59:ILE:H	5	0.23
(1,768)	1:A:58:CYS:HA	1:A:59:ILE:H	6	0.23
(1,768)	1:A:58:CYS:HA	1:A:59:ILE:H	7	0.23
(1,768)	1:A:58:CYS:HA	1:A:59:ILE:H	19	0.23
(1,766)	1:A:48:GLU:HB2	1:A:58:CYS:H	5	0.23
(1,766)	1:A:48:GLU:HB3	1:A:58:CYS:H	5	0.23
(1,761)	1:A:72:ASP:H	1:A:57:GLN:HE21	7	0.23
(1,761)	1:A:72:ASP:H	1:A:57:GLN:HE21	11	0.23
(1,745)	1:A:48:GLU:HB2	1:A:49:ILE:H	9	0.23
(1,745)	1:A:48:GLU:HB3	1:A:49:ILE:H	9	0.23
(1,745)	1:A:48:GLU:HB2	1:A:49:ILE:H	15	0.23
(1,745)	1:A:48:GLU:HB3	1:A:49:ILE:H	15	0.23
(1,744)	1:A:48:GLU:H	1:A:47:HIS:H	12	0.23
(1,734)	1:A:32:SER:H	1:A:11:ASN:H	1	0.23
(1,724)	1:A:34:GLU:HB2	1:A:25:ASP:H	2	0.23
(1,724)	1:A:34:GLU:HB3	1:A:25:ASP:H	2	0.23
(1,722)	1:A:23:ASP:H	1:A:45:ARG:HB2	5	0.23
(1,722)	1:A:23:ASP:H	1:A:45:ARG:HB3	5	0.23
(1,712)	1:A:32:SER:H	1:A:11:ASN:H	1	0.23
(1,710)	1:A:8:PHE:H	1:A:21:LYS:HD2	12	0.23
(1,710)	1:A:8:PHE:H	1:A:21:LYS:HD3	12	0.23
(1,698)	1:A:64:ARG:H	1:A:64:ARG:HG2	2	0.23
(1,698)	1:A:64:ARG:H	1:A:64:ARG:HG3	2	0.23
(1,698)	1:A:64:ARG:H	1:A:64:ARG:HG2	3	0.23
(1,698)	1:A:64:ARG:H	1:A:64:ARG:HG3	3	0.23
(1,693)	1:A:21:LYS:HD2	1:A:21:LYS:H	11	0.23
(1,693)	1:A:21:LYS:HD3	1:A:21:LYS:H	11	0.23
(1,693)	1:A:21:LYS:HD2	1:A:21:LYS:H	15	0.23

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,693)	1:A:21:LYS:HD3	1:A:21:LYS:H	15	0.23
(1,693)	1:A:21:LYS:HD2	1:A:21:LYS:H	20	0.23
(1,693)	1:A:21:LYS:HD3	1:A:21:LYS:H	20	0.23
(1,685)	1:A:107:GLN:HG2	1:A:107:GLN:HE21	9	0.23
(1,685)	1:A:107:GLN:HG2	1:A:107:GLN:HE21	9	0.23
(1,685)	1:A:107:GLN:HG3	1:A:107:GLN:HE21	9	0.23
(1,685)	1:A:107:GLN:HG3	1:A:107:GLN:HE21	9	0.23
(1,66)	1:A:23:ASP:H	1:A:24:GLY:H	17	0.23
(1,60)	1:A:56:THR:H	1:A:57:GLN:H	3	0.23
(1,6)	1:A:23:ASP:H	1:A:24:GLY:H	19	0.23
(1,591)	1:A:69:ASN:HB2	1:A:69:ASN:HD21	2	0.23
(1,591)	1:A:69:ASN:HB3	1:A:69:ASN:HD21	2	0.23
(1,585)	1:A:28:CYS:H	1:A:27:ASP:H	2	0.23
(1,569)	1:A:85:CYS:H	1:A:84:THR:H	5	0.23
(1,562)	1:A:102:PHE:HB2	1:A:99:SER:H	16	0.23
(1,562)	1:A:102:PHE:HB3	1:A:99:SER:H	16	0.23
(1,553)	1:A:115:ASP:HB2	1:A:104:CYS:H	6	0.23
(1,553)	1:A:115:ASP:HB3	1:A:104:CYS:H	6	0.23
(1,551)	1:A:104:CYS:HB2	1:A:104:CYS:H	11	0.23
(1,551)	1:A:104:CYS:HB3	1:A:104:CYS:H	11	0.23
(1,550)	1:A:104:CYS:HB2	1:A:104:CYS:H	11	0.23
(1,550)	1:A:104:CYS:HB3	1:A:104:CYS:H	11	0.23
(1,55)	1:A:71:CYS:H	1:A:70:ASP:H	5	0.23
(1,545)	1:A:103:VAL:HA	1:A:105:ASN:H	9	0.23
(1,543)	1:A:112:ASP:HB2	1:A:114:SER:H	14	0.23
(1,543)	1:A:112:ASP:HB3	1:A:114:SER:H	14	0.23
(1,510)	1:A:48:GLU:HB2	1:A:48:GLU:H	20	0.23
(1,510)	1:A:48:GLU:HB3	1:A:48:GLU:H	20	0.23
(1,504)	1:A:39:CYS:HB2	1:A:39:CYS:H	1	0.23
(1,504)	1:A:39:CYS:HB3	1:A:39:CYS:H	1	0.23
(1,504)	1:A:39:CYS:HB2	1:A:39:CYS:H	3	0.23
(1,504)	1:A:39:CYS:HB3	1:A:39:CYS:H	3	0.23
(1,504)	1:A:39:CYS:HB2	1:A:39:CYS:H	6	0.23
(1,504)	1:A:39:CYS:HB3	1:A:39:CYS:H	6	0.23
(1,504)	1:A:39:CYS:HB2	1:A:39:CYS:H	7	0.23
(1,504)	1:A:39:CYS:HB3	1:A:39:CYS:H	7	0.23
(1,501)	1:A:34:GLU:HB2	1:A:34:GLU:H	16	0.23
(1,501)	1:A:34:GLU:HB3	1:A:34:GLU:H	16	0.23
(1,49)	1:A:94:SER:H	1:A:93:SER:H	15	0.23
(1,486)	1:A:7:ASP:HA	1:A:19:ARG:H	13	0.23
(1,486)	1:A:7:ASP:HA	1:A:19:ARG:H	15	0.23
(1,476)	1:A:7:ASP:H	1:A:3:CYS:HB2	11	0.23

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,476)	1:A:7:ASP:H	1:A:3:CYS:HB3	11	0.23
(1,433)	1:A:74:GLY:HA2	1:A:71:CYS:H	10	0.23
(1,433)	1:A:74:GLY:HA3	1:A:71:CYS:H	10	0.23
(1,418)	1:A:64:ARG:HA	1:A:66:ASP:H	10	0.23
(1,418)	1:A:64:ARG:HA	1:A:66:ASP:H	11	0.23
(1,415)	1:A:64:ARG:HA	1:A:65:CYS:H	4	0.23
(1,415)	1:A:64:ARG:HA	1:A:65:CYS:H	14	0.23
(1,415)	1:A:64:ARG:HA	1:A:65:CYS:H	16	0.23
(1,415)	1:A:64:ARG:HA	1:A:65:CYS:H	20	0.23
(1,414)	1:A:63:TRP:H	1:A:63:TRP:HB2	9	0.23
(1,414)	1:A:63:TRP:H	1:A:63:TRP:HB3	9	0.23
(1,399)	1:A:54:HIS:H	1:A:53:ALA:HB1	9	0.23
(1,399)	1:A:54:HIS:H	1:A:53:ALA:HB2	9	0.23
(1,399)	1:A:54:HIS:H	1:A:53:ALA:HB3	9	0.23
(1,399)	1:A:54:HIS:H	1:A:53:ALA:HB1	19	0.23
(1,399)	1:A:54:HIS:H	1:A:53:ALA:HB2	19	0.23
(1,399)	1:A:54:HIS:H	1:A:53:ALA:HB3	19	0.23
(1,379)	1:A:50:SER:H	1:A:50:SER:HA	15	0.23
(1,379)	1:A:50:SER:H	1:A:50:SER:HA	18	0.23
(1,375)	1:A:48:GLU:HA	1:A:49:ILE:H	13	0.23
(1,365)	1:A:43:THR:HB	1:A:43:THR:H	11	0.23
(1,347)	1:A:31:GLY:H	1:A:28:CYS:H	13	0.23
(1,343)	1:A:28:CYS:HB2	1:A:28:CYS:H	17	0.23
(1,343)	1:A:28:CYS:HB3	1:A:28:CYS:H	17	0.23
(1,341)	1:A:31:GLY:H	1:A:28:CYS:H	19	0.23
(1,335)	1:A:45:ARG:HD2	1:A:24:GLY:H	14	0.23
(1,335)	1:A:45:ARG:HD3	1:A:24:GLY:H	14	0.23
(1,328)	1:A:22:CYS:HB2	1:A:22:CYS:H	4	0.23
(1,328)	1:A:22:CYS:HB3	1:A:22:CYS:H	4	0.23
(1,328)	1:A:22:CYS:HB2	1:A:22:CYS:H	16	0.23
(1,328)	1:A:22:CYS:HB3	1:A:22:CYS:H	16	0.23
(1,290)	1:A:8:PHE:HA	1:A:9:VAL:H	10	0.23
(1,283)	1:A:8:PHE:H	1:A:7:ASP:H	3	0.23
(1,28)	1:A:118:ASP:H	1:A:117:LEU:H	9	0.23
(1,248)	1:A:83:ILE:HB	1:A:84:THR:H	20	0.23
(1,24)	1:A:104:CYS:H	1:A:105:ASN:H	2	0.23
(1,24)	1:A:104:CYS:H	1:A:105:ASN:H	19	0.23
(1,23)	1:A:104:CYS:H	1:A:105:ASN:H	2	0.23
(1,23)	1:A:104:CYS:H	1:A:105:ASN:H	19	0.23
(1,228)	1:A:92:CYS:HB2	1:A:93:SER:H	20	0.23
(1,228)	1:A:92:CYS:HB3	1:A:93:SER:H	20	0.23
(1,220)	1:A:92:CYS:HB2	1:A:95:GLY:H	10	0.23

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,220)	1:A:92:CYS:HB3	1:A:95:GLY:H	10	0.23
(1,215)	1:A:96:ARG:H	1:A:92:CYS:HB2	1	0.23
(1,215)	1:A:96:ARG:H	1:A:92:CYS:HB3	1	0.23
(1,187)	1:A:103:VAL:HG11	1:A:102:PHE:H	11	0.23
(1,187)	1:A:103:VAL:HG12	1:A:102:PHE:H	11	0.23
(1,187)	1:A:103:VAL:HG13	1:A:102:PHE:H	11	0.23
(1,187)	1:A:103:VAL:HG21	1:A:102:PHE:H	11	0.23
(1,187)	1:A:103:VAL:HG22	1:A:102:PHE:H	11	0.23
(1,187)	1:A:103:VAL:HG23	1:A:102:PHE:H	11	0.23
(1,187)	1:A:103:VAL:HG11	1:A:102:PHE:H	12	0.23
(1,187)	1:A:103:VAL:HG12	1:A:102:PHE:H	12	0.23
(1,187)	1:A:103:VAL:HG13	1:A:102:PHE:H	12	0.23
(1,187)	1:A:103:VAL:HG21	1:A:102:PHE:H	12	0.23
(1,187)	1:A:103:VAL:HG22	1:A:102:PHE:H	12	0.23
(1,187)	1:A:103:VAL:HG23	1:A:102:PHE:H	12	0.23
(1,184)	1:A:103:VAL:HB	1:A:102:PHE:H	20	0.23
(1,14)	1:A:110:CYS:H	1:A:109:ASP:H	14	0.23
(1,128)	1:A:114:SER:HA	1:A:114:SER:H	1	0.23
(1,128)	1:A:114:SER:HA	1:A:114:SER:H	5	0.23
(1,128)	1:A:114:SER:HA	1:A:114:SER:H	10	0.23
(1,109)	1:A:119:CYS:H	1:A:117:LEU:HG	19	0.23
(4,7)	1:A:8:PHE:H	1:A:16:VAL:O	16	0.22
(2,97)	1:A:20:TRP:HB2	1:A:20:TRP:H	1	0.22
(2,97)	1:A:20:TRP:HB3	1:A:20:TRP:H	1	0.22
(2,97)	1:A:21:LYS:HA	1:A:20:TRP:H	1	0.22
(2,76)	1:A:28:CYS:HB2	1:A:32:SER:H	4	0.22
(2,76)	1:A:28:CYS:HB3	1:A:32:SER:H	4	0.22
(2,76)	1:A:29:GLU:HA	1:A:32:SER:H	4	0.22
(2,76)	1:A:32:SER:HA	1:A:32:SER:H	4	0.22
(2,76)	1:A:32:SER:HB2	1:A:32:SER:H	4	0.22
(2,76)	1:A:32:SER:HB3	1:A:32:SER:H	4	0.22
(2,76)	1:A:33:ASP:HA	1:A:32:SER:H	4	0.22
(2,76)	1:A:35:SER:HB2	1:A:32:SER:H	4	0.22
(2,76)	1:A:35:SER:HB3	1:A:32:SER:H	4	0.22
(2,66)	1:A:4:ALA:H	1:A:7:ASP:H	5	0.22
(2,66)	1:A:5:GLU:H	1:A:7:ASP:H	5	0.22
(2,362)	1:A:14:GLN:HB2	1:A:10:CYS:H	19	0.22
(2,362)	1:A:14:GLN:HB3	1:A:10:CYS:H	19	0.22
(2,351)	1:A:12:ASN:HB2	1:A:12:ASN:H	5	0.22
(2,351)	1:A:12:ASN:HB3	1:A:12:ASN:H	5	0.22
(2,351)	1:A:13:GLY:HA2	1:A:12:ASN:H	5	0.22
(2,351)	1:A:13:GLY:HA3	1:A:12:ASN:H	5	0.22

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,328)	1:A:49:ILE:HG21	1:A:62:SER:H	8	0.22
(2,328)	1:A:49:ILE:HG22	1:A:62:SER:H	8	0.22
(2,328)	1:A:49:ILE:HG23	1:A:62:SER:H	8	0.22
(2,328)	1:A:59:ILE:HD11	1:A:62:SER:H	8	0.22
(2,328)	1:A:59:ILE:HD12	1:A:62:SER:H	8	0.22
(2,328)	1:A:59:ILE:HD13	1:A:62:SER:H	8	0.22
(2,328)	1:A:60:PRO:HB2	1:A:62:SER:H	8	0.22
(2,328)	1:A:60:PRO:HB3	1:A:62:SER:H	8	0.22
(2,328)	1:A:61:VAL:HG11	1:A:62:SER:H	8	0.22
(2,328)	1:A:61:VAL:HG12	1:A:62:SER:H	8	0.22
(2,328)	1:A:61:VAL:HG13	1:A:62:SER:H	8	0.22
(2,328)	1:A:61:VAL:HG21	1:A:62:SER:H	8	0.22
(2,328)	1:A:61:VAL:HG21	1:A:62:SER:H	8	0.22
(2,328)	1:A:61:VAL:HG22	1:A:62:SER:H	8	0.22
(2,328)	1:A:61:VAL:HG22	1:A:62:SER:H	8	0.22
(2,328)	1:A:61:VAL:HG23	1:A:62:SER:H	8	0.22
(2,328)	1:A:61:VAL:HG23	1:A:62:SER:H	8	0.22
(2,328)	1:A:49:ILE:HG21	1:A:62:SER:H	20	0.22
(2,328)	1:A:49:ILE:HG22	1:A:62:SER:H	20	0.22
(2,328)	1:A:49:ILE:HG23	1:A:62:SER:H	20	0.22
(2,328)	1:A:59:ILE:HD11	1:A:62:SER:H	20	0.22
(2,328)	1:A:59:ILE:HD12	1:A:62:SER:H	20	0.22
(2,328)	1:A:59:ILE:HD13	1:A:62:SER:H	20	0.22
(2,328)	1:A:60:PRO:HB2	1:A:62:SER:H	20	0.22
(2,328)	1:A:60:PRO:HB3	1:A:62:SER:H	20	0.22
(2,328)	1:A:61:VAL:HG11	1:A:62:SER:H	20	0.22
(2,328)	1:A:61:VAL:HG12	1:A:62:SER:H	20	0.22
(2,328)	1:A:61:VAL:HG13	1:A:62:SER:H	20	0.22
(2,328)	1:A:61:VAL:HG21	1:A:62:SER:H	20	0.22
(2,328)	1:A:61:VAL:HG21	1:A:62:SER:H	20	0.22
(2,328)	1:A:61:VAL:HG22	1:A:62:SER:H	20	0.22
(2,328)	1:A:61:VAL:HG22	1:A:62:SER:H	20	0.22
(2,328)	1:A:61:VAL:HG23	1:A:62:SER:H	20	0.22
(2,328)	1:A:61:VAL:HG23	1:A:62:SER:H	20	0.22
(2,327)	1:A:64:ARG:HG2	1:A:71:CYS:H	10	0.22
(2,327)	1:A:64:ARG:HG3	1:A:71:CYS:H	10	0.22
(2,327)	1:A:68:GLU:HG2	1:A:71:CYS:H	10	0.22
(2,327)	1:A:68:GLU:HG3	1:A:71:CYS:H	10	0.22
(2,306)	1:A:71:CYS:HB2	1:A:77:GLU:H	14	0.22
(2,306)	1:A:71:CYS:HB3	1:A:77:GLU:H	14	0.22
(2,306)	1:A:80:CYS:HB2	1:A:77:GLU:H	14	0.22
(2,306)	1:A:80:CYS:HB3	1:A:77:GLU:H	14	0.22

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,303)	1:A:75:GLU:HB2	1:A:77:GLU:H	7	0.22
(2,303)	1:A:75:GLU:HB3	1:A:77:GLU:H	7	0.22
(2,303)	1:A:77:GLU:HG2	1:A:77:GLU:H	7	0.22
(2,303)	1:A:77:GLU:HG3	1:A:77:GLU:H	7	0.22
(2,303)	1:A:78:GLU:HB2	1:A:77:GLU:H	7	0.22
(2,303)	1:A:78:GLU:HB3	1:A:77:GLU:H	7	0.22
(2,303)	1:A:87:PRO:HG2	1:A:77:GLU:H	7	0.22
(2,303)	1:A:87:PRO:HG3	1:A:77:GLU:H	7	0.22
(2,303)	1:A:75:GLU:HB2	1:A:77:GLU:H	9	0.22
(2,303)	1:A:75:GLU:HB3	1:A:77:GLU:H	9	0.22
(2,303)	1:A:77:GLU:HG2	1:A:77:GLU:H	9	0.22
(2,303)	1:A:77:GLU:HG3	1:A:77:GLU:H	9	0.22
(2,303)	1:A:78:GLU:HB2	1:A:77:GLU:H	9	0.22
(2,303)	1:A:78:GLU:HB3	1:A:77:GLU:H	9	0.22
(2,303)	1:A:87:PRO:HG2	1:A:77:GLU:H	9	0.22
(2,303)	1:A:87:PRO:HG3	1:A:77:GLU:H	9	0.22
(2,300)	1:A:44:CYS:HB2	1:A:48:GLU:H	2	0.22
(2,300)	1:A:44:CYS:HB3	1:A:48:GLU:H	2	0.22
(2,300)	1:A:48:GLU:HG2	1:A:48:GLU:H	2	0.22
(2,300)	1:A:48:GLU:HG3	1:A:48:GLU:H	2	0.22
(2,300)	1:A:44:CYS:HB2	1:A:48:GLU:H	6	0.22
(2,300)	1:A:44:CYS:HB3	1:A:48:GLU:H	6	0.22
(2,300)	1:A:48:GLU:HG2	1:A:48:GLU:H	6	0.22
(2,300)	1:A:48:GLU:HG3	1:A:48:GLU:H	6	0.22
(2,300)	1:A:44:CYS:HB2	1:A:48:GLU:H	9	0.22
(2,300)	1:A:44:CYS:HB3	1:A:48:GLU:H	9	0.22
(2,300)	1:A:48:GLU:HG2	1:A:48:GLU:H	9	0.22
(2,300)	1:A:48:GLU:HG3	1:A:48:GLU:H	9	0.22
(2,292)	1:A:3:CYS:HB2	1:A:8:PHE:H	10	0.22
(2,292)	1:A:3:CYS:HB3	1:A:8:PHE:H	10	0.22
(2,292)	1:A:7:ASP:HB2	1:A:8:PHE:H	10	0.22
(2,292)	1:A:7:ASP:HB3	1:A:8:PHE:H	10	0.22
(2,292)	1:A:8:PHE:HB2	1:A:8:PHE:H	10	0.22
(2,292)	1:A:8:PHE:HB3	1:A:8:PHE:H	10	0.22
(2,292)	1:A:3:CYS:HB2	1:A:8:PHE:H	20	0.22
(2,292)	1:A:3:CYS:HB3	1:A:8:PHE:H	20	0.22
(2,292)	1:A:7:ASP:HB2	1:A:8:PHE:H	20	0.22
(2,292)	1:A:7:ASP:HB3	1:A:8:PHE:H	20	0.22
(2,292)	1:A:8:PHE:HB2	1:A:8:PHE:H	20	0.22
(2,292)	1:A:8:PHE:HB3	1:A:8:PHE:H	20	0.22
(2,29)	1:A:28:CYS:HA	1:A:29:GLU:H	16	0.22
(2,29)	1:A:30:ASP:HA	1:A:29:GLU:H	16	0.22

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,278)	1:A:41:MET:HA	1:A:42:ARG:H	16	0.22
(2,278)	1:A:42:ARG:HA	1:A:42:ARG:H	16	0.22
(2,278)	1:A:43:THR:HA	1:A:42:ARG:H	16	0.22
(2,278)	1:A:56:THR:HB	1:A:42:ARG:H	16	0.22
(2,278)	1:A:41:MET:HA	1:A:42:ARG:H	18	0.22
(2,278)	1:A:42:ARG:HA	1:A:42:ARG:H	18	0.22
(2,278)	1:A:43:THR:HA	1:A:42:ARG:H	18	0.22
(2,278)	1:A:56:THR:HB	1:A:42:ARG:H	18	0.22
(2,263)	1:A:62:SER:HB2	1:A:63:TRP:H	3	0.22
(2,263)	1:A:62:SER:HB3	1:A:63:TRP:H	3	0.22
(2,263)	1:A:63:TRP:HB2	1:A:63:TRP:H	3	0.22
(2,228)	1:A:28:CYS:HB2	1:A:28:CYS:H	14	0.22
(2,228)	1:A:28:CYS:HB3	1:A:28:CYS:H	14	0.22
(2,228)	1:A:29:GLU:HA	1:A:28:CYS:H	14	0.22
(2,228)	1:A:32:SER:HA	1:A:28:CYS:H	14	0.22
(2,223)	1:A:45:ARG:HG2	1:A:45:ARG:H	8	0.22
(2,223)	1:A:45:ARG:HG3	1:A:45:ARG:H	8	0.22
(2,223)	1:A:46:ILE:HB	1:A:45:ARG:H	8	0.22
(2,200)	1:A:77:GLU:HG2	1:A:76:ASP:H	14	0.22
(2,200)	1:A:77:GLU:HG3	1:A:76:ASP:H	14	0.22
(2,200)	1:A:87:PRO:HG2	1:A:76:ASP:H	14	0.22
(2,200)	1:A:87:PRO:HG3	1:A:76:ASP:H	14	0.22
(2,188)	1:A:16:VAL:HG11	1:A:19:ARG:H	2	0.22
(2,188)	1:A:16:VAL:HG12	1:A:19:ARG:H	2	0.22
(2,188)	1:A:16:VAL:HG13	1:A:19:ARG:H	2	0.22
(2,188)	1:A:16:VAL:HG21	1:A:19:ARG:H	2	0.22
(2,188)	1:A:16:VAL:HG22	1:A:19:ARG:H	2	0.22
(2,188)	1:A:16:VAL:HG23	1:A:19:ARG:H	2	0.22
(2,188)	1:A:16:VAL:HG11	1:A:19:ARG:H	5	0.22
(2,188)	1:A:16:VAL:HG12	1:A:19:ARG:H	5	0.22
(2,188)	1:A:16:VAL:HG13	1:A:19:ARG:H	5	0.22
(2,188)	1:A:16:VAL:HG21	1:A:19:ARG:H	5	0.22
(2,188)	1:A:16:VAL:HG22	1:A:19:ARG:H	5	0.22
(2,188)	1:A:16:VAL:HG23	1:A:19:ARG:H	5	0.22
(2,184)	1:A:16:VAL:HG11	1:A:15:CYS:H	11	0.22
(2,184)	1:A:16:VAL:HG11	1:A:15:CYS:H	11	0.22
(2,184)	1:A:16:VAL:HG11	1:A:15:CYS:H	11	0.22
(2,184)	1:A:16:VAL:HG12	1:A:15:CYS:H	11	0.22
(2,184)	1:A:16:VAL:HG12	1:A:15:CYS:H	11	0.22
(2,184)	1:A:16:VAL:HG12	1:A:15:CYS:H	11	0.22
(2,184)	1:A:16:VAL:HG13	1:A:15:CYS:H	11	0.22
(2,184)	1:A:16:VAL:HG13	1:A:15:CYS:H	11	0.22

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,184)	1:A:16:VAL:HG13	1:A:15:CYS:H	11	0.22
(2,184)	1:A:16:VAL:HG21	1:A:15:CYS:H	11	0.22
(2,184)	1:A:16:VAL:HG21	1:A:15:CYS:H	11	0.22
(2,184)	1:A:16:VAL:HG21	1:A:15:CYS:H	11	0.22
(2,184)	1:A:16:VAL:HG22	1:A:15:CYS:H	11	0.22
(2,184)	1:A:16:VAL:HG22	1:A:15:CYS:H	11	0.22
(2,184)	1:A:16:VAL:HG22	1:A:15:CYS:H	11	0.22
(2,184)	1:A:16:VAL:HG23	1:A:15:CYS:H	11	0.22
(2,184)	1:A:16:VAL:HG23	1:A:15:CYS:H	11	0.22
(2,184)	1:A:16:VAL:HG23	1:A:15:CYS:H	11	0.22
(2,177)	1:A:22:CYS:HB2	1:A:44:CYS:H	18	0.22
(2,177)	1:A:22:CYS:HB3	1:A:44:CYS:H	18	0.22
(2,177)	1:A:44:CYS:HB2	1:A:44:CYS:H	18	0.22
(2,177)	1:A:44:CYS:HB3	1:A:44:CYS:H	18	0.22
(2,173)	1:A:69:ASN:HD21	1:A:69:ASN:H	12	0.22
(2,163)	1:A:71:CYS:HA	1:A:77:GLU:H	7	0.22
(2,163)	1:A:77:GLU:HA	1:A:77:GLU:H	7	0.22
(2,163)	1:A:71:CYS:HA	1:A:77:GLU:H	13	0.22
(2,163)	1:A:77:GLU:HA	1:A:77:GLU:H	13	0.22
(2,163)	1:A:71:CYS:HA	1:A:77:GLU:H	16	0.22
(2,163)	1:A:77:GLU:HA	1:A:77:GLU:H	16	0.22
(2,160)	1:A:43:THR:HG1	1:A:43:THR:H	7	0.22
(2,160)	1:A:43:THR:HG1	1:A:43:THR:H	7	0.22
(2,160)	1:A:43:THR:HG21	1:A:43:THR:H	7	0.22
(2,160)	1:A:43:THR:HG21	1:A:43:THR:H	7	0.22
(2,160)	1:A:43:THR:HG22	1:A:43:THR:H	7	0.22
(2,160)	1:A:43:THR:HG22	1:A:43:THR:H	7	0.22
(2,160)	1:A:43:THR:HG23	1:A:43:THR:H	7	0.22
(2,160)	1:A:43:THR:HG23	1:A:43:THR:H	7	0.22
(2,160)	1:A:56:THR:HG1	1:A:43:THR:H	7	0.22
(2,160)	1:A:56:THR:HG21	1:A:43:THR:H	7	0.22
(2,160)	1:A:56:THR:HG22	1:A:43:THR:H	7	0.22
(2,160)	1:A:56:THR:HG23	1:A:43:THR:H	7	0.22
(2,151)	1:A:46:ILE:HD11	1:A:46:ILE:H	3	0.22
(2,151)	1:A:46:ILE:HD12	1:A:46:ILE:H	3	0.22
(2,151)	1:A:46:ILE:HD13	1:A:46:ILE:H	3	0.22
(2,151)	1:A:46:ILE:HG21	1:A:46:ILE:H	3	0.22
(2,151)	1:A:46:ILE:HG22	1:A:46:ILE:H	3	0.22
(2,151)	1:A:46:ILE:HG23	1:A:46:ILE:H	3	0.22
(2,137)	1:A:116:GLU:HB2	1:A:117:LEU:H	1	0.22
(2,137)	1:A:116:GLU:HB3	1:A:117:LEU:H	1	0.22
(2,137)	1:A:117:LEU:HB2	1:A:117:LEU:H	1	0.22

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,137)	1:A:117:LEU:HB3	1:A:117:LEU:H	1	0.22
(2,134)	1:A:79:ASN:HB2	1:A:85:CYS:H	2	0.22
(2,134)	1:A:79:ASN:HB3	1:A:85:CYS:H	2	0.22
(2,134)	1:A:97:CYS:HB2	1:A:85:CYS:H	2	0.22
(2,134)	1:A:97:CYS:HB3	1:A:85:CYS:H	2	0.22
(2,134)	1:A:79:ASN:HB2	1:A:85:CYS:H	14	0.22
(2,134)	1:A:79:ASN:HB3	1:A:85:CYS:H	14	0.22
(2,134)	1:A:97:CYS:HB2	1:A:85:CYS:H	14	0.22
(2,134)	1:A:97:CYS:HB3	1:A:85:CYS:H	14	0.22
(2,132)	1:A:45:ARG:HB2	1:A:45:ARG:H	5	0.22
(2,132)	1:A:45:ARG:HB3	1:A:45:ARG:H	5	0.22
(2,132)	1:A:46:ILE:HG12	1:A:45:ARG:H	5	0.22
(2,132)	1:A:46:ILE:HG13	1:A:45:ARG:H	5	0.22
(2,124)	1:A:43:THR:HG1	1:A:57:GLN:H	2	0.22
(2,124)	1:A:43:THR:HG1	1:A:57:GLN:H	2	0.22
(2,124)	1:A:43:THR:HG21	1:A:57:GLN:H	2	0.22
(2,124)	1:A:43:THR:HG21	1:A:57:GLN:H	2	0.22
(2,124)	1:A:43:THR:HG22	1:A:57:GLN:H	2	0.22
(2,124)	1:A:43:THR:HG22	1:A:57:GLN:H	2	0.22
(2,124)	1:A:43:THR:HG23	1:A:57:GLN:H	2	0.22
(2,124)	1:A:43:THR:HG23	1:A:57:GLN:H	2	0.22
(2,124)	1:A:56:THR:HG1	1:A:57:GLN:H	2	0.22
(2,124)	1:A:56:THR:HG21	1:A:57:GLN:H	2	0.22
(2,124)	1:A:56:THR:HG21	1:A:57:GLN:H	2	0.22
(2,124)	1:A:56:THR:HG22	1:A:57:GLN:H	2	0.22
(2,124)	1:A:56:THR:HG22	1:A:57:GLN:H	2	0.22
(2,124)	1:A:56:THR:HG23	1:A:57:GLN:H	2	0.22
(2,124)	1:A:56:THR:HG23	1:A:57:GLN:H	2	0.22
(1,98)	1:A:98:ILE:HG12	1:A:99:SER:H	15	0.22
(1,98)	1:A:98:ILE:HG13	1:A:99:SER:H	15	0.22
(1,96)	1:A:100:ARG:H	1:A:89:GLU:HA	4	0.22
(1,926)	1:A:16:VAL:HG11	1:A:20:TRP:HZ3	8	0.22
(1,926)	1:A:16:VAL:HG12	1:A:20:TRP:HZ3	8	0.22
(1,926)	1:A:16:VAL:HG13	1:A:20:TRP:HZ3	8	0.22
(1,921)	1:A:8:PHE:HA	1:A:16:VAL:HG21	11	0.22
(1,921)	1:A:8:PHE:HA	1:A:16:VAL:HG22	11	0.22
(1,921)	1:A:8:PHE:HA	1:A:16:VAL:HG23	11	0.22
(1,921)	1:A:8:PHE:HA	1:A:16:VAL:HG21	16	0.22
(1,921)	1:A:8:PHE:HA	1:A:16:VAL:HG22	16	0.22
(1,921)	1:A:8:PHE:HA	1:A:16:VAL:HG23	16	0.22
(1,92)	1:A:7:ASP:HB2	1:A:8:PHE:H	11	0.22
(1,92)	1:A:7:ASP:HB3	1:A:8:PHE:H	11	0.22

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,905)	1:A:101:ASN:HD21	1:A:105:ASN:HD21	10	0.22
(1,9)	1:A:12:ASN:H	1:A:11:ASN:H	5	0.22
(1,884)	1:A:50:SER:H	1:A:59:ILE:H	9	0.22
(1,884)	1:A:50:SER:H	1:A:59:ILE:H	16	0.22
(1,873)	1:A:34:GLU:HB2	1:A:33:ASP:H	6	0.22
(1,873)	1:A:34:GLU:HB3	1:A:33:ASP:H	6	0.22
(1,869)	1:A:14:GLN:HE22	1:A:28:CYS:H	18	0.22
(1,860)	1:A:16:VAL:HB	1:A:19:ARG:H	12	0.22
(1,860)	1:A:16:VAL:HB	1:A:19:ARG:H	18	0.22
(1,856)	1:A:14:GLN:H	1:A:12:ASN:HD22	2	0.22
(1,842)	1:A:80:CYS:HA	1:A:84:THR:H	14	0.22
(1,842)	1:A:80:CYS:HA	1:A:84:THR:H	19	0.22
(1,838)	1:A:58:CYS:HA	1:A:52:GLY:H	4	0.22
(1,837)	1:A:50:SER:H	1:A:45:ARG:HD2	17	0.22
(1,837)	1:A:50:SER:H	1:A:45:ARG:HD3	17	0.22
(1,826)	1:A:114:SER:H	1:A:117:LEU:H	2	0.22
(1,816)	1:A:109:ASP:H	1:A:116:GLU:HG2	14	0.22
(1,816)	1:A:109:ASP:H	1:A:116:GLU:HG3	14	0.22
(1,811)	1:A:107:GLN:H	1:A:105:ASN:HD21	8	0.22
(1,811)	1:A:107:GLN:H	1:A:105:ASN:HD21	10	0.22
(1,810)	1:A:101:ASN:HD21	1:A:105:ASN:HD22	1	0.22
(1,810)	1:A:101:ASN:HD21	1:A:105:ASN:HD22	18	0.22
(1,807)	1:A:98:ILE:HG12	1:A:103:VAL:H	3	0.22
(1,807)	1:A:98:ILE:HG13	1:A:103:VAL:H	3	0.22
(1,791)	1:A:85:CYS:HB2	1:A:89:GLU:H	3	0.22
(1,791)	1:A:85:CYS:HB3	1:A:89:GLU:H	3	0.22
(1,791)	1:A:85:CYS:HB2	1:A:89:GLU:H	11	0.22
(1,791)	1:A:85:CYS:HB3	1:A:89:GLU:H	11	0.22
(1,791)	1:A:85:CYS:HB2	1:A:89:GLU:H	19	0.22
(1,791)	1:A:85:CYS:HB3	1:A:89:GLU:H	19	0.22
(1,788)	1:A:80:CYS:H	1:A:78:GLU:H	19	0.22
(1,783)	1:A:71:CYS:HB2	1:A:74:GLY:H	8	0.22
(1,783)	1:A:71:CYS:HB3	1:A:74:GLY:H	8	0.22
(1,768)	1:A:58:CYS:HA	1:A:59:ILE:H	13	0.22
(1,740)	1:A:35:SER:H	1:A:56:THR:HG1	8	0.22
(1,740)	1:A:35:SER:H	1:A:56:THR:HG21	8	0.22
(1,740)	1:A:35:SER:H	1:A:56:THR:HG22	8	0.22
(1,740)	1:A:35:SER:H	1:A:56:THR:HG23	8	0.22
(1,74)	1:A:65:CYS:H	1:A:65:CYS:HB2	5	0.22
(1,74)	1:A:65:CYS:H	1:A:65:CYS:HB3	5	0.22
(1,74)	1:A:65:CYS:H	1:A:65:CYS:HB2	20	0.22
(1,74)	1:A:65:CYS:H	1:A:65:CYS:HB3	20	0.22

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,734)	1:A:32:SER:H	1:A:11:ASN:H	19	0.22
(1,726)	1:A:34:GLU:HG2	1:A:27:ASP:H	18	0.22
(1,726)	1:A:34:GLU:HG3	1:A:27:ASP:H	18	0.22
(1,712)	1:A:32:SER:H	1:A:11:ASN:H	19	0.22
(1,70)	1:A:77:GLU:HB2	1:A:78:GLU:H	6	0.22
(1,70)	1:A:77:GLU:HB3	1:A:78:GLU:H	6	0.22
(1,698)	1:A:64:ARG:H	1:A:64:ARG:HG2	12	0.22
(1,698)	1:A:64:ARG:H	1:A:64:ARG:HG3	12	0.22
(1,689)	1:A:69:ASN:HD21	1:A:69:ASN:H	12	0.22
(1,683)	1:A:78:GLU:HG2	1:A:79:ASN:HD21	19	0.22
(1,683)	1:A:78:GLU:HG3	1:A:79:ASN:HD21	19	0.22
(1,639)	1:A:82:ASN:H	1:A:82:ASN:HD21	17	0.22
(1,592)	1:A:74:GLY:HA2	1:A:69:ASN:HD21	11	0.22
(1,592)	1:A:74:GLY:HA3	1:A:69:ASN:HD21	11	0.22
(1,592)	1:A:74:GLY:HA2	1:A:69:ASN:HD21	16	0.22
(1,592)	1:A:74:GLY:HA3	1:A:69:ASN:HD21	16	0.22
(1,585)	1:A:28:CYS:H	1:A:27:ASP:H	17	0.22
(1,569)	1:A:85:CYS:H	1:A:84:THR:H	3	0.22
(1,569)	1:A:85:CYS:H	1:A:84:THR:H	6	0.22
(1,551)	1:A:104:CYS:HB2	1:A:104:CYS:H	17	0.22
(1,551)	1:A:104:CYS:HB3	1:A:104:CYS:H	17	0.22
(1,550)	1:A:104:CYS:HB2	1:A:104:CYS:H	17	0.22
(1,550)	1:A:104:CYS:HB3	1:A:104:CYS:H	17	0.22
(1,55)	1:A:71:CYS:H	1:A:70:ASP:H	20	0.22
(1,545)	1:A:103:VAL:HA	1:A:105:ASN:H	7	0.22
(1,545)	1:A:103:VAL:HA	1:A:105:ASN:H	16	0.22
(1,541)	1:A:115:ASP:HB2	1:A:116:GLU:H	12	0.22
(1,541)	1:A:115:ASP:HB3	1:A:116:GLU:H	12	0.22
(1,534)	1:A:77:GLU:HB2	1:A:77:GLU:H	1	0.22
(1,534)	1:A:77:GLU:HB3	1:A:77:GLU:H	1	0.22
(1,518)	1:A:49:ILE:H	1:A:61:VAL:H	1	0.22
(1,501)	1:A:34:GLU:HB2	1:A:34:GLU:H	3	0.22
(1,501)	1:A:34:GLU:HB3	1:A:34:GLU:H	3	0.22
(1,476)	1:A:7:ASP:H	1:A:3:CYS:HB2	19	0.22
(1,476)	1:A:7:ASP:H	1:A:3:CYS:HB3	19	0.22
(1,475)	1:A:75:GLU:H	1:A:76:ASP:H	7	0.22
(1,468)	1:A:78:GLU:HG2	1:A:79:ASN:H	19	0.22
(1,468)	1:A:78:GLU:HG3	1:A:79:ASN:H	19	0.22
(1,454)	1:A:78:GLU:HG2	1:A:76:ASP:H	14	0.22
(1,454)	1:A:78:GLU:HG3	1:A:76:ASP:H	14	0.22
(1,451)	1:A:75:GLU:H	1:A:76:ASP:H	7	0.22
(1,433)	1:A:74:GLY:HA2	1:A:71:CYS:H	18	0.22

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,433)	1:A:74:GLY:HA3	1:A:71:CYS:H	18	0.22
(1,432)	1:A:70:ASP:HB2	1:A:70:ASP:H	6	0.22
(1,432)	1:A:70:ASP:HB3	1:A:70:ASP:H	6	0.22
(1,418)	1:A:64:ARG:HA	1:A:66:ASP:H	5	0.22
(1,418)	1:A:64:ARG:HA	1:A:66:ASP:H	7	0.22
(1,418)	1:A:64:ARG:HA	1:A:66:ASP:H	8	0.22
(1,418)	1:A:64:ARG:HA	1:A:66:ASP:H	12	0.22
(1,414)	1:A:63:TRP:H	1:A:63:TRP:HB2	20	0.22
(1,414)	1:A:63:TRP:H	1:A:63:TRP:HB3	20	0.22
(1,386)	1:A:51:CYS:HB2	1:A:51:CYS:H	2	0.22
(1,386)	1:A:51:CYS:HB3	1:A:51:CYS:H	2	0.22
(1,383)	1:A:51:CYS:H	1:A:50:SER:HA	4	0.22
(1,374)	1:A:61:VAL:H	1:A:49:ILE:H	9	0.22
(1,369)	1:A:43:THR:HB	1:A:44:CYS:H	18	0.22
(1,351)	1:A:32:SER:H	1:A:33:ASP:H	7	0.22
(1,351)	1:A:32:SER:H	1:A:33:ASP:H	17	0.22
(1,349)	1:A:32:SER:H	1:A:33:ASP:H	7	0.22
(1,349)	1:A:32:SER:H	1:A:33:ASP:H	17	0.22
(1,339)	1:A:25:ASP:H	1:A:20:TRP:HB2	10	0.22
(1,339)	1:A:25:ASP:H	1:A:20:TRP:HB3	10	0.22
(1,335)	1:A:45:ARG:HD2	1:A:24:GLY:H	7	0.22
(1,335)	1:A:45:ARG:HD3	1:A:24:GLY:H	7	0.22
(1,33)	1:A:115:ASP:H	1:A:114:SER:H	19	0.22
(1,328)	1:A:22:CYS:HB2	1:A:22:CYS:H	3	0.22
(1,328)	1:A:22:CYS:HB3	1:A:22:CYS:H	3	0.22
(1,328)	1:A:22:CYS:HB2	1:A:22:CYS:H	5	0.22
(1,328)	1:A:22:CYS:HB3	1:A:22:CYS:H	5	0.22
(1,328)	1:A:22:CYS:HB2	1:A:22:CYS:H	6	0.22
(1,328)	1:A:22:CYS:HB3	1:A:22:CYS:H	6	0.22
(1,328)	1:A:22:CYS:HB2	1:A:22:CYS:H	19	0.22
(1,328)	1:A:22:CYS:HB3	1:A:22:CYS:H	19	0.22
(1,320)	1:A:7:ASP:HA	1:A:18:SER:H	7	0.22
(1,319)	1:A:16:VAL:H	1:A:9:VAL:HA	12	0.22
(1,312)	1:A:14:GLN:HG2	1:A:14:GLN:H	9	0.22
(1,312)	1:A:14:GLN:HG3	1:A:14:GLN:H	9	0.22
(1,312)	1:A:14:GLN:HG2	1:A:14:GLN:H	19	0.22
(1,312)	1:A:14:GLN:HG3	1:A:14:GLN:H	19	0.22
(1,299)	1:A:11:ASN:H	1:A:12:ASN:H	17	0.22
(1,283)	1:A:8:PHE:H	1:A:7:ASP:H	2	0.22
(1,283)	1:A:8:PHE:H	1:A:7:ASP:H	4	0.22
(1,283)	1:A:8:PHE:H	1:A:7:ASP:H	6	0.22
(1,283)	1:A:8:PHE:H	1:A:7:ASP:H	9	0.22

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,283)	1:A:8:PHE:H	1:A:7:ASP:H	10	0.22
(1,283)	1:A:8:PHE:H	1:A:7:ASP:H	16	0.22
(1,283)	1:A:8:PHE:H	1:A:7:ASP:H	18	0.22
(1,281)	1:A:5:GLU:HB2	1:A:6:SER:H	9	0.22
(1,281)	1:A:5:GLU:HB2	1:A:6:SER:H	9	0.22
(1,281)	1:A:5:GLU:HB3	1:A:6:SER:H	9	0.22
(1,281)	1:A:5:GLU:HB3	1:A:6:SER:H	9	0.22
(1,248)	1:A:83:ILE:HB	1:A:84:THR:H	16	0.22
(1,228)	1:A:92:CYS:HB2	1:A:93:SER:H	12	0.22
(1,228)	1:A:92:CYS:HB3	1:A:93:SER:H	12	0.22
(1,205)	1:A:98:ILE:HG12	1:A:98:ILE:H	19	0.22
(1,205)	1:A:98:ILE:HG13	1:A:98:ILE:H	19	0.22
(1,187)	1:A:103:VAL:HG11	1:A:102:PHE:H	15	0.22
(1,187)	1:A:103:VAL:HG12	1:A:102:PHE:H	15	0.22
(1,187)	1:A:103:VAL:HG13	1:A:102:PHE:H	15	0.22
(1,187)	1:A:103:VAL:HG21	1:A:102:PHE:H	15	0.22
(1,187)	1:A:103:VAL:HG22	1:A:102:PHE:H	15	0.22
(1,187)	1:A:103:VAL:HG23	1:A:102:PHE:H	15	0.22
(1,184)	1:A:103:VAL:HB	1:A:102:PHE:H	12	0.22
(1,136)	1:A:112:ASP:H	1:A:110:CYS:H	4	0.22
(1,128)	1:A:114:SER:HA	1:A:114:SER:H	8	0.22
(1,109)	1:A:119:CYS:H	1:A:117:LEU:HG	4	0.22
(4,5)	1:A:49:ILE:O	1:A:59:ILE:H	1	0.21
(4,5)	1:A:49:ILE:O	1:A:59:ILE:H	2	0.21
(4,5)	1:A:49:ILE:O	1:A:59:ILE:H	15	0.21
(4,2)	1:A:90:PHE:O	1:A:98:ILE:H	11	0.21
(3,7)	2:A:202:CA:CA	1:A:63:TRP:O	17	0.21
(2,89)	1:A:107:GLN:HB2	1:A:108:ASP:H	7	0.21
(2,89)	1:A:107:GLN:HB3	1:A:108:ASP:H	7	0.21
(2,80)	1:A:41:MET:HA	1:A:56:THR:H	6	0.21
(2,80)	1:A:42:ARG:HA	1:A:56:THR:H	6	0.21
(2,80)	1:A:56:THR:HB	1:A:56:THR:H	6	0.21
(2,80)	1:A:41:MET:HA	1:A:56:THR:H	7	0.21
(2,80)	1:A:42:ARG:HA	1:A:56:THR:H	7	0.21
(2,80)	1:A:56:THR:HB	1:A:56:THR:H	7	0.21
(2,72)	1:A:110:CYS:HB2	1:A:113:GLY:H	3	0.21
(2,72)	1:A:110:CYS:HB3	1:A:113:GLY:H	3	0.21
(2,72)	1:A:112:ASP:HB2	1:A:113:GLY:H	3	0.21
(2,72)	1:A:112:ASP:HB3	1:A:113:GLY:H	3	0.21
(2,42)	1:A:49:ILE:HG21	1:A:61:VAL:H	2	0.21
(2,42)	1:A:49:ILE:HG22	1:A:61:VAL:H	2	0.21
(2,42)	1:A:49:ILE:HG23	1:A:61:VAL:H	2	0.21

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,42)	1:A:59:ILE:HD11	1:A:61:VAL:H	2	0.21
(2,42)	1:A:59:ILE:HD12	1:A:61:VAL:H	2	0.21
(2,42)	1:A:59:ILE:HD13	1:A:61:VAL:H	2	0.21
(2,42)	1:A:60:PRO:HB2	1:A:61:VAL:H	2	0.21
(2,42)	1:A:60:PRO:HB3	1:A:61:VAL:H	2	0.21
(2,42)	1:A:61:VAL:HG11	1:A:61:VAL:H	2	0.21
(2,42)	1:A:61:VAL:HG12	1:A:61:VAL:H	2	0.21
(2,42)	1:A:61:VAL:HG13	1:A:61:VAL:H	2	0.21
(2,42)	1:A:61:VAL:HG21	1:A:61:VAL:H	2	0.21
(2,42)	1:A:61:VAL:HG22	1:A:61:VAL:H	2	0.21
(2,42)	1:A:61:VAL:HG23	1:A:61:VAL:H	2	0.21
(2,388)	1:A:64:ARG:HD2	1:A:68:GLU:H	1	0.21
(2,388)	1:A:64:ARG:HD3	1:A:68:GLU:H	1	0.21
(2,388)	1:A:66:ASP:HB2	1:A:68:GLU:H	1	0.21
(2,388)	1:A:66:ASP:HB3	1:A:68:GLU:H	1	0.21
(2,375)	1:A:48:GLU:HB2	1:A:61:VAL:H	9	0.21
(2,375)	1:A:48:GLU:HB3	1:A:61:VAL:H	9	0.21
(2,375)	1:A:60:PRO:HD3	1:A:61:VAL:H	9	0.21
(2,365)	1:A:69:ASN:HA	1:A:70:ASP:H	6	0.21
(2,365)	1:A:70:ASP:HA	1:A:70:ASP:H	6	0.21
(2,365)	1:A:69:ASN:HA	1:A:70:ASP:H	8	0.21
(2,365)	1:A:70:ASP:HA	1:A:70:ASP:H	8	0.21
(2,361)	1:A:49:ILE:HG21	1:A:64:ARG:H	7	0.21
(2,361)	1:A:49:ILE:HG22	1:A:64:ARG:H	7	0.21
(2,361)	1:A:49:ILE:HG23	1:A:64:ARG:H	7	0.21
(2,361)	1:A:59:ILE:HD11	1:A:64:ARG:H	7	0.21
(2,361)	1:A:59:ILE:HD12	1:A:64:ARG:H	7	0.21
(2,361)	1:A:59:ILE:HD13	1:A:64:ARG:H	7	0.21
(2,361)	1:A:61:VAL:HG11	1:A:64:ARG:H	7	0.21
(2,361)	1:A:61:VAL:HG12	1:A:64:ARG:H	7	0.21
(2,361)	1:A:61:VAL:HG13	1:A:64:ARG:H	7	0.21
(2,361)	1:A:61:VAL:HG21	1:A:64:ARG:H	7	0.21
(2,361)	1:A:61:VAL:HG21	1:A:64:ARG:H	7	0.21
(2,361)	1:A:61:VAL:HG22	1:A:64:ARG:H	7	0.21
(2,361)	1:A:61:VAL:HG22	1:A:64:ARG:H	7	0.21
(2,361)	1:A:61:VAL:HG23	1:A:64:ARG:H	7	0.21
(2,361)	1:A:61:VAL:HG23	1:A:64:ARG:H	7	0.21
(2,351)	1:A:12:ASN:HB2	1:A:12:ASN:H	1	0.21
(2,351)	1:A:12:ASN:HB3	1:A:12:ASN:H	1	0.21
(2,351)	1:A:13:GLY:HA2	1:A:12:ASN:H	1	0.21
(2,351)	1:A:13:GLY:HA3	1:A:12:ASN:H	1	0.21
(2,351)	1:A:12:ASN:HB2	1:A:12:ASN:H	3	0.21

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,351)	1:A:12:ASN:HB3	1:A:12:ASN:H	3	0.21
(2,351)	1:A:13:GLY:HA2	1:A:12:ASN:H	3	0.21
(2,351)	1:A:13:GLY:HA3	1:A:12:ASN:H	3	0.21
(2,351)	1:A:12:ASN:HB2	1:A:12:ASN:H	13	0.21
(2,351)	1:A:12:ASN:HB3	1:A:12:ASN:H	13	0.21
(2,351)	1:A:13:GLY:HA2	1:A:12:ASN:H	13	0.21
(2,351)	1:A:13:GLY:HA3	1:A:12:ASN:H	13	0.21
(2,351)	1:A:12:ASN:HB2	1:A:12:ASN:H	18	0.21
(2,351)	1:A:12:ASN:HB3	1:A:12:ASN:H	18	0.21
(2,351)	1:A:13:GLY:HA2	1:A:12:ASN:H	18	0.21
(2,351)	1:A:13:GLY:HA3	1:A:12:ASN:H	18	0.21
(2,351)	1:A:12:ASN:HB2	1:A:12:ASN:H	20	0.21
(2,351)	1:A:12:ASN:HB3	1:A:12:ASN:H	20	0.21
(2,351)	1:A:13:GLY:HA2	1:A:12:ASN:H	20	0.21
(2,351)	1:A:13:GLY:HA3	1:A:12:ASN:H	20	0.21
(2,345)	1:A:84:THR:HG1	1:A:85:CYS:H	6	0.21
(2,345)	1:A:84:THR:HG21	1:A:85:CYS:H	6	0.21
(2,345)	1:A:84:THR:HG22	1:A:85:CYS:H	6	0.21
(2,345)	1:A:84:THR:HG23	1:A:85:CYS:H	6	0.21
(2,345)	1:A:91:THR:HG21	1:A:85:CYS:H	6	0.21
(2,345)	1:A:91:THR:HG22	1:A:85:CYS:H	6	0.21
(2,345)	1:A:91:THR:HG23	1:A:85:CYS:H	6	0.21
(2,32)	1:A:69:ASN:HB2	1:A:70:ASP:H	15	0.21
(2,32)	1:A:69:ASN:HB3	1:A:70:ASP:H	15	0.21
(2,32)	1:A:70:ASP:HB2	1:A:70:ASP:H	15	0.21
(2,32)	1:A:70:ASP:HB3	1:A:70:ASP:H	15	0.21
(2,32)	1:A:76:ASP:HB2	1:A:70:ASP:H	15	0.21
(2,32)	1:A:76:ASP:HB3	1:A:70:ASP:H	15	0.21
(2,303)	1:A:75:GLU:HB2	1:A:77:GLU:H	3	0.21
(2,303)	1:A:75:GLU:HB3	1:A:77:GLU:H	3	0.21
(2,303)	1:A:77:GLU:HG2	1:A:77:GLU:H	3	0.21
(2,303)	1:A:77:GLU:HG3	1:A:77:GLU:H	3	0.21
(2,303)	1:A:78:GLU:HB2	1:A:77:GLU:H	3	0.21
(2,303)	1:A:78:GLU:HB3	1:A:77:GLU:H	3	0.21
(2,303)	1:A:87:PRO:HG2	1:A:77:GLU:H	3	0.21
(2,303)	1:A:87:PRO:HG3	1:A:77:GLU:H	3	0.21
(2,303)	1:A:75:GLU:HB2	1:A:77:GLU:H	19	0.21
(2,303)	1:A:75:GLU:HB3	1:A:77:GLU:H	19	0.21
(2,303)	1:A:77:GLU:HG2	1:A:77:GLU:H	19	0.21
(2,303)	1:A:77:GLU:HG3	1:A:77:GLU:H	19	0.21
(2,303)	1:A:78:GLU:HB2	1:A:77:GLU:H	19	0.21
(2,303)	1:A:78:GLU:HB3	1:A:77:GLU:H	19	0.21

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,303)	1:A:87:PRO:HG2	1:A:77:GLU:H	19	0.21
(2,303)	1:A:87:PRO:HG3	1:A:77:GLU:H	19	0.21
(2,300)	1:A:44:CYS:HB2	1:A:48:GLU:H	7	0.21
(2,300)	1:A:44:CYS:HB3	1:A:48:GLU:H	7	0.21
(2,300)	1:A:48:GLU:HG2	1:A:48:GLU:H	7	0.21
(2,300)	1:A:48:GLU:HG3	1:A:48:GLU:H	7	0.21
(2,296)	1:A:113:GLY:HA2	1:A:117:LEU:H	3	0.21
(2,296)	1:A:113:GLY:HA3	1:A:117:LEU:H	3	0.21
(2,296)	1:A:114:SER:HB2	1:A:117:LEU:H	3	0.21
(2,296)	1:A:114:SER:HB3	1:A:117:LEU:H	3	0.21
(2,292)	1:A:3:CYS:HB2	1:A:8:PHE:H	9	0.21
(2,292)	1:A:3:CYS:HB3	1:A:8:PHE:H	9	0.21
(2,292)	1:A:7:ASP:HB2	1:A:8:PHE:H	9	0.21
(2,292)	1:A:7:ASP:HB3	1:A:8:PHE:H	9	0.21
(2,292)	1:A:8:PHE:HB2	1:A:8:PHE:H	9	0.21
(2,292)	1:A:8:PHE:HB3	1:A:8:PHE:H	9	0.21
(2,292)	1:A:3:CYS:HB2	1:A:8:PHE:H	12	0.21
(2,292)	1:A:3:CYS:HB3	1:A:8:PHE:H	12	0.21
(2,292)	1:A:7:ASP:HB2	1:A:8:PHE:H	12	0.21
(2,292)	1:A:7:ASP:HB3	1:A:8:PHE:H	12	0.21
(2,292)	1:A:8:PHE:HB2	1:A:8:PHE:H	12	0.21
(2,292)	1:A:8:PHE:HB3	1:A:8:PHE:H	12	0.21
(2,279)	1:A:10:CYS:HA	1:A:11:ASN:H	12	0.21
(2,279)	1:A:11:ASN:HA	1:A:11:ASN:H	12	0.21
(2,277)	1:A:19:ARG:HG2	1:A:19:ARG:H	3	0.21
(2,277)	1:A:19:ARG:HG2	1:A:19:ARG:H	3	0.21
(2,277)	1:A:19:ARG:HG3	1:A:19:ARG:H	3	0.21
(2,277)	1:A:19:ARG:HG3	1:A:19:ARG:H	3	0.21
(2,277)	1:A:21:LYS:HD2	1:A:19:ARG:H	3	0.21
(2,277)	1:A:19:ARG:HG2	1:A:19:ARG:H	11	0.21
(2,277)	1:A:19:ARG:HG2	1:A:19:ARG:H	11	0.21
(2,277)	1:A:19:ARG:HG3	1:A:19:ARG:H	11	0.21
(2,277)	1:A:19:ARG:HG3	1:A:19:ARG:H	11	0.21
(2,277)	1:A:21:LYS:HD2	1:A:19:ARG:H	11	0.21
(2,272)	1:A:19:ARG:HD2	1:A:19:ARG:H	12	0.21
(2,272)	1:A:19:ARG:HD3	1:A:19:ARG:H	12	0.21
(2,272)	1:A:20:TRP:HB2	1:A:19:ARG:H	12	0.21
(2,272)	1:A:20:TRP:HB3	1:A:19:ARG:H	12	0.21
(2,263)	1:A:62:SER:HB2	1:A:63:TRP:H	16	0.21
(2,263)	1:A:62:SER:HB3	1:A:63:TRP:H	16	0.21
(2,263)	1:A:63:TRP:HB2	1:A:63:TRP:H	16	0.21
(2,263)	1:A:62:SER:HB2	1:A:63:TRP:H	18	0.21

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,263)	1:A:62:SER:HB3	1:A:63:TRP:H	18	0.21
(2,263)	1:A:63:TRP:HB2	1:A:63:TRP:H	18	0.21
(2,261)	1:A:110:CYS:HB2	1:A:110:CYS:H	10	0.21
(2,261)	1:A:110:CYS:HB3	1:A:110:CYS:H	10	0.21
(2,261)	1:A:111:SER:HB2	1:A:110:CYS:H	10	0.21
(2,261)	1:A:113:GLY:HA2	1:A:110:CYS:H	10	0.21
(2,261)	1:A:113:GLY:HA3	1:A:110:CYS:H	10	0.21
(2,22)	1:A:75:GLU:HA	1:A:78:GLU:H	10	0.21
(2,22)	1:A:87:PRO:HD2	1:A:78:GLU:H	10	0.21
(2,178)	1:A:59:ILE:HD11	1:A:57:GLN:HE22	20	0.21
(2,178)	1:A:59:ILE:HD12	1:A:57:GLN:HE22	20	0.21
(2,178)	1:A:59:ILE:HD13	1:A:57:GLN:HE22	20	0.21
(2,178)	1:A:59:ILE:HG21	1:A:57:GLN:HE22	20	0.21
(2,178)	1:A:59:ILE:HG22	1:A:57:GLN:HE22	20	0.21
(2,178)	1:A:59:ILE:HG23	1:A:57:GLN:HE22	20	0.21
(2,156)	1:A:51:CYS:HB2	1:A:71:CYS:H	1	0.21
(2,156)	1:A:51:CYS:HB3	1:A:71:CYS:H	1	0.21
(2,156)	1:A:71:CYS:HB2	1:A:71:CYS:H	1	0.21
(2,156)	1:A:71:CYS:HB3	1:A:71:CYS:H	1	0.21
(2,156)	1:A:51:CYS:HB2	1:A:71:CYS:H	3	0.21
(2,156)	1:A:51:CYS:HB3	1:A:71:CYS:H	3	0.21
(2,156)	1:A:71:CYS:HB2	1:A:71:CYS:H	3	0.21
(2,156)	1:A:71:CYS:HB3	1:A:71:CYS:H	3	0.21
(2,134)	1:A:79:ASN:HB2	1:A:85:CYS:H	15	0.21
(2,134)	1:A:79:ASN:HB3	1:A:85:CYS:H	15	0.21
(2,134)	1:A:97:CYS:HB2	1:A:85:CYS:H	15	0.21
(2,134)	1:A:97:CYS:HB3	1:A:85:CYS:H	15	0.21
(2,132)	1:A:45:ARG:HB2	1:A:45:ARG:H	6	0.21
(2,132)	1:A:45:ARG:HB3	1:A:45:ARG:H	6	0.21
(2,132)	1:A:46:ILE:HG12	1:A:45:ARG:H	6	0.21
(2,132)	1:A:46:ILE:HG13	1:A:45:ARG:H	6	0.21
(2,124)	1:A:43:THR:HG1	1:A:57:GLN:H	7	0.21
(2,124)	1:A:43:THR:HG1	1:A:57:GLN:H	7	0.21
(2,124)	1:A:43:THR:HG21	1:A:57:GLN:H	7	0.21
(2,124)	1:A:43:THR:HG21	1:A:57:GLN:H	7	0.21
(2,124)	1:A:43:THR:HG22	1:A:57:GLN:H	7	0.21
(2,124)	1:A:43:THR:HG22	1:A:57:GLN:H	7	0.21
(2,124)	1:A:43:THR:HG23	1:A:57:GLN:H	7	0.21
(2,124)	1:A:43:THR:HG23	1:A:57:GLN:H	7	0.21
(2,124)	1:A:56:THR:HG1	1:A:57:GLN:H	7	0.21
(2,124)	1:A:56:THR:HG21	1:A:57:GLN:H	7	0.21
(2,124)	1:A:56:THR:HG21	1:A:57:GLN:H	7	0.21

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,124)	1:A:56:THR:HG22	1:A:57:GLN:H	7	0.21
(2,124)	1:A:56:THR:HG22	1:A:57:GLN:H	7	0.21
(2,124)	1:A:56:THR:HG23	1:A:57:GLN:H	7	0.21
(2,124)	1:A:56:THR:HG23	1:A:57:GLN:H	7	0.21
(2,123)	1:A:16:VAL:HG11	1:A:33:ASP:H	7	0.21
(2,123)	1:A:16:VAL:HG12	1:A:33:ASP:H	7	0.21
(2,123)	1:A:16:VAL:HG13	1:A:33:ASP:H	7	0.21
(2,123)	1:A:16:VAL:HG21	1:A:33:ASP:H	7	0.21
(2,123)	1:A:16:VAL:HG22	1:A:33:ASP:H	7	0.21
(2,123)	1:A:16:VAL:HG23	1:A:33:ASP:H	7	0.21
(2,110)	1:A:17:PRO:HB2	1:A:19:ARG:H	13	0.21
(2,110)	1:A:17:PRO:HB3	1:A:19:ARG:H	13	0.21
(2,110)	1:A:19:ARG:HB2	1:A:19:ARG:H	13	0.21
(2,110)	1:A:19:ARG:HB3	1:A:19:ARG:H	13	0.21
(2,110)	1:A:17:PRO:HB2	1:A:19:ARG:H	15	0.21
(2,110)	1:A:17:PRO:HB3	1:A:19:ARG:H	15	0.21
(2,110)	1:A:19:ARG:HB2	1:A:19:ARG:H	15	0.21
(2,110)	1:A:19:ARG:HB3	1:A:19:ARG:H	15	0.21
(2,110)	1:A:17:PRO:HB2	1:A:19:ARG:H	20	0.21
(2,110)	1:A:17:PRO:HB3	1:A:19:ARG:H	20	0.21
(2,110)	1:A:19:ARG:HB2	1:A:19:ARG:H	20	0.21
(2,110)	1:A:19:ARG:HB3	1:A:19:ARG:H	20	0.21
(2,108)	1:A:92:CYS:H	1:A:95:GLY:H	4	0.21
(2,108)	1:A:93:SER:H	1:A:95:GLY:H	4	0.21
(2,104)	1:A:63:TRP:HB2	1:A:80:CYS:H	4	0.21
(2,104)	1:A:63:TRP:HB3	1:A:80:CYS:H	4	0.21
(2,104)	1:A:80:CYS:HB3	1:A:80:CYS:H	4	0.21
(1,96)	1:A:100:ARG:H	1:A:89:GLU:HA	12	0.21
(1,92)	1:A:7:ASP:HB2	1:A:8:PHE:H	9	0.21
(1,92)	1:A:7:ASP:HB3	1:A:8:PHE:H	9	0.21
(1,917)	1:A:28:CYS:H	1:A:14:GLN:HG2	1	0.21
(1,91)	1:A:14:GLN:HG2	1:A:15:CYS:H	5	0.21
(1,91)	1:A:14:GLN:HG3	1:A:15:CYS:H	5	0.21
(1,909)	1:A:43:THR:HG1	1:A:46:ILE:H	5	0.21
(1,909)	1:A:43:THR:HG21	1:A:46:ILE:H	5	0.21
(1,909)	1:A:43:THR:HG22	1:A:46:ILE:H	5	0.21
(1,909)	1:A:43:THR:HG23	1:A:46:ILE:H	5	0.21
(1,905)	1:A:101:ASN:HD21	1:A:105:ASN:HD21	1	0.21
(1,890)	1:A:81:GLY:HA2	1:A:63:TRP:HE1	2	0.21
(1,890)	1:A:81:GLY:HA2	1:A:63:TRP:HE1	2	0.21
(1,890)	1:A:81:GLY:HA3	1:A:63:TRP:HE1	2	0.21
(1,890)	1:A:81:GLY:HA3	1:A:63:TRP:HE1	2	0.21

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,886)	1:A:51:CYS:H	1:A:58:CYS:H	4	0.21
(1,886)	1:A:51:CYS:H	1:A:58:CYS:H	15	0.21
(1,869)	1:A:14:GLN:HE22	1:A:28:CYS:H	8	0.21
(1,863)	1:A:17:PRO:HD2	1:A:20:TRP:HE1	7	0.21
(1,863)	1:A:17:PRO:HD3	1:A:20:TRP:HE1	7	0.21
(1,863)	1:A:17:PRO:HD2	1:A:20:TRP:HE1	13	0.21
(1,863)	1:A:17:PRO:HD3	1:A:20:TRP:HE1	13	0.21
(1,856)	1:A:14:GLN:H	1:A:12:ASN:HD22	5	0.21
(1,851)	1:A:32:SER:H	1:A:11:ASN:HD22	17	0.21
(1,849)	1:A:33:ASP:H	1:A:11:ASN:H	16	0.21
(1,844)	1:A:79:ASN:HB2	1:A:92:CYS:H	18	0.21
(1,844)	1:A:79:ASN:HB3	1:A:92:CYS:H	18	0.21
(1,842)	1:A:80:CYS:HA	1:A:84:THR:H	3	0.21
(1,842)	1:A:80:CYS:HA	1:A:84:THR:H	10	0.21
(1,842)	1:A:80:CYS:HA	1:A:84:THR:H	18	0.21
(1,840)	1:A:71:CYS:HB2	1:A:77:GLU:H	6	0.21
(1,840)	1:A:71:CYS:HB3	1:A:77:GLU:H	6	0.21
(1,822)	1:A:113:GLY:HA2	1:A:116:GLU:H	3	0.21
(1,822)	1:A:113:GLY:HA3	1:A:116:GLU:H	3	0.21
(1,809)	1:A:106:GLY:H	1:A:104:CYS:H	6	0.21
(1,809)	1:A:106:GLY:H	1:A:104:CYS:H	10	0.21
(1,801)	1:A:102:PHE:HB2	1:A:98:ILE:H	9	0.21
(1,801)	1:A:102:PHE:HB3	1:A:98:ILE:H	9	0.21
(1,797)	1:A:91:THR:HG1	1:A:96:ARG:H	12	0.21
(1,797)	1:A:91:THR:HG21	1:A:96:ARG:H	12	0.21
(1,797)	1:A:91:THR:HG22	1:A:96:ARG:H	12	0.21
(1,797)	1:A:91:THR:HG23	1:A:96:ARG:H	12	0.21
(1,791)	1:A:85:CYS:HB2	1:A:89:GLU:H	6	0.21
(1,791)	1:A:85:CYS:HB3	1:A:89:GLU:H	6	0.21
(1,789)	1:A:85:CYS:H	1:A:84:THR:HB	15	0.21
(1,789)	1:A:85:CYS:H	1:A:84:THR:HB	16	0.21
(1,788)	1:A:80:CYS:H	1:A:78:GLU:H	15	0.21
(1,786)	1:A:71:CYS:H	1:A:76:ASP:H	14	0.21
(1,776)	1:A:77:GLU:HG2	1:A:70:ASP:H	8	0.21
(1,776)	1:A:77:GLU:HG3	1:A:70:ASP:H	8	0.21
(1,772)	1:A:68:GLU:H	1:A:64:ARG:H	17	0.21
(1,768)	1:A:58:CYS:HA	1:A:59:ILE:H	2	0.21
(1,761)	1:A:72:ASP:H	1:A:57:GLN:HE21	18	0.21
(1,759)	1:A:57:GLN:HE21	1:A:71:CYS:HA	10	0.21
(1,734)	1:A:32:SER:H	1:A:11:ASN:H	17	0.21
(1,724)	1:A:34:GLU:HB2	1:A:25:ASP:H	6	0.21
(1,724)	1:A:34:GLU:HB3	1:A:25:ASP:H	6	0.21

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,712)	1:A:32:SER:H	1:A:11:ASN:H	17	0.21
(1,705)	1:A:100:ARG:H	1:A:100:ARG:HD2	16	0.21
(1,705)	1:A:100:ARG:H	1:A:100:ARG:HD3	16	0.21
(1,698)	1:A:64:ARG:H	1:A:64:ARG:HG2	9	0.21
(1,698)	1:A:64:ARG:H	1:A:64:ARG:HG3	9	0.21
(1,698)	1:A:64:ARG:H	1:A:64:ARG:HG2	14	0.21
(1,698)	1:A:64:ARG:H	1:A:64:ARG:HG3	14	0.21
(1,694)	1:A:21:LYS:HE2	1:A:21:LYS:H	10	0.21
(1,694)	1:A:21:LYS:HE3	1:A:21:LYS:H	10	0.21
(1,687)	1:A:69:ASN:HD21	1:A:74:GLY:H	6	0.21
(1,686)	1:A:74:GLY:H	1:A:69:ASN:HD22	17	0.21
(1,679)	1:A:78:GLU:HG2	1:A:79:ASN:HD22	1	0.21
(1,679)	1:A:78:GLU:HG3	1:A:79:ASN:HD22	1	0.21
(1,645)	1:A:101:ASN:HD22	1:A:101:ASN:H	2	0.21
(1,639)	1:A:82:ASN:H	1:A:82:ASN:HD21	13	0.21
(1,639)	1:A:82:ASN:H	1:A:82:ASN:HD21	19	0.21
(1,628)	1:A:71:CYS:HB2	1:A:57:GLN:HE22	3	0.21
(1,628)	1:A:71:CYS:HB3	1:A:57:GLN:HE22	3	0.21
(1,628)	1:A:71:CYS:HB2	1:A:57:GLN:HE22	11	0.21
(1,628)	1:A:71:CYS:HB3	1:A:57:GLN:HE22	11	0.21
(1,628)	1:A:71:CYS:HB2	1:A:57:GLN:HE22	16	0.21
(1,628)	1:A:71:CYS:HB3	1:A:57:GLN:HE22	16	0.21
(1,626)	1:A:71:CYS:HA	1:A:57:GLN:HE22	14	0.21
(1,612)	1:A:15:CYS:H	1:A:14:GLN:HE22	2	0.21
(1,603)	1:A:32:SER:HB2	1:A:11:ASN:HD22	17	0.21
(1,603)	1:A:32:SER:HB3	1:A:11:ASN:HD22	17	0.21
(1,6)	1:A:23:ASP:H	1:A:24:GLY:H	8	0.21
(1,598)	1:A:74:GLY:HA2	1:A:69:ASN:HD22	6	0.21
(1,598)	1:A:74:GLY:HA3	1:A:69:ASN:HD22	6	0.21
(1,597)	1:A:74:GLY:HA2	1:A:69:ASN:HD22	6	0.21
(1,597)	1:A:74:GLY:HA3	1:A:69:ASN:HD22	6	0.21
(1,585)	1:A:28:CYS:H	1:A:27:ASP:H	10	0.21
(1,585)	1:A:28:CYS:H	1:A:27:ASP:H	14	0.21
(1,569)	1:A:85:CYS:H	1:A:84:THR:H	2	0.21
(1,569)	1:A:85:CYS:H	1:A:84:THR:H	4	0.21
(1,569)	1:A:85:CYS:H	1:A:84:THR:H	10	0.21
(1,569)	1:A:85:CYS:H	1:A:84:THR:H	11	0.21
(1,562)	1:A:102:PHE:HB2	1:A:99:SER:H	2	0.21
(1,562)	1:A:102:PHE:HB3	1:A:99:SER:H	2	0.21
(1,562)	1:A:102:PHE:HB2	1:A:99:SER:H	20	0.21
(1,562)	1:A:102:PHE:HB3	1:A:99:SER:H	20	0.21
(1,560)	1:A:90:PHE:H	1:A:99:SER:H	14	0.21

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,560)	1:A:90:PHE:H	1:A:99:SER:H	19	0.21
(1,553)	1:A:115:ASP:HB2	1:A:104:CYS:H	13	0.21
(1,553)	1:A:115:ASP:HB3	1:A:104:CYS:H	13	0.21
(1,55)	1:A:71:CYS:H	1:A:70:ASP:H	3	0.21
(1,545)	1:A:103:VAL:HA	1:A:105:ASN:H	3	0.21
(1,541)	1:A:115:ASP:HB2	1:A:116:GLU:H	4	0.21
(1,541)	1:A:115:ASP:HB3	1:A:116:GLU:H	4	0.21
(1,534)	1:A:77:GLU:HB2	1:A:77:GLU:H	5	0.21
(1,534)	1:A:77:GLU:HB3	1:A:77:GLU:H	5	0.21
(1,518)	1:A:49:ILE:H	1:A:61:VAL:H	17	0.21
(1,516)	1:A:49:ILE:H	1:A:59:ILE:H	1	0.21
(1,510)	1:A:48:GLU:HB2	1:A:48:GLU:H	4	0.21
(1,510)	1:A:48:GLU:HB3	1:A:48:GLU:H	4	0.21
(1,510)	1:A:48:GLU:HB2	1:A:48:GLU:H	12	0.21
(1,510)	1:A:48:GLU:HB3	1:A:48:GLU:H	12	0.21
(1,504)	1:A:39:CYS:HB2	1:A:39:CYS:H	4	0.21
(1,504)	1:A:39:CYS:HB3	1:A:39:CYS:H	4	0.21
(1,499)	1:A:33:ASP:HB2	1:A:33:ASP:H	15	0.21
(1,499)	1:A:33:ASP:HB3	1:A:33:ASP:H	15	0.21
(1,499)	1:A:33:ASP:HB2	1:A:33:ASP:H	20	0.21
(1,499)	1:A:33:ASP:HB3	1:A:33:ASP:H	20	0.21
(1,49)	1:A:94:SER:H	1:A:93:SER:H	1	0.21
(1,486)	1:A:7:ASP:HA	1:A:19:ARG:H	6	0.21
(1,483)	1:A:10:CYS:HB2	1:A:14:GLN:H	11	0.21
(1,483)	1:A:10:CYS:HB3	1:A:14:GLN:H	11	0.21
(1,482)	1:A:11:ASN:HD21	1:A:11:ASN:H	8	0.21
(1,482)	1:A:11:ASN:HD21	1:A:11:ASN:H	20	0.21
(1,462)	1:A:79:ASN:H	1:A:78:GLU:H	14	0.21
(1,460)	1:A:74:GLY:HA2	1:A:77:GLU:H	13	0.21
(1,460)	1:A:74:GLY:HA3	1:A:77:GLU:H	13	0.21
(1,445)	1:A:75:GLU:H	1:A:74:GLY:H	15	0.21
(1,443)	1:A:73:SER:H	1:A:71:CYS:HB2	3	0.21
(1,443)	1:A:73:SER:H	1:A:71:CYS:HB3	3	0.21
(1,443)	1:A:73:SER:H	1:A:71:CYS:HB2	5	0.21
(1,443)	1:A:73:SER:H	1:A:71:CYS:HB3	5	0.21
(1,443)	1:A:73:SER:H	1:A:71:CYS:HB2	16	0.21
(1,443)	1:A:73:SER:H	1:A:71:CYS:HB3	16	0.21
(1,415)	1:A:64:ARG:HA	1:A:65:CYS:H	2	0.21
(1,415)	1:A:64:ARG:HA	1:A:65:CYS:H	5	0.21
(1,415)	1:A:64:ARG:HA	1:A:65:CYS:H	10	0.21
(1,415)	1:A:64:ARG:HA	1:A:65:CYS:H	18	0.21
(1,414)	1:A:63:TRP:H	1:A:63:TRP:HB2	11	0.21

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,414)	1:A:63:TRP:H	1:A:63:TRP:HB3	11	0.21
(1,390)	1:A:51:CYS:HB2	1:A:52:GLY:H	9	0.21
(1,390)	1:A:51:CYS:HB3	1:A:52:GLY:H	9	0.21
(1,386)	1:A:51:CYS:HB2	1:A:51:CYS:H	7	0.21
(1,386)	1:A:51:CYS:HB3	1:A:51:CYS:H	7	0.21
(1,386)	1:A:51:CYS:HB2	1:A:51:CYS:H	17	0.21
(1,386)	1:A:51:CYS:HB3	1:A:51:CYS:H	17	0.21
(1,383)	1:A:51:CYS:H	1:A:50:SER:HA	12	0.21
(1,372)	1:A:48:GLU:H	1:A:48:GLU:HA	6	0.21
(1,372)	1:A:48:GLU:H	1:A:48:GLU:HA	7	0.21
(1,372)	1:A:48:GLU:H	1:A:48:GLU:HA	13	0.21
(1,367)	1:A:42:ARG:HG2	1:A:43:THR:H	1	0.21
(1,367)	1:A:42:ARG:HG2	1:A:43:THR:H	1	0.21
(1,367)	1:A:42:ARG:HG3	1:A:43:THR:H	1	0.21
(1,367)	1:A:42:ARG:HG3	1:A:43:THR:H	1	0.21
(1,343)	1:A:28:CYS:HB2	1:A:28:CYS:H	3	0.21
(1,343)	1:A:28:CYS:HB3	1:A:28:CYS:H	3	0.21
(1,328)	1:A:22:CYS:HB2	1:A:22:CYS:H	1	0.21
(1,328)	1:A:22:CYS:HB3	1:A:22:CYS:H	1	0.21
(1,328)	1:A:22:CYS:HB2	1:A:22:CYS:H	17	0.21
(1,328)	1:A:22:CYS:HB3	1:A:22:CYS:H	17	0.21
(1,323)	1:A:64:ARG:H	1:A:80:CYS:HB2	15	0.21
(1,323)	1:A:64:ARG:H	1:A:80:CYS:HB3	15	0.21
(1,320)	1:A:7:ASP:HA	1:A:18:SER:H	16	0.21
(1,319)	1:A:16:VAL:H	1:A:9:VAL:HA	9	0.21
(1,312)	1:A:14:GLN:HG2	1:A:14:GLN:H	6	0.21
(1,312)	1:A:14:GLN:HG3	1:A:14:GLN:H	6	0.21
(1,312)	1:A:14:GLN:HG2	1:A:14:GLN:H	12	0.21
(1,312)	1:A:14:GLN:HG3	1:A:14:GLN:H	12	0.21
(1,308)	1:A:13:GLY:H	1:A:14:GLN:H	3	0.21
(1,308)	1:A:13:GLY:H	1:A:14:GLN:H	4	0.21
(1,308)	1:A:13:GLY:H	1:A:14:GLN:H	8	0.21
(1,308)	1:A:13:GLY:H	1:A:14:GLN:H	18	0.21
(1,290)	1:A:8:PHE:HA	1:A:9:VAL:H	9	0.21
(1,290)	1:A:8:PHE:HA	1:A:9:VAL:H	14	0.21
(1,290)	1:A:8:PHE:HA	1:A:9:VAL:H	16	0.21
(1,286)	1:A:7:ASP:HB2	1:A:7:ASP:H	1	0.21
(1,286)	1:A:7:ASP:HB3	1:A:7:ASP:H	1	0.21
(1,286)	1:A:7:ASP:HB2	1:A:7:ASP:H	5	0.21
(1,286)	1:A:7:ASP:HB3	1:A:7:ASP:H	5	0.21
(1,283)	1:A:8:PHE:H	1:A:7:ASP:H	7	0.21
(1,283)	1:A:8:PHE:H	1:A:7:ASP:H	12	0.21

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,283)	1:A:8:PHE:H	1:A:7:ASP:H	15	0.21
(1,283)	1:A:8:PHE:H	1:A:7:ASP:H	19	0.21
(1,281)	1:A:5:GLU:HB2	1:A:6:SER:H	12	0.21
(1,281)	1:A:5:GLU:HB2	1:A:6:SER:H	12	0.21
(1,281)	1:A:5:GLU:HB3	1:A:6:SER:H	12	0.21
(1,281)	1:A:5:GLU:HB3	1:A:6:SER:H	12	0.21
(1,28)	1:A:118:ASP:H	1:A:117:LEU:H	6	0.21
(1,273)	1:A:7:ASP:HB2	1:A:4:ALA:H	6	0.21
(1,273)	1:A:7:ASP:HB3	1:A:4:ALA:H	6	0.21
(1,248)	1:A:83:ILE:HB	1:A:84:THR:H	2	0.21
(1,232)	1:A:95:GLY:H	1:A:92:CYS:H	4	0.21
(1,226)	1:A:92:CYS:HB2	1:A:94:SER:H	7	0.21
(1,226)	1:A:92:CYS:HB3	1:A:94:SER:H	7	0.21
(1,205)	1:A:98:ILE:HG12	1:A:98:ILE:H	1	0.21
(1,205)	1:A:98:ILE:HG13	1:A:98:ILE:H	1	0.21
(1,205)	1:A:98:ILE:HG12	1:A:98:ILE:H	17	0.21
(1,205)	1:A:98:ILE:HG13	1:A:98:ILE:H	17	0.21
(1,204)	1:A:98:ILE:HG12	1:A:98:ILE:H	4	0.21
(1,204)	1:A:98:ILE:HG13	1:A:98:ILE:H	4	0.21
(1,204)	1:A:98:ILE:HG12	1:A:98:ILE:H	7	0.21
(1,204)	1:A:98:ILE:HG13	1:A:98:ILE:H	7	0.21
(1,204)	1:A:98:ILE:HG12	1:A:98:ILE:H	12	0.21
(1,204)	1:A:98:ILE:HG13	1:A:98:ILE:H	12	0.21
(1,184)	1:A:103:VAL:HB	1:A:102:PHE:H	13	0.21
(1,180)	1:A:99:SER:HB2	1:A:102:PHE:H	12	0.21
(1,180)	1:A:99:SER:HB3	1:A:102:PHE:H	12	0.21
(1,17)	1:A:81:GLY:H	1:A:80:CYS:H	6	0.21
(1,15)	1:A:109:ASP:H	1:A:110:CYS:H	15	0.21
(1,14)	1:A:110:CYS:H	1:A:109:ASP:H	9	0.21
(1,136)	1:A:112:ASP:H	1:A:110:CYS:H	6	0.21
(1,128)	1:A:114:SER:HA	1:A:114:SER:H	2	0.21
(1,128)	1:A:114:SER:HA	1:A:114:SER:H	6	0.21
(1,128)	1:A:114:SER:HA	1:A:114:SER:H	17	0.21
(1,128)	1:A:114:SER:HA	1:A:114:SER:H	19	0.21
(1,123)	1:A:115:ASP:HB2	1:A:115:ASP:H	4	0.21
(1,123)	1:A:115:ASP:HB3	1:A:115:ASP:H	4	0.21
(1,123)	1:A:115:ASP:HB2	1:A:115:ASP:H	7	0.21
(1,123)	1:A:115:ASP:HB3	1:A:115:ASP:H	7	0.21
(1,116)	1:A:116:GLU:HG2	1:A:116:GLU:H	5	0.21
(1,116)	1:A:116:GLU:HG3	1:A:116:GLU:H	5	0.21
(1,109)	1:A:119:CYS:H	1:A:117:LEU:HG	3	0.21
(1,109)	1:A:119:CYS:H	1:A:117:LEU:HG	7	0.21

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,109)	1:A:119:CYS:H	1:A:117:LEU:HG	20	0.21
(4,7)	1:A:8:PHE:H	1:A:16:VAL:O	11	0.2
(4,6)	1:A:51:CYS:H	1:A:57:GLN:O	12	0.2
(4,5)	1:A:49:ILE:O	1:A:59:ILE:H	9	0.2
(3,7)	2:A:202:CA:CA	1:A:63:TRP:O	9	0.2
(2,98)	1:A:28:CYS:HB2	1:A:11:ASN:H	12	0.2
(2,98)	1:A:28:CYS:HB3	1:A:11:ASN:H	12	0.2
(2,98)	1:A:32:SER:HB2	1:A:11:ASN:H	12	0.2
(2,98)	1:A:32:SER:HB3	1:A:11:ASN:H	12	0.2
(2,91)	1:A:83:ILE:HD11	1:A:84:THR:H	20	0.2
(2,91)	1:A:83:ILE:HD12	1:A:84:THR:H	20	0.2
(2,91)	1:A:83:ILE:HD13	1:A:84:THR:H	20	0.2
(2,91)	1:A:83:ILE:HG21	1:A:84:THR:H	20	0.2
(2,91)	1:A:83:ILE:HG22	1:A:84:THR:H	20	0.2
(2,91)	1:A:83:ILE:HG23	1:A:84:THR:H	20	0.2
(2,89)	1:A:107:GLN:HB2	1:A:108:ASP:H	9	0.2
(2,89)	1:A:107:GLN:HB3	1:A:108:ASP:H	9	0.2
(2,72)	1:A:110:CYS:HB2	1:A:113:GLY:H	4	0.2
(2,72)	1:A:110:CYS:HB3	1:A:113:GLY:H	4	0.2
(2,72)	1:A:112:ASP:HB2	1:A:113:GLY:H	4	0.2
(2,72)	1:A:112:ASP:HB3	1:A:113:GLY:H	4	0.2
(2,70)	1:A:4:ALA:HB1	1:A:18:SER:H	6	0.2
(2,70)	1:A:4:ALA:HB2	1:A:18:SER:H	6	0.2
(2,70)	1:A:4:ALA:HB3	1:A:18:SER:H	6	0.2
(2,70)	1:A:19:ARG:HG2	1:A:18:SER:H	6	0.2
(2,70)	1:A:19:ARG:HG3	1:A:18:SER:H	6	0.2
(2,66)	1:A:4:ALA:H	1:A:7:ASP:H	1	0.2
(2,66)	1:A:5:GLU:H	1:A:7:ASP:H	1	0.2
(2,46)	1:A:114:SER:HG	1:A:115:ASP:H	10	0.2
(2,46)	1:A:116:GLU:HA	1:A:115:ASP:H	10	0.2
(2,46)	1:A:119:CYS:HA	1:A:115:ASP:H	10	0.2
(2,39)	1:A:98:ILE:HD11	1:A:115:ASP:H	8	0.2
(2,39)	1:A:98:ILE:HD12	1:A:115:ASP:H	8	0.2
(2,39)	1:A:98:ILE:HD13	1:A:115:ASP:H	8	0.2
(2,39)	1:A:117:LEU:HD11	1:A:115:ASP:H	8	0.2
(2,39)	1:A:117:LEU:HD12	1:A:115:ASP:H	8	0.2
(2,39)	1:A:117:LEU:HD13	1:A:115:ASP:H	8	0.2
(2,39)	1:A:117:LEU:HD21	1:A:115:ASP:H	8	0.2
(2,39)	1:A:117:LEU:HD22	1:A:115:ASP:H	8	0.2
(2,39)	1:A:117:LEU:HD23	1:A:115:ASP:H	8	0.2
(2,376)	1:A:61:VAL:HB	1:A:88:ASP:H	10	0.2
(2,376)	1:A:62:SER:H	1:A:88:ASP:H	10	0.2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,376)	1:A:87:PRO:HB2	1:A:88:ASP:H	10	0.2
(2,376)	1:A:87:PRO:HB3	1:A:88:ASP:H	10	0.2
(2,375)	1:A:48:GLU:HB2	1:A:61:VAL:H	10	0.2
(2,375)	1:A:48:GLU:HB3	1:A:61:VAL:H	10	0.2
(2,375)	1:A:60:PRO:HD3	1:A:61:VAL:H	10	0.2
(2,375)	1:A:48:GLU:HB2	1:A:61:VAL:H	12	0.2
(2,375)	1:A:48:GLU:HB3	1:A:61:VAL:H	12	0.2
(2,375)	1:A:60:PRO:HD3	1:A:61:VAL:H	12	0.2
(2,351)	1:A:12:ASN:HB2	1:A:12:ASN:H	11	0.2
(2,351)	1:A:12:ASN:HB3	1:A:12:ASN:H	11	0.2
(2,351)	1:A:13:GLY:HA2	1:A:12:ASN:H	11	0.2
(2,351)	1:A:13:GLY:HA3	1:A:12:ASN:H	11	0.2
(2,351)	1:A:12:ASN:HB2	1:A:12:ASN:H	12	0.2
(2,351)	1:A:12:ASN:HB3	1:A:12:ASN:H	12	0.2
(2,351)	1:A:13:GLY:HA2	1:A:12:ASN:H	12	0.2
(2,351)	1:A:13:GLY:HA3	1:A:12:ASN:H	12	0.2
(2,351)	1:A:12:ASN:HB2	1:A:12:ASN:H	15	0.2
(2,351)	1:A:12:ASN:HB3	1:A:12:ASN:H	15	0.2
(2,351)	1:A:13:GLY:HA2	1:A:12:ASN:H	15	0.2
(2,351)	1:A:13:GLY:HA3	1:A:12:ASN:H	15	0.2
(2,351)	1:A:12:ASN:HB2	1:A:12:ASN:H	19	0.2
(2,351)	1:A:12:ASN:HB3	1:A:12:ASN:H	19	0.2
(2,351)	1:A:13:GLY:HA2	1:A:12:ASN:H	19	0.2
(2,351)	1:A:13:GLY:HA3	1:A:12:ASN:H	19	0.2
(2,349)	1:A:99:SER:HB2	1:A:101:ASN:H	12	0.2
(2,349)	1:A:99:SER:HB3	1:A:101:ASN:H	12	0.2
(2,349)	1:A:102:PHE:HB2	1:A:101:ASN:H	12	0.2
(2,349)	1:A:102:PHE:HB3	1:A:101:ASN:H	12	0.2
(2,349)	1:A:99:SER:HB2	1:A:101:ASN:H	15	0.2
(2,349)	1:A:99:SER:HB3	1:A:101:ASN:H	15	0.2
(2,349)	1:A:102:PHE:HB2	1:A:101:ASN:H	15	0.2
(2,349)	1:A:102:PHE:HB3	1:A:101:ASN:H	15	0.2
(2,345)	1:A:84:THR:HG1	1:A:85:CYS:H	7	0.2
(2,345)	1:A:84:THR:HG21	1:A:85:CYS:H	7	0.2
(2,345)	1:A:84:THR:HG22	1:A:85:CYS:H	7	0.2
(2,345)	1:A:84:THR:HG23	1:A:85:CYS:H	7	0.2
(2,345)	1:A:91:THR:HG21	1:A:85:CYS:H	7	0.2
(2,345)	1:A:91:THR:HG22	1:A:85:CYS:H	7	0.2
(2,345)	1:A:91:THR:HG23	1:A:85:CYS:H	7	0.2
(2,342)	1:A:17:PRO:HB2	1:A:20:TRP:HE1	19	0.2
(2,342)	1:A:17:PRO:HB3	1:A:20:TRP:HE1	19	0.2
(2,342)	1:A:19:ARG:HB2	1:A:20:TRP:HE1	19	0.2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,342)	1:A:19:ARG:HB3	1:A:20:TRP:HE1	19	0.2
(2,341)	1:A:78:GLU:HG2	1:A:78:GLU:H	11	0.2
(2,341)	1:A:78:GLU:HG3	1:A:78:GLU:H	11	0.2
(2,341)	1:A:87:PRO:HB2	1:A:78:GLU:H	11	0.2
(2,341)	1:A:87:PRO:HB3	1:A:78:GLU:H	11	0.2
(2,34)	1:A:3:CYS:HB2	1:A:16:VAL:H	14	0.2
(2,34)	1:A:3:CYS:HB3	1:A:16:VAL:H	14	0.2
(2,34)	1:A:15:CYS:HB2	1:A:16:VAL:H	14	0.2
(2,34)	1:A:15:CYS:HB3	1:A:16:VAL:H	14	0.2
(2,331)	1:A:2:THR:H	1:A:99:SER:H	3	0.2
(2,331)	1:A:3:CYS:H	1:A:99:SER:H	3	0.2
(2,331)	1:A:80:CYS:H	1:A:99:SER:H	3	0.2
(2,331)	1:A:81:GLY:H	1:A:99:SER:H	3	0.2
(2,331)	1:A:101:ASN:H	1:A:99:SER:H	3	0.2
(2,328)	1:A:49:ILE:HG21	1:A:62:SER:H	5	0.2
(2,328)	1:A:49:ILE:HG22	1:A:62:SER:H	5	0.2
(2,328)	1:A:49:ILE:HG23	1:A:62:SER:H	5	0.2
(2,328)	1:A:59:ILE:HD11	1:A:62:SER:H	5	0.2
(2,328)	1:A:59:ILE:HD12	1:A:62:SER:H	5	0.2
(2,328)	1:A:59:ILE:HD13	1:A:62:SER:H	5	0.2
(2,328)	1:A:60:PRO:HB2	1:A:62:SER:H	5	0.2
(2,328)	1:A:60:PRO:HB3	1:A:62:SER:H	5	0.2
(2,328)	1:A:61:VAL:HG11	1:A:62:SER:H	5	0.2
(2,328)	1:A:61:VAL:HG12	1:A:62:SER:H	5	0.2
(2,328)	1:A:61:VAL:HG13	1:A:62:SER:H	5	0.2
(2,328)	1:A:61:VAL:HG21	1:A:62:SER:H	5	0.2
(2,328)	1:A:61:VAL:HG21	1:A:62:SER:H	5	0.2
(2,328)	1:A:61:VAL:HG22	1:A:62:SER:H	5	0.2
(2,328)	1:A:61:VAL:HG22	1:A:62:SER:H	5	0.2
(2,328)	1:A:61:VAL:HG23	1:A:62:SER:H	5	0.2
(2,328)	1:A:61:VAL:HG23	1:A:62:SER:H	5	0.2
(2,323)	1:A:64:ARG:HG2	1:A:68:GLU:H	20	0.2
(2,323)	1:A:64:ARG:HG3	1:A:68:GLU:H	20	0.2
(2,323)	1:A:68:GLU:HG3	1:A:68:GLU:H	20	0.2
(2,306)	1:A:71:CYS:HB2	1:A:77:GLU:H	19	0.2
(2,306)	1:A:71:CYS:HB3	1:A:77:GLU:H	19	0.2
(2,306)	1:A:80:CYS:HB2	1:A:77:GLU:H	19	0.2
(2,306)	1:A:80:CYS:HB3	1:A:77:GLU:H	19	0.2
(2,292)	1:A:3:CYS:HB2	1:A:8:PHE:H	6	0.2
(2,292)	1:A:3:CYS:HB3	1:A:8:PHE:H	6	0.2
(2,292)	1:A:7:ASP:HB2	1:A:8:PHE:H	6	0.2
(2,292)	1:A:7:ASP:HB3	1:A:8:PHE:H	6	0.2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,292)	1:A:8:PHE:HB2	1:A:8:PHE:H	6	0.2
(2,292)	1:A:8:PHE:HB3	1:A:8:PHE:H	6	0.2
(2,29)	1:A:28:CYS:HA	1:A:29:GLU:H	11	0.2
(2,29)	1:A:30:ASP:HA	1:A:29:GLU:H	11	0.2
(2,279)	1:A:10:CYS:HA	1:A:11:ASN:H	6	0.2
(2,279)	1:A:11:ASN:HA	1:A:11:ASN:H	6	0.2
(2,276)	1:A:42:ARG:HA	1:A:57:GLN:H	14	0.2
(2,276)	1:A:43:THR:HA	1:A:57:GLN:H	14	0.2
(2,276)	1:A:56:THR:HB	1:A:57:GLN:H	14	0.2
(2,272)	1:A:19:ARG:HD2	1:A:19:ARG:H	14	0.2
(2,272)	1:A:19:ARG:HD3	1:A:19:ARG:H	14	0.2
(2,272)	1:A:20:TRP:HB2	1:A:19:ARG:H	14	0.2
(2,272)	1:A:20:TRP:HB3	1:A:19:ARG:H	14	0.2
(2,262)	1:A:51:CYS:HB2	1:A:74:GLY:H	12	0.2
(2,262)	1:A:51:CYS:HB3	1:A:74:GLY:H	12	0.2
(2,262)	1:A:71:CYS:HB2	1:A:74:GLY:H	12	0.2
(2,262)	1:A:71:CYS:HB3	1:A:74:GLY:H	12	0.2
(2,259)	1:A:69:ASN:HB2	1:A:69:ASN:HD21	16	0.2
(2,259)	1:A:69:ASN:HB3	1:A:69:ASN:HD21	16	0.2
(2,259)	1:A:70:ASP:HB2	1:A:69:ASN:HD21	16	0.2
(2,259)	1:A:70:ASP:HB3	1:A:69:ASN:HD21	16	0.2
(2,24)	1:A:11:ASN:HB2	1:A:11:ASN:H	7	0.2
(2,24)	1:A:11:ASN:HB3	1:A:11:ASN:H	7	0.2
(2,24)	1:A:12:ASN:HB2	1:A:11:ASN:H	7	0.2
(2,193)	1:A:98:ILE:HD11	1:A:109:ASP:H	5	0.2
(2,193)	1:A:98:ILE:HD12	1:A:109:ASP:H	5	0.2
(2,193)	1:A:98:ILE:HD13	1:A:109:ASP:H	5	0.2
(2,193)	1:A:117:LEU:HD11	1:A:109:ASP:H	5	0.2
(2,193)	1:A:117:LEU:HD12	1:A:109:ASP:H	5	0.2
(2,193)	1:A:117:LEU:HD13	1:A:109:ASP:H	5	0.2
(2,193)	1:A:117:LEU:HD21	1:A:109:ASP:H	5	0.2
(2,193)	1:A:117:LEU:HD22	1:A:109:ASP:H	5	0.2
(2,193)	1:A:117:LEU:HD23	1:A:109:ASP:H	5	0.2
(2,193)	1:A:98:ILE:HD11	1:A:109:ASP:H	9	0.2
(2,193)	1:A:98:ILE:HD12	1:A:109:ASP:H	9	0.2
(2,193)	1:A:98:ILE:HD13	1:A:109:ASP:H	9	0.2
(2,193)	1:A:117:LEU:HD11	1:A:109:ASP:H	9	0.2
(2,193)	1:A:117:LEU:HD12	1:A:109:ASP:H	9	0.2
(2,193)	1:A:117:LEU:HD13	1:A:109:ASP:H	9	0.2
(2,193)	1:A:117:LEU:HD21	1:A:109:ASP:H	9	0.2
(2,193)	1:A:117:LEU:HD22	1:A:109:ASP:H	9	0.2
(2,193)	1:A:117:LEU:HD23	1:A:109:ASP:H	9	0.2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,176)	1:A:99:SER:HG	1:A:101:ASN:HD21	19	0.2
(2,176)	1:A:102:PHE:HA	1:A:101:ASN:HD21	19	0.2
(2,164)	1:A:14:GLN:HB2	1:A:14:GLN:H	8	0.2
(2,164)	1:A:14:GLN:HB3	1:A:14:GLN:H	8	0.2
(2,163)	1:A:71:CYS:HA	1:A:77:GLU:H	17	0.2
(2,163)	1:A:77:GLU:HA	1:A:77:GLU:H	17	0.2
(2,132)	1:A:45:ARG:HB2	1:A:45:ARG:H	11	0.2
(2,132)	1:A:45:ARG:HB3	1:A:45:ARG:H	11	0.2
(2,132)	1:A:46:ILE:HG12	1:A:45:ARG:H	11	0.2
(2,132)	1:A:46:ILE:HG13	1:A:45:ARG:H	11	0.2
(2,132)	1:A:45:ARG:HB2	1:A:45:ARG:H	12	0.2
(2,132)	1:A:45:ARG:HB3	1:A:45:ARG:H	12	0.2
(2,132)	1:A:46:ILE:HG12	1:A:45:ARG:H	12	0.2
(2,132)	1:A:46:ILE:HG13	1:A:45:ARG:H	12	0.2
(2,132)	1:A:45:ARG:HB2	1:A:45:ARG:H	16	0.2
(2,132)	1:A:45:ARG:HB3	1:A:45:ARG:H	16	0.2
(2,132)	1:A:46:ILE:HG12	1:A:45:ARG:H	16	0.2
(2,132)	1:A:46:ILE:HG13	1:A:45:ARG:H	16	0.2
(2,110)	1:A:17:PRO:HB2	1:A:19:ARG:H	5	0.2
(2,110)	1:A:17:PRO:HB3	1:A:19:ARG:H	5	0.2
(2,110)	1:A:19:ARG:HB2	1:A:19:ARG:H	5	0.2
(2,110)	1:A:19:ARG:HB3	1:A:19:ARG:H	5	0.2
(2,110)	1:A:17:PRO:HB2	1:A:19:ARG:H	18	0.2
(2,110)	1:A:17:PRO:HB3	1:A:19:ARG:H	18	0.2
(2,110)	1:A:19:ARG:HB2	1:A:19:ARG:H	18	0.2
(2,110)	1:A:19:ARG:HB3	1:A:19:ARG:H	18	0.2
(1,99)	1:A:98:ILE:HG12	1:A:99:SER:H	9	0.2
(1,99)	1:A:98:ILE:HG13	1:A:99:SER:H	9	0.2
(1,96)	1:A:100:ARG:H	1:A:89:GLU:HA	16	0.2
(1,925)	1:A:8:PHE:HB3	1:A:16:VAL:HG21	5	0.2
(1,925)	1:A:8:PHE:HB3	1:A:16:VAL:HG22	5	0.2
(1,925)	1:A:8:PHE:HB3	1:A:16:VAL:HG23	5	0.2
(1,92)	1:A:7:ASP:HB2	1:A:8:PHE:H	20	0.2
(1,92)	1:A:7:ASP:HB3	1:A:8:PHE:H	20	0.2
(1,909)	1:A:43:THR:HG1	1:A:46:ILE:H	1	0.2
(1,909)	1:A:43:THR:HG21	1:A:46:ILE:H	1	0.2
(1,909)	1:A:43:THR:HG22	1:A:46:ILE:H	1	0.2
(1,909)	1:A:43:THR:HG23	1:A:46:ILE:H	1	0.2
(1,900)	1:A:83:ILE:HG12	1:A:82:ASN:H	7	0.2
(1,900)	1:A:83:ILE:HG13	1:A:82:ASN:H	7	0.2
(1,900)	1:A:83:ILE:HG12	1:A:82:ASN:H	12	0.2
(1,900)	1:A:83:ILE:HG13	1:A:82:ASN:H	12	0.2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,9)	1:A:12:ASN:H	1:A:11:ASN:H	10	0.2
(1,9)	1:A:12:ASN:H	1:A:11:ASN:H	14	0.2
(1,891)	1:A:64:ARG:H	1:A:80:CYS:HB2	18	0.2
(1,891)	1:A:64:ARG:H	1:A:80:CYS:HB3	18	0.2
(1,886)	1:A:51:CYS:H	1:A:58:CYS:H	6	0.2
(1,884)	1:A:50:SER:H	1:A:59:ILE:H	17	0.2
(1,882)	1:A:58:CYS:HA	1:A:50:SER:H	6	0.2
(1,876)	1:A:39:CYS:HB2	1:A:43:THR:H	1	0.2
(1,876)	1:A:39:CYS:HB3	1:A:43:THR:H	1	0.2
(1,875)	1:A:38:GLN:HE22	1:A:38:GLN:H	10	0.2
(1,869)	1:A:14:GLN:HE22	1:A:28:CYS:H	14	0.2
(1,864)	1:A:20:TRP:HA	1:A:20:TRP:HE1	4	0.2
(1,864)	1:A:20:TRP:HA	1:A:20:TRP:HE1	12	0.2
(1,864)	1:A:20:TRP:HA	1:A:20:TRP:HE1	15	0.2
(1,860)	1:A:16:VAL:HB	1:A:19:ARG:H	17	0.2
(1,853)	1:A:10:CYS:HB2	1:A:12:ASN:H	4	0.2
(1,853)	1:A:10:CYS:HB3	1:A:12:ASN:H	4	0.2
(1,844)	1:A:79:ASN:HB2	1:A:92:CYS:H	10	0.2
(1,844)	1:A:79:ASN:HB3	1:A:92:CYS:H	10	0.2
(1,840)	1:A:71:CYS:HB2	1:A:77:GLU:H	11	0.2
(1,840)	1:A:71:CYS:HB3	1:A:77:GLU:H	11	0.2
(1,838)	1:A:58:CYS:HA	1:A:52:GLY:H	7	0.2
(1,822)	1:A:113:GLY:HA2	1:A:116:GLU:H	4	0.2
(1,822)	1:A:113:GLY:HA3	1:A:116:GLU:H	4	0.2
(1,811)	1:A:107:GLN:H	1:A:105:ASN:HD21	1	0.2
(1,811)	1:A:107:GLN:H	1:A:105:ASN:HD21	14	0.2
(1,811)	1:A:107:GLN:H	1:A:105:ASN:HD21	15	0.2
(1,810)	1:A:101:ASN:HD21	1:A:105:ASN:HD22	6	0.2
(1,806)	1:A:101:ASN:HD21	1:A:102:PHE:H	4	0.2
(1,803)	1:A:101:ASN:HD21	1:A:99:SER:H	20	0.2
(1,801)	1:A:102:PHE:HB2	1:A:98:ILE:H	3	0.2
(1,801)	1:A:102:PHE:HB3	1:A:98:ILE:H	3	0.2
(1,799)	1:A:85:CYS:HA	1:A:97:CYS:H	6	0.2
(1,799)	1:A:85:CYS:HA	1:A:97:CYS:H	15	0.2
(1,796)	1:A:96:ARG:H	1:A:83:ILE:HG21	20	0.2
(1,796)	1:A:96:ARG:H	1:A:83:ILE:HG22	20	0.2
(1,796)	1:A:96:ARG:H	1:A:83:ILE:HG23	20	0.2
(1,792)	1:A:97:CYS:HB2	1:A:91:THR:H	12	0.2
(1,792)	1:A:97:CYS:HB3	1:A:91:THR:H	12	0.2
(1,792)	1:A:97:CYS:HB2	1:A:91:THR:H	13	0.2
(1,792)	1:A:97:CYS:HB3	1:A:91:THR:H	13	0.2
(1,789)	1:A:85:CYS:H	1:A:84:THR:HB	4	0.2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,787)	1:A:73:SER:H	1:A:76:ASP:H	4	0.2
(1,784)	1:A:71:CYS:HB2	1:A:76:ASP:H	15	0.2
(1,784)	1:A:71:CYS:HB3	1:A:76:ASP:H	15	0.2
(1,778)	1:A:77:GLU:HG2	1:A:71:CYS:H	3	0.2
(1,778)	1:A:77:GLU:HG3	1:A:71:CYS:H	3	0.2
(1,756)	1:A:57:GLN:HB2	1:A:57:GLN:HE21	18	0.2
(1,756)	1:A:57:GLN:HB2	1:A:57:GLN:HE21	18	0.2
(1,756)	1:A:57:GLN:HB3	1:A:57:GLN:HE21	18	0.2
(1,756)	1:A:57:GLN:HB3	1:A:57:GLN:HE21	18	0.2
(1,751)	1:A:52:GLY:H	1:A:57:GLN:HG2	6	0.2
(1,751)	1:A:52:GLY:H	1:A:57:GLN:HG3	6	0.2
(1,744)	1:A:48:GLU:H	1:A:47:HIS:H	6	0.2
(1,744)	1:A:48:GLU:H	1:A:47:HIS:H	20	0.2
(1,74)	1:A:65:CYS:H	1:A:65:CYS:HB2	16	0.2
(1,74)	1:A:65:CYS:H	1:A:65:CYS:HB3	16	0.2
(1,737)	1:A:33:ASP:HB2	1:A:34:GLU:H	6	0.2
(1,737)	1:A:33:ASP:HB3	1:A:34:GLU:H	6	0.2
(1,726)	1:A:34:GLU:HG2	1:A:27:ASP:H	1	0.2
(1,726)	1:A:34:GLU:HG3	1:A:27:ASP:H	1	0.2
(1,726)	1:A:34:GLU:HG2	1:A:27:ASP:H	17	0.2
(1,726)	1:A:34:GLU:HG3	1:A:27:ASP:H	17	0.2
(1,724)	1:A:34:GLU:HB2	1:A:25:ASP:H	12	0.2
(1,724)	1:A:34:GLU:HB3	1:A:25:ASP:H	12	0.2
(1,716)	1:A:28:CYS:HB2	1:A:14:GLN:HE22	2	0.2
(1,716)	1:A:28:CYS:HB3	1:A:14:GLN:HE22	2	0.2
(1,711)	1:A:10:CYS:HB2	1:A:11:ASN:H	8	0.2
(1,711)	1:A:10:CYS:HB3	1:A:11:ASN:H	8	0.2
(1,711)	1:A:10:CYS:HB2	1:A:11:ASN:H	19	0.2
(1,711)	1:A:10:CYS:HB3	1:A:11:ASN:H	19	0.2
(1,709)	1:A:45:ARG:HD2	1:A:45:ARG:H	11	0.2
(1,709)	1:A:45:ARG:HD3	1:A:45:ARG:H	11	0.2
(1,708)	1:A:44:CYS:HB2	1:A:45:ARG:H	10	0.2
(1,708)	1:A:44:CYS:HB3	1:A:45:ARG:H	10	0.2
(1,707)	1:A:45:ARG:HD2	1:A:45:ARG:H	11	0.2
(1,707)	1:A:45:ARG:HD3	1:A:45:ARG:H	11	0.2
(1,705)	1:A:100:ARG:H	1:A:100:ARG:HD2	11	0.2
(1,705)	1:A:100:ARG:H	1:A:100:ARG:HD3	11	0.2
(1,698)	1:A:64:ARG:H	1:A:64:ARG:HG2	13	0.2
(1,698)	1:A:64:ARG:H	1:A:64:ARG:HG3	13	0.2
(1,696)	1:A:44:CYS:HB2	1:A:34:GLU:H	14	0.2
(1,696)	1:A:44:CYS:HB3	1:A:34:GLU:H	14	0.2
(1,694)	1:A:21:LYS:HE2	1:A:21:LYS:H	11	0.2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,694)	1:A:21:LYS:HE3	1:A:21:LYS:H	11	0.2
(1,670)	1:A:107:GLN:HB2	1:A:105:ASN:HD22	2	0.2
(1,670)	1:A:107:GLN:HB2	1:A:105:ASN:HD22	2	0.2
(1,670)	1:A:107:GLN:HB3	1:A:105:ASN:HD22	2	0.2
(1,670)	1:A:107:GLN:HB3	1:A:105:ASN:HD22	2	0.2
(1,664)	1:A:105:ASN:HB2	1:A:105:ASN:HD21	14	0.2
(1,664)	1:A:105:ASN:HB3	1:A:105:ASN:HD21	14	0.2
(1,658)	1:A:102:PHE:HA	1:A:105:ASN:HD22	1	0.2
(1,645)	1:A:101:ASN:HD22	1:A:101:ASN:H	8	0.2
(1,630)	1:A:57:GLN:HB2	1:A:57:GLN:HE22	20	0.2
(1,630)	1:A:57:GLN:HB2	1:A:57:GLN:HE22	20	0.2
(1,630)	1:A:57:GLN:HB3	1:A:57:GLN:HE22	20	0.2
(1,630)	1:A:57:GLN:HB3	1:A:57:GLN:HE22	20	0.2
(1,603)	1:A:32:SER:HB2	1:A:11:ASN:HD22	13	0.2
(1,603)	1:A:32:SER:HB3	1:A:11:ASN:HD22	13	0.2
(1,6)	1:A:23:ASP:H	1:A:24:GLY:H	9	0.2
(1,6)	1:A:23:ASP:H	1:A:24:GLY:H	11	0.2
(1,586)	1:A:69:ASN:HA	1:A:64:ARG:H	2	0.2
(1,580)	1:A:48:GLU:HG2	1:A:49:ILE:H	14	0.2
(1,580)	1:A:48:GLU:HG3	1:A:49:ILE:H	14	0.2
(1,580)	1:A:48:GLU:HG2	1:A:49:ILE:H	19	0.2
(1,580)	1:A:48:GLU:HG3	1:A:49:ILE:H	19	0.2
(1,553)	1:A:115:ASP:HB2	1:A:104:CYS:H	14	0.2
(1,553)	1:A:115:ASP:HB3	1:A:104:CYS:H	14	0.2
(1,553)	1:A:115:ASP:HB2	1:A:104:CYS:H	16	0.2
(1,553)	1:A:115:ASP:HB3	1:A:104:CYS:H	16	0.2
(1,55)	1:A:71:CYS:H	1:A:70:ASP:H	7	0.2
(1,545)	1:A:103:VAL:HA	1:A:105:ASN:H	4	0.2
(1,545)	1:A:103:VAL:HA	1:A:105:ASN:H	6	0.2
(1,542)	1:A:112:ASP:H	1:A:114:SER:H	2	0.2
(1,541)	1:A:115:ASP:HB2	1:A:116:GLU:H	7	0.2
(1,541)	1:A:115:ASP:HB3	1:A:116:GLU:H	7	0.2
(1,518)	1:A:49:ILE:H	1:A:61:VAL:H	5	0.2
(1,518)	1:A:49:ILE:H	1:A:61:VAL:H	16	0.2
(1,516)	1:A:49:ILE:H	1:A:59:ILE:H	17	0.2
(1,509)	1:A:46:ILE:HA	1:A:46:ILE:H	3	0.2
(1,501)	1:A:34:GLU:HB2	1:A:34:GLU:H	6	0.2
(1,501)	1:A:34:GLU:HB3	1:A:34:GLU:H	6	0.2
(1,501)	1:A:34:GLU:HB2	1:A:34:GLU:H	9	0.2
(1,501)	1:A:34:GLU:HB3	1:A:34:GLU:H	9	0.2
(1,49)	1:A:94:SER:H	1:A:93:SER:H	3	0.2
(1,49)	1:A:94:SER:H	1:A:93:SER:H	6	0.2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,483)	1:A:10:CYS:HB2	1:A:14:GLN:H	9	0.2
(1,483)	1:A:10:CYS:HB3	1:A:14:GLN:H	9	0.2
(1,483)	1:A:10:CYS:HB2	1:A:14:GLN:H	16	0.2
(1,483)	1:A:10:CYS:HB3	1:A:14:GLN:H	16	0.2
(1,482)	1:A:11:ASN:HD21	1:A:11:ASN:H	11	0.2
(1,482)	1:A:11:ASN:HD21	1:A:11:ASN:H	13	0.2
(1,480)	1:A:10:CYS:HB2	1:A:10:CYS:H	12	0.2
(1,480)	1:A:10:CYS:HB3	1:A:10:CYS:H	12	0.2
(1,462)	1:A:79:ASN:H	1:A:78:GLU:H	18	0.2
(1,445)	1:A:75:GLU:H	1:A:74:GLY:H	14	0.2
(1,438)	1:A:72:ASP:H	1:A:73:SER:H	8	0.2
(1,436)	1:A:73:SER:H	1:A:72:ASP:H	20	0.2
(1,433)	1:A:74:GLY:HA2	1:A:71:CYS:H	4	0.2
(1,433)	1:A:74:GLY:HA3	1:A:71:CYS:H	4	0.2
(1,419)	1:A:65:CYS:HB2	1:A:66:ASP:H	17	0.2
(1,419)	1:A:65:CYS:HB3	1:A:66:ASP:H	17	0.2
(1,418)	1:A:64:ARG:HA	1:A:66:ASP:H	9	0.2
(1,415)	1:A:64:ARG:HA	1:A:65:CYS:H	1	0.2
(1,415)	1:A:64:ARG:HA	1:A:65:CYS:H	3	0.2
(1,415)	1:A:64:ARG:HA	1:A:65:CYS:H	8	0.2
(1,415)	1:A:64:ARG:HA	1:A:65:CYS:H	9	0.2
(1,415)	1:A:64:ARG:HA	1:A:65:CYS:H	11	0.2
(1,415)	1:A:64:ARG:HA	1:A:65:CYS:H	13	0.2
(1,414)	1:A:63:TRP:H	1:A:63:TRP:HB2	3	0.2
(1,414)	1:A:63:TRP:H	1:A:63:TRP:HB3	3	0.2
(1,414)	1:A:63:TRP:H	1:A:63:TRP:HB2	16	0.2
(1,414)	1:A:63:TRP:H	1:A:63:TRP:HB3	16	0.2
(1,386)	1:A:51:CYS:HB2	1:A:51:CYS:H	14	0.2
(1,386)	1:A:51:CYS:HB3	1:A:51:CYS:H	14	0.2
(1,386)	1:A:51:CYS:HB2	1:A:51:CYS:H	18	0.2
(1,386)	1:A:51:CYS:HB3	1:A:51:CYS:H	18	0.2
(1,383)	1:A:51:CYS:H	1:A:50:SER:HA	15	0.2
(1,378)	1:A:48:GLU:HG2	1:A:49:ILE:H	14	0.2
(1,378)	1:A:48:GLU:HG3	1:A:49:ILE:H	14	0.2
(1,378)	1:A:48:GLU:HG2	1:A:49:ILE:H	19	0.2
(1,378)	1:A:48:GLU:HG3	1:A:49:ILE:H	19	0.2
(1,374)	1:A:61:VAL:H	1:A:49:ILE:H	15	0.2
(1,372)	1:A:48:GLU:H	1:A:48:GLU:HA	5	0.2
(1,351)	1:A:32:SER:H	1:A:33:ASP:H	11	0.2
(1,350)	1:A:31:GLY:H	1:A:32:SER:H	12	0.2
(1,349)	1:A:32:SER:H	1:A:33:ASP:H	11	0.2
(1,339)	1:A:25:ASP:H	1:A:20:TRP:HB2	16	0.2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,339)	1:A:25:ASP:H	1:A:20:TRP:HB3	16	0.2
(1,339)	1:A:25:ASP:H	1:A:20:TRP:HB2	19	0.2
(1,339)	1:A:25:ASP:H	1:A:20:TRP:HB3	19	0.2
(1,33)	1:A:115:ASP:H	1:A:114:SER:H	5	0.2
(1,313)	1:A:14:GLN:HG2	1:A:14:GLN:H	18	0.2
(1,313)	1:A:14:GLN:HG3	1:A:14:GLN:H	18	0.2
(1,312)	1:A:14:GLN:HG2	1:A:14:GLN:H	10	0.2
(1,312)	1:A:14:GLN:HG3	1:A:14:GLN:H	10	0.2
(1,308)	1:A:13:GLY:H	1:A:14:GLN:H	14	0.2
(1,290)	1:A:8:PHE:HA	1:A:9:VAL:H	5	0.2
(1,283)	1:A:8:PHE:H	1:A:7:ASP:H	14	0.2
(1,28)	1:A:118:ASP:H	1:A:117:LEU:H	20	0.2
(1,257)	1:A:82:ASN:HB2	1:A:82:ASN:H	11	0.2
(1,257)	1:A:82:ASN:HB2	1:A:82:ASN:H	11	0.2
(1,257)	1:A:82:ASN:HB3	1:A:82:ASN:H	11	0.2
(1,257)	1:A:82:ASN:HB3	1:A:82:ASN:H	11	0.2
(1,24)	1:A:104:CYS:H	1:A:105:ASN:H	3	0.2
(1,24)	1:A:104:CYS:H	1:A:105:ASN:H	17	0.2
(1,23)	1:A:104:CYS:H	1:A:105:ASN:H	3	0.2
(1,23)	1:A:104:CYS:H	1:A:105:ASN:H	17	0.2
(1,226)	1:A:92:CYS:HB2	1:A:94:SER:H	13	0.2
(1,226)	1:A:92:CYS:HB3	1:A:94:SER:H	13	0.2
(1,22)	1:A:91:THR:H	1:A:92:CYS:H	7	0.2
(1,22)	1:A:91:THR:H	1:A:92:CYS:H	13	0.2
(1,22)	1:A:91:THR:H	1:A:92:CYS:H	17	0.2
(1,203)	1:A:89:GLU:HB2	1:A:98:ILE:H	8	0.2
(1,203)	1:A:89:GLU:HB3	1:A:98:ILE:H	8	0.2
(1,196)	1:A:98:ILE:HA	1:A:99:SER:H	1	0.2
(1,196)	1:A:98:ILE:HA	1:A:99:SER:H	8	0.2
(1,184)	1:A:103:VAL:HB	1:A:102:PHE:H	18	0.2
(1,17)	1:A:81:GLY:H	1:A:80:CYS:H	2	0.2
(1,17)	1:A:81:GLY:H	1:A:80:CYS:H	18	0.2
(1,137)	1:A:109:ASP:H	1:A:113:GLY:HA2	17	0.2
(1,137)	1:A:109:ASP:H	1:A:113:GLY:HA3	17	0.2
(1,136)	1:A:112:ASP:H	1:A:110:CYS:H	7	0.2
(1,123)	1:A:115:ASP:HB2	1:A:115:ASP:H	20	0.2
(1,123)	1:A:115:ASP:HB3	1:A:115:ASP:H	20	0.2
(4,7)	1:A:8:PHE:H	1:A:16:VAL:O	1	0.19
(4,5)	1:A:49:ILE:O	1:A:59:ILE:H	6	0.19
(4,5)	1:A:49:ILE:O	1:A:59:ILE:H	16	0.19
(3,7)	2:A:202:CA:CA	1:A:63:TRP:O	5	0.19
(2,89)	1:A:107:GLN:HB2	1:A:108:ASP:H	10	0.19

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,89)	1:A:107:GLN:HB3	1:A:108:ASP:H	10	0.19
(2,80)	1:A:41:MET:HA	1:A:56:THR:H	8	0.19
(2,80)	1:A:42:ARG:HA	1:A:56:THR:H	8	0.19
(2,80)	1:A:56:THR:HB	1:A:56:THR:H	8	0.19
(2,66)	1:A:4:ALA:H	1:A:7:ASP:H	13	0.19
(2,66)	1:A:5:GLU:H	1:A:7:ASP:H	13	0.19
(2,56)	1:A:114:SER:HA	1:A:117:LEU:H	4	0.19
(2,5)	1:A:39:CYS:HB2	1:A:42:ARG:H	2	0.19
(2,5)	1:A:39:CYS:HB3	1:A:42:ARG:H	2	0.19
(2,5)	1:A:42:ARG:HD2	1:A:42:ARG:H	2	0.19
(2,5)	1:A:42:ARG:HD3	1:A:42:ARG:H	2	0.19
(2,5)	1:A:39:CYS:HB2	1:A:42:ARG:H	15	0.19
(2,5)	1:A:39:CYS:HB3	1:A:42:ARG:H	15	0.19
(2,5)	1:A:42:ARG:HD2	1:A:42:ARG:H	15	0.19
(2,5)	1:A:42:ARG:HD3	1:A:42:ARG:H	15	0.19
(2,42)	1:A:49:ILE:HG21	1:A:61:VAL:H	19	0.19
(2,42)	1:A:49:ILE:HG22	1:A:61:VAL:H	19	0.19
(2,42)	1:A:49:ILE:HG23	1:A:61:VAL:H	19	0.19
(2,42)	1:A:59:ILE:HD11	1:A:61:VAL:H	19	0.19
(2,42)	1:A:59:ILE:HD12	1:A:61:VAL:H	19	0.19
(2,42)	1:A:59:ILE:HD13	1:A:61:VAL:H	19	0.19
(2,42)	1:A:60:PRO:HB2	1:A:61:VAL:H	19	0.19
(2,42)	1:A:60:PRO:HB3	1:A:61:VAL:H	19	0.19
(2,42)	1:A:61:VAL:HG11	1:A:61:VAL:H	19	0.19
(2,42)	1:A:61:VAL:HG12	1:A:61:VAL:H	19	0.19
(2,42)	1:A:61:VAL:HG13	1:A:61:VAL:H	19	0.19
(2,42)	1:A:61:VAL:HG21	1:A:61:VAL:H	19	0.19
(2,42)	1:A:61:VAL:HG22	1:A:61:VAL:H	19	0.19
(2,42)	1:A:61:VAL:HG23	1:A:61:VAL:H	19	0.19
(2,41)	1:A:90:PHE:HB2	1:A:92:CYS:H	20	0.19
(2,41)	1:A:90:PHE:HB3	1:A:92:CYS:H	20	0.19
(2,41)	1:A:97:CYS:HB2	1:A:92:CYS:H	20	0.19
(2,41)	1:A:97:CYS:HB3	1:A:92:CYS:H	20	0.19
(2,39)	1:A:98:ILE:HD11	1:A:115:ASP:H	9	0.19
(2,39)	1:A:98:ILE:HD12	1:A:115:ASP:H	9	0.19
(2,39)	1:A:98:ILE:HD13	1:A:115:ASP:H	9	0.19
(2,39)	1:A:117:LEU:HD11	1:A:115:ASP:H	9	0.19
(2,39)	1:A:117:LEU:HD12	1:A:115:ASP:H	9	0.19
(2,39)	1:A:117:LEU:HD13	1:A:115:ASP:H	9	0.19
(2,39)	1:A:117:LEU:HD21	1:A:115:ASP:H	9	0.19
(2,39)	1:A:117:LEU:HD22	1:A:115:ASP:H	9	0.19
(2,39)	1:A:117:LEU:HD23	1:A:115:ASP:H	9	0.19

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,39)	1:A:98:ILE:HD11	1:A:115:ASP:H	17	0.19
(2,39)	1:A:98:ILE:HD12	1:A:115:ASP:H	17	0.19
(2,39)	1:A:98:ILE:HD13	1:A:115:ASP:H	17	0.19
(2,39)	1:A:117:LEU:HD11	1:A:115:ASP:H	17	0.19
(2,39)	1:A:117:LEU:HD12	1:A:115:ASP:H	17	0.19
(2,39)	1:A:117:LEU:HD13	1:A:115:ASP:H	17	0.19
(2,39)	1:A:117:LEU:HD21	1:A:115:ASP:H	17	0.19
(2,39)	1:A:117:LEU:HD22	1:A:115:ASP:H	17	0.19
(2,39)	1:A:117:LEU:HD23	1:A:115:ASP:H	17	0.19
(2,388)	1:A:64:ARG:HD2	1:A:68:GLU:H	3	0.19
(2,388)	1:A:64:ARG:HD3	1:A:68:GLU:H	3	0.19
(2,388)	1:A:66:ASP:HB2	1:A:68:GLU:H	3	0.19
(2,388)	1:A:66:ASP:HB3	1:A:68:GLU:H	3	0.19
(2,382)	1:A:72:ASP:HB2	1:A:73:SER:H	19	0.19
(2,382)	1:A:72:ASP:HB3	1:A:73:SER:H	19	0.19
(2,375)	1:A:48:GLU:HB2	1:A:61:VAL:H	6	0.19
(2,375)	1:A:48:GLU:HB3	1:A:61:VAL:H	6	0.19
(2,375)	1:A:60:PRO:HD3	1:A:61:VAL:H	6	0.19
(2,375)	1:A:48:GLU:HB2	1:A:61:VAL:H	18	0.19
(2,375)	1:A:48:GLU:HB3	1:A:61:VAL:H	18	0.19
(2,375)	1:A:60:PRO:HD3	1:A:61:VAL:H	18	0.19
(2,351)	1:A:12:ASN:HB2	1:A:12:ASN:H	7	0.19
(2,351)	1:A:12:ASN:HB3	1:A:12:ASN:H	7	0.19
(2,351)	1:A:13:GLY:HA2	1:A:12:ASN:H	7	0.19
(2,351)	1:A:13:GLY:HA3	1:A:12:ASN:H	7	0.19
(2,351)	1:A:12:ASN:HB2	1:A:12:ASN:H	16	0.19
(2,351)	1:A:12:ASN:HB3	1:A:12:ASN:H	16	0.19
(2,351)	1:A:13:GLY:HA2	1:A:12:ASN:H	16	0.19
(2,351)	1:A:13:GLY:HA3	1:A:12:ASN:H	16	0.19
(2,345)	1:A:84:THR:HG1	1:A:85:CYS:H	14	0.19
(2,345)	1:A:84:THR:HG21	1:A:85:CYS:H	14	0.19
(2,345)	1:A:84:THR:HG22	1:A:85:CYS:H	14	0.19
(2,345)	1:A:84:THR:HG23	1:A:85:CYS:H	14	0.19
(2,345)	1:A:91:THR:HG21	1:A:85:CYS:H	14	0.19
(2,345)	1:A:91:THR:HG22	1:A:85:CYS:H	14	0.19
(2,345)	1:A:91:THR:HG23	1:A:85:CYS:H	14	0.19
(2,341)	1:A:78:GLU:HG2	1:A:78:GLU:H	8	0.19
(2,341)	1:A:78:GLU:HG3	1:A:78:GLU:H	8	0.19
(2,341)	1:A:87:PRO:HB2	1:A:78:GLU:H	8	0.19
(2,341)	1:A:87:PRO:HB3	1:A:78:GLU:H	8	0.19
(2,296)	1:A:113:GLY:HA2	1:A:117:LEU:H	5	0.19
(2,296)	1:A:113:GLY:HA3	1:A:117:LEU:H	5	0.19

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,296)	1:A:114:SER:HB2	1:A:117:LEU:H	5	0.19
(2,296)	1:A:114:SER:HB3	1:A:117:LEU:H	5	0.19
(2,296)	1:A:113:GLY:HA2	1:A:117:LEU:H	6	0.19
(2,296)	1:A:113:GLY:HA3	1:A:117:LEU:H	6	0.19
(2,296)	1:A:114:SER:HB2	1:A:117:LEU:H	6	0.19
(2,296)	1:A:114:SER:HB3	1:A:117:LEU:H	6	0.19
(2,295)	1:A:10:CYS:HA	1:A:38:GLN:HE21	13	0.19
(2,295)	1:A:38:GLN:HA	1:A:38:GLN:HE21	13	0.19
(2,292)	1:A:3:CYS:HB2	1:A:8:PHE:H	14	0.19
(2,292)	1:A:3:CYS:HB3	1:A:8:PHE:H	14	0.19
(2,292)	1:A:7:ASP:HB2	1:A:8:PHE:H	14	0.19
(2,292)	1:A:7:ASP:HB3	1:A:8:PHE:H	14	0.19
(2,292)	1:A:8:PHE:HB2	1:A:8:PHE:H	14	0.19
(2,292)	1:A:8:PHE:HB3	1:A:8:PHE:H	14	0.19
(2,29)	1:A:28:CYS:HA	1:A:29:GLU:H	12	0.19
(2,29)	1:A:30:ASP:HA	1:A:29:GLU:H	12	0.19
(2,29)	1:A:28:CYS:HA	1:A:29:GLU:H	19	0.19
(2,29)	1:A:30:ASP:HA	1:A:29:GLU:H	19	0.19
(2,279)	1:A:10:CYS:HA	1:A:11:ASN:H	8	0.19
(2,279)	1:A:11:ASN:HA	1:A:11:ASN:H	8	0.19
(2,266)	1:A:31:GLY:HA2	1:A:32:SER:H	3	0.19
(2,266)	1:A:31:GLY:HA3	1:A:32:SER:H	3	0.19
(2,266)	1:A:32:SER:HB2	1:A:32:SER:H	3	0.19
(2,266)	1:A:32:SER:HB3	1:A:32:SER:H	3	0.19
(2,266)	1:A:31:GLY:HA2	1:A:32:SER:H	18	0.19
(2,266)	1:A:31:GLY:HA3	1:A:32:SER:H	18	0.19
(2,266)	1:A:32:SER:HB2	1:A:32:SER:H	18	0.19
(2,266)	1:A:32:SER:HB3	1:A:32:SER:H	18	0.19
(2,263)	1:A:62:SER:HB2	1:A:63:TRP:H	6	0.19
(2,263)	1:A:62:SER:HB3	1:A:63:TRP:H	6	0.19
(2,263)	1:A:63:TRP:HB2	1:A:63:TRP:H	6	0.19
(2,263)	1:A:62:SER:HB2	1:A:63:TRP:H	11	0.19
(2,263)	1:A:62:SER:HB3	1:A:63:TRP:H	11	0.19
(2,263)	1:A:63:TRP:HB2	1:A:63:TRP:H	11	0.19
(2,263)	1:A:62:SER:HB2	1:A:63:TRP:H	14	0.19
(2,263)	1:A:62:SER:HB3	1:A:63:TRP:H	14	0.19
(2,263)	1:A:63:TRP:HB2	1:A:63:TRP:H	14	0.19
(2,261)	1:A:110:CYS:HB2	1:A:110:CYS:H	8	0.19
(2,261)	1:A:110:CYS:HB3	1:A:110:CYS:H	8	0.19
(2,261)	1:A:111:SER:HB2	1:A:110:CYS:H	8	0.19
(2,261)	1:A:113:GLY:HA2	1:A:110:CYS:H	8	0.19
(2,261)	1:A:113:GLY:HA3	1:A:110:CYS:H	8	0.19

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,261)	1:A:110:CYS:HB2	1:A:110:CYS:H	19	0.19
(2,261)	1:A:110:CYS:HB3	1:A:110:CYS:H	19	0.19
(2,261)	1:A:111:SER:HB2	1:A:110:CYS:H	19	0.19
(2,261)	1:A:113:GLY:HA2	1:A:110:CYS:H	19	0.19
(2,261)	1:A:113:GLY:HA3	1:A:110:CYS:H	19	0.19
(2,259)	1:A:69:ASN:HB2	1:A:69:ASN:HD21	3	0.19
(2,259)	1:A:69:ASN:HB3	1:A:69:ASN:HD21	3	0.19
(2,259)	1:A:70:ASP:HB2	1:A:69:ASN:HD21	3	0.19
(2,259)	1:A:70:ASP:HB3	1:A:69:ASN:HD21	3	0.19
(2,254)	1:A:33:ASP:HB2	1:A:38:GLN:HE21	13	0.19
(2,254)	1:A:33:ASP:HB3	1:A:38:GLN:HE21	13	0.19
(2,254)	1:A:37:GLU:HG2	1:A:38:GLN:HE21	13	0.19
(2,254)	1:A:37:GLU:HG3	1:A:38:GLN:HE21	13	0.19
(2,254)	1:A:38:GLN:HG2	1:A:38:GLN:HE21	13	0.19
(2,254)	1:A:38:GLN:HG3	1:A:38:GLN:HE21	13	0.19
(2,24)	1:A:11:ASN:HB2	1:A:11:ASN:H	8	0.19
(2,24)	1:A:11:ASN:HB3	1:A:11:ASN:H	8	0.19
(2,24)	1:A:12:ASN:HB2	1:A:11:ASN:H	8	0.19
(2,228)	1:A:28:CYS:HB2	1:A:28:CYS:H	19	0.19
(2,228)	1:A:28:CYS:HB3	1:A:28:CYS:H	19	0.19
(2,228)	1:A:29:GLU:HA	1:A:28:CYS:H	19	0.19
(2,228)	1:A:32:SER:HA	1:A:28:CYS:H	19	0.19
(2,223)	1:A:45:ARG:HG2	1:A:45:ARG:H	10	0.19
(2,223)	1:A:45:ARG:HG3	1:A:45:ARG:H	10	0.19
(2,223)	1:A:46:ILE:HB	1:A:45:ARG:H	10	0.19
(2,211)	1:A:49:ILE:HD11	1:A:49:ILE:H	4	0.19
(2,211)	1:A:49:ILE:HD12	1:A:49:ILE:H	4	0.19
(2,211)	1:A:49:ILE:HD13	1:A:49:ILE:H	4	0.19
(2,211)	1:A:49:ILE:HG12	1:A:49:ILE:H	4	0.19
(2,211)	1:A:49:ILE:HG13	1:A:49:ILE:H	4	0.19
(2,211)	1:A:49:ILE:HG21	1:A:49:ILE:H	4	0.19
(2,211)	1:A:49:ILE:HG22	1:A:49:ILE:H	4	0.19
(2,211)	1:A:49:ILE:HG23	1:A:49:ILE:H	4	0.19
(2,188)	1:A:16:VAL:HG11	1:A:19:ARG:H	17	0.19
(2,188)	1:A:16:VAL:HG12	1:A:19:ARG:H	17	0.19
(2,188)	1:A:16:VAL:HG13	1:A:19:ARG:H	17	0.19
(2,188)	1:A:16:VAL:HG21	1:A:19:ARG:H	17	0.19
(2,188)	1:A:16:VAL:HG22	1:A:19:ARG:H	17	0.19
(2,188)	1:A:16:VAL:HG23	1:A:19:ARG:H	17	0.19
(2,173)	1:A:69:ASN:HD21	1:A:69:ASN:H	19	0.19
(2,164)	1:A:14:GLN:HB2	1:A:14:GLN:H	15	0.19
(2,164)	1:A:14:GLN:HB3	1:A:14:GLN:H	15	0.19

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,164)	1:A:14:GLN:HB2	1:A:14:GLN:H	20	0.19
(2,164)	1:A:14:GLN:HB3	1:A:14:GLN:H	20	0.19
(2,156)	1:A:51:CYS:HB2	1:A:71:CYS:H	19	0.19
(2,156)	1:A:51:CYS:HB3	1:A:71:CYS:H	19	0.19
(2,156)	1:A:71:CYS:HB2	1:A:71:CYS:H	19	0.19
(2,156)	1:A:71:CYS:HB3	1:A:71:CYS:H	19	0.19
(2,124)	1:A:43:THR:HG1	1:A:57:GLN:H	13	0.19
(2,124)	1:A:43:THR:HG1	1:A:57:GLN:H	13	0.19
(2,124)	1:A:43:THR:HG21	1:A:57:GLN:H	13	0.19
(2,124)	1:A:43:THR:HG21	1:A:57:GLN:H	13	0.19
(2,124)	1:A:43:THR:HG22	1:A:57:GLN:H	13	0.19
(2,124)	1:A:43:THR:HG22	1:A:57:GLN:H	13	0.19
(2,124)	1:A:43:THR:HG23	1:A:57:GLN:H	13	0.19
(2,124)	1:A:43:THR:HG23	1:A:57:GLN:H	13	0.19
(2,124)	1:A:56:THR:HG1	1:A:57:GLN:H	13	0.19
(2,124)	1:A:56:THR:HG21	1:A:57:GLN:H	13	0.19
(2,124)	1:A:56:THR:HG21	1:A:57:GLN:H	13	0.19
(2,124)	1:A:56:THR:HG22	1:A:57:GLN:H	13	0.19
(2,124)	1:A:56:THR:HG22	1:A:57:GLN:H	13	0.19
(2,124)	1:A:56:THR:HG23	1:A:57:GLN:H	13	0.19
(2,124)	1:A:56:THR:HG23	1:A:57:GLN:H	13	0.19
(2,124)	1:A:43:THR:HG1	1:A:57:GLN:H	14	0.19
(2,124)	1:A:43:THR:HG1	1:A:57:GLN:H	14	0.19
(2,124)	1:A:43:THR:HG21	1:A:57:GLN:H	14	0.19
(2,124)	1:A:43:THR:HG21	1:A:57:GLN:H	14	0.19
(2,124)	1:A:43:THR:HG22	1:A:57:GLN:H	14	0.19
(2,124)	1:A:43:THR:HG22	1:A:57:GLN:H	14	0.19
(2,124)	1:A:43:THR:HG23	1:A:57:GLN:H	14	0.19
(2,124)	1:A:43:THR:HG23	1:A:57:GLN:H	14	0.19
(2,124)	1:A:56:THR:HG1	1:A:57:GLN:H	14	0.19
(2,124)	1:A:56:THR:HG21	1:A:57:GLN:H	14	0.19
(2,124)	1:A:56:THR:HG21	1:A:57:GLN:H	14	0.19
(2,124)	1:A:56:THR:HG22	1:A:57:GLN:H	14	0.19
(2,124)	1:A:56:THR:HG22	1:A:57:GLN:H	14	0.19
(2,124)	1:A:56:THR:HG23	1:A:57:GLN:H	14	0.19
(2,124)	1:A:56:THR:HG23	1:A:57:GLN:H	14	0.19
(2,123)	1:A:16:VAL:HG11	1:A:33:ASP:H	2	0.19
(2,123)	1:A:16:VAL:HG12	1:A:33:ASP:H	2	0.19
(2,123)	1:A:16:VAL:HG13	1:A:33:ASP:H	2	0.19
(2,123)	1:A:16:VAL:HG21	1:A:33:ASP:H	2	0.19
(2,123)	1:A:16:VAL:HG22	1:A:33:ASP:H	2	0.19
(2,123)	1:A:16:VAL:HG23	1:A:33:ASP:H	2	0.19

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,114)	1:A:16:VAL:HG11	1:A:16:VAL:H	12	0.19
(2,114)	1:A:16:VAL:HG12	1:A:16:VAL:H	12	0.19
(2,114)	1:A:16:VAL:HG13	1:A:16:VAL:H	12	0.19
(2,114)	1:A:16:VAL:HG21	1:A:16:VAL:H	12	0.19
(2,114)	1:A:16:VAL:HG21	1:A:16:VAL:H	12	0.19
(2,114)	1:A:16:VAL:HG22	1:A:16:VAL:H	12	0.19
(2,114)	1:A:16:VAL:HG22	1:A:16:VAL:H	12	0.19
(2,114)	1:A:16:VAL:HG23	1:A:16:VAL:H	12	0.19
(2,114)	1:A:16:VAL:HG23	1:A:16:VAL:H	12	0.19
(2,110)	1:A:17:PRO:HB2	1:A:19:ARG:H	12	0.19
(2,110)	1:A:17:PRO:HB3	1:A:19:ARG:H	12	0.19
(2,110)	1:A:19:ARG:HB2	1:A:19:ARG:H	12	0.19
(2,110)	1:A:19:ARG:HB3	1:A:19:ARG:H	12	0.19
(2,109)	1:A:89:GLU:HB2	1:A:100:ARG:H	16	0.19
(2,109)	1:A:89:GLU:HB3	1:A:100:ARG:H	16	0.19
(2,109)	1:A:100:ARG:HB2	1:A:100:ARG:H	16	0.19
(2,109)	1:A:100:ARG:HB3	1:A:100:ARG:H	16	0.19
(1,921)	1:A:8:PHE:HA	1:A:16:VAL:HG21	19	0.19
(1,921)	1:A:8:PHE:HA	1:A:16:VAL:HG22	19	0.19
(1,921)	1:A:8:PHE:HA	1:A:16:VAL:HG23	19	0.19
(1,92)	1:A:7:ASP:HB2	1:A:8:PHE:H	4	0.19
(1,92)	1:A:7:ASP:HB3	1:A:8:PHE:H	4	0.19
(1,916)	1:A:77:GLU:HB2	1:A:77:GLU:H	20	0.19
(1,916)	1:A:77:GLU:HB3	1:A:77:GLU:H	20	0.19
(1,91)	1:A:14:GLN:HG2	1:A:15:CYS:H	1	0.19
(1,91)	1:A:14:GLN:HG3	1:A:15:CYS:H	1	0.19
(1,907)	1:A:39:CYS:H	1:A:41:MET:H	8	0.19
(1,905)	1:A:101:ASN:HD21	1:A:105:ASN:HD21	8	0.19
(1,905)	1:A:101:ASN:HD21	1:A:105:ASN:HD21	17	0.19
(1,900)	1:A:83:ILE:HG12	1:A:82:ASN:H	9	0.19
(1,900)	1:A:83:ILE:HG13	1:A:82:ASN:H	9	0.19
(1,900)	1:A:83:ILE:HG12	1:A:82:ASN:H	19	0.19
(1,900)	1:A:83:ILE:HG13	1:A:82:ASN:H	19	0.19
(1,897)	1:A:77:GLU:HB2	1:A:69:ASN:HD22	4	0.19
(1,897)	1:A:77:GLU:HB3	1:A:69:ASN:HD22	4	0.19
(1,884)	1:A:50:SER:H	1:A:59:ILE:H	15	0.19
(1,881)	1:A:48:GLU:H	1:A:45:ARG:H	6	0.19
(1,879)	1:A:48:GLU:H	1:A:45:ARG:H	6	0.19
(1,876)	1:A:39:CYS:HB2	1:A:43:THR:H	3	0.19
(1,876)	1:A:39:CYS:HB3	1:A:43:THR:H	3	0.19
(1,876)	1:A:39:CYS:HB2	1:A:43:THR:H	16	0.19
(1,876)	1:A:39:CYS:HB3	1:A:43:THR:H	16	0.19

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,859)	1:A:3:CYS:HB2	1:A:18:SER:H	13	0.19
(1,859)	1:A:3:CYS:HB3	1:A:18:SER:H	13	0.19
(1,856)	1:A:14:GLN:H	1:A:12:ASN:HD22	1	0.19
(1,840)	1:A:71:CYS:HB2	1:A:77:GLU:H	5	0.19
(1,840)	1:A:71:CYS:HB3	1:A:77:GLU:H	5	0.19
(1,837)	1:A:50:SER:H	1:A:45:ARG:HD2	14	0.19
(1,837)	1:A:50:SER:H	1:A:45:ARG:HD3	14	0.19
(1,837)	1:A:50:SER:H	1:A:45:ARG:HD2	20	0.19
(1,837)	1:A:50:SER:H	1:A:45:ARG:HD3	20	0.19
(1,810)	1:A:101:ASN:HD21	1:A:105:ASN:HD22	2	0.19
(1,810)	1:A:101:ASN:HD21	1:A:105:ASN:HD22	19	0.19
(1,809)	1:A:106:GLY:H	1:A:104:CYS:H	9	0.19
(1,808)	1:A:116:GLU:HB2	1:A:104:CYS:H	13	0.19
(1,808)	1:A:116:GLU:HB3	1:A:104:CYS:H	13	0.19
(1,796)	1:A:96:ARG:H	1:A:83:ILE:HG21	10	0.19
(1,796)	1:A:96:ARG:H	1:A:83:ILE:HG22	10	0.19
(1,796)	1:A:96:ARG:H	1:A:83:ILE:HG23	10	0.19
(1,792)	1:A:97:CYS:HB2	1:A:91:THR:H	2	0.19
(1,792)	1:A:97:CYS:HB3	1:A:91:THR:H	2	0.19
(1,789)	1:A:85:CYS:H	1:A:84:THR:HB	17	0.19
(1,784)	1:A:71:CYS:HB2	1:A:76:ASP:H	19	0.19
(1,784)	1:A:71:CYS:HB3	1:A:76:ASP:H	19	0.19
(1,783)	1:A:71:CYS:HB2	1:A:74:GLY:H	2	0.19
(1,783)	1:A:71:CYS:HB3	1:A:74:GLY:H	2	0.19
(1,751)	1:A:52:GLY:H	1:A:57:GLN:HG2	2	0.19
(1,751)	1:A:52:GLY:H	1:A:57:GLN:HG3	2	0.19
(1,744)	1:A:48:GLU:H	1:A:47:HIS:H	9	0.19
(1,744)	1:A:48:GLU:H	1:A:47:HIS:H	11	0.19
(1,740)	1:A:35:SER:H	1:A:56:THR:HG1	10	0.19
(1,740)	1:A:35:SER:H	1:A:56:THR:HG21	10	0.19
(1,740)	1:A:35:SER:H	1:A:56:THR:HG22	10	0.19
(1,740)	1:A:35:SER:H	1:A:56:THR:HG23	10	0.19
(1,740)	1:A:35:SER:H	1:A:56:THR:HG1	15	0.19
(1,740)	1:A:35:SER:H	1:A:56:THR:HG21	15	0.19
(1,740)	1:A:35:SER:H	1:A:56:THR:HG22	15	0.19
(1,740)	1:A:35:SER:H	1:A:56:THR:HG23	15	0.19
(1,74)	1:A:65:CYS:H	1:A:65:CYS:HB2	1	0.19
(1,74)	1:A:65:CYS:H	1:A:65:CYS:HB3	1	0.19
(1,734)	1:A:32:SER:H	1:A:11:ASN:H	2	0.19
(1,731)	1:A:28:CYS:HB2	1:A:32:SER:H	10	0.19
(1,731)	1:A:28:CYS:HB3	1:A:32:SER:H	10	0.19
(1,718)	1:A:16:VAL:HB	1:A:20:TRP:HE1	18	0.19

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,716)	1:A:28:CYS:HB2	1:A:14:GLN:HE22	1	0.19
(1,716)	1:A:28:CYS:HB3	1:A:14:GLN:HE22	1	0.19
(1,712)	1:A:32:SER:H	1:A:11:ASN:H	2	0.19
(1,711)	1:A:10:CYS:HB2	1:A:11:ASN:H	2	0.19
(1,711)	1:A:10:CYS:HB3	1:A:11:ASN:H	2	0.19
(1,709)	1:A:45:ARG:HD2	1:A:45:ARG:H	18	0.19
(1,709)	1:A:45:ARG:HD3	1:A:45:ARG:H	18	0.19
(1,707)	1:A:45:ARG:HD2	1:A:45:ARG:H	18	0.19
(1,707)	1:A:45:ARG:HD3	1:A:45:ARG:H	18	0.19
(1,705)	1:A:100:ARG:H	1:A:100:ARG:HD2	13	0.19
(1,705)	1:A:100:ARG:H	1:A:100:ARG:HD3	13	0.19
(1,70)	1:A:77:GLU:HB2	1:A:78:GLU:H	13	0.19
(1,70)	1:A:77:GLU:HB3	1:A:78:GLU:H	13	0.19
(1,698)	1:A:64:ARG:H	1:A:64:ARG:HG2	17	0.19
(1,698)	1:A:64:ARG:H	1:A:64:ARG:HG3	17	0.19
(1,69)	1:A:78:GLU:HG2	1:A:78:GLU:H	20	0.19
(1,69)	1:A:78:GLU:HG3	1:A:78:GLU:H	20	0.19
(1,689)	1:A:69:ASN:HD21	1:A:69:ASN:H	19	0.19
(1,681)	1:A:79:ASN:HD21	1:A:87:PRO:HD2	4	0.19
(1,681)	1:A:79:ASN:HD21	1:A:87:PRO:HD3	4	0.19
(1,679)	1:A:78:GLU:HG2	1:A:79:ASN:HD22	10	0.19
(1,679)	1:A:78:GLU:HG3	1:A:79:ASN:HD22	10	0.19
(1,664)	1:A:105:ASN:HB2	1:A:105:ASN:HD21	12	0.19
(1,664)	1:A:105:ASN:HB3	1:A:105:ASN:HD21	12	0.19
(1,664)	1:A:105:ASN:HB2	1:A:105:ASN:HD21	15	0.19
(1,664)	1:A:105:ASN:HB3	1:A:105:ASN:HD21	15	0.19
(1,664)	1:A:105:ASN:HB2	1:A:105:ASN:HD21	16	0.19
(1,664)	1:A:105:ASN:HB3	1:A:105:ASN:HD21	16	0.19
(1,664)	1:A:105:ASN:HB2	1:A:105:ASN:HD21	18	0.19
(1,664)	1:A:105:ASN:HB3	1:A:105:ASN:HD21	18	0.19
(1,645)	1:A:101:ASN:HD22	1:A:101:ASN:H	6	0.19
(1,645)	1:A:101:ASN:HD22	1:A:101:ASN:H	18	0.19
(1,623)	1:A:30:ASP:HB2	1:A:12:ASN:HD22	8	0.19
(1,623)	1:A:30:ASP:HB3	1:A:12:ASN:HD22	8	0.19
(1,610)	1:A:14:GLN:HE22	1:A:29:GLU:H	19	0.19
(1,6)	1:A:23:ASP:H	1:A:24:GLY:H	13	0.19
(1,596)	1:A:74:GLY:HA2	1:A:69:ASN:HD21	8	0.19
(1,596)	1:A:74:GLY:HA3	1:A:69:ASN:HD21	8	0.19
(1,591)	1:A:69:ASN:HB2	1:A:69:ASN:HD21	16	0.19
(1,591)	1:A:69:ASN:HB3	1:A:69:ASN:HD21	16	0.19
(1,59)	1:A:65:CYS:H	1:A:66:ASP:H	12	0.19
(1,569)	1:A:85:CYS:H	1:A:84:THR:H	1	0.19

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,563)	1:A:91:THR:HG1	1:A:92:CYS:H	20	0.19
(1,563)	1:A:91:THR:HG21	1:A:92:CYS:H	20	0.19
(1,563)	1:A:91:THR:HG22	1:A:92:CYS:H	20	0.19
(1,563)	1:A:91:THR:HG23	1:A:92:CYS:H	20	0.19
(1,553)	1:A:115:ASP:HB2	1:A:104:CYS:H	9	0.19
(1,553)	1:A:115:ASP:HB3	1:A:104:CYS:H	9	0.19
(1,551)	1:A:104:CYS:HB2	1:A:104:CYS:H	18	0.19
(1,551)	1:A:104:CYS:HB3	1:A:104:CYS:H	18	0.19
(1,550)	1:A:104:CYS:HB2	1:A:104:CYS:H	18	0.19
(1,550)	1:A:104:CYS:HB3	1:A:104:CYS:H	18	0.19
(1,55)	1:A:71:CYS:H	1:A:70:ASP:H	17	0.19
(1,549)	1:A:115:ASP:HA	1:A:104:CYS:H	8	0.19
(1,516)	1:A:49:ILE:H	1:A:59:ILE:H	2	0.19
(1,510)	1:A:48:GLU:HB2	1:A:48:GLU:H	16	0.19
(1,510)	1:A:48:GLU:HB3	1:A:48:GLU:H	16	0.19
(1,501)	1:A:34:GLU:HB2	1:A:34:GLU:H	18	0.19
(1,501)	1:A:34:GLU:HB3	1:A:34:GLU:H	18	0.19
(1,499)	1:A:33:ASP:HB2	1:A:33:ASP:H	11	0.19
(1,499)	1:A:33:ASP:HB3	1:A:33:ASP:H	11	0.19
(1,499)	1:A:33:ASP:HB2	1:A:33:ASP:H	13	0.19
(1,499)	1:A:33:ASP:HB3	1:A:33:ASP:H	13	0.19
(1,475)	1:A:75:GLU:H	1:A:76:ASP:H	2	0.19
(1,462)	1:A:79:ASN:H	1:A:78:GLU:H	12	0.19
(1,454)	1:A:78:GLU:HG2	1:A:76:ASP:H	3	0.19
(1,454)	1:A:78:GLU:HG3	1:A:76:ASP:H	3	0.19
(1,454)	1:A:78:GLU:HG2	1:A:76:ASP:H	19	0.19
(1,454)	1:A:78:GLU:HG3	1:A:76:ASP:H	19	0.19
(1,451)	1:A:75:GLU:H	1:A:76:ASP:H	2	0.19
(1,447)	1:A:71:CYS:HA	1:A:74:GLY:H	20	0.19
(1,446)	1:A:73:SER:H	1:A:74:GLY:H	12	0.19
(1,446)	1:A:73:SER:H	1:A:74:GLY:H	15	0.19
(1,445)	1:A:75:GLU:H	1:A:74:GLY:H	18	0.19
(1,444)	1:A:76:ASP:H	1:A:74:GLY:H	13	0.19
(1,443)	1:A:73:SER:H	1:A:71:CYS:HB2	1	0.19
(1,443)	1:A:73:SER:H	1:A:71:CYS:HB3	1	0.19
(1,435)	1:A:72:ASP:HA	1:A:72:ASP:H	20	0.19
(1,433)	1:A:74:GLY:HA2	1:A:71:CYS:H	14	0.19
(1,433)	1:A:74:GLY:HA3	1:A:71:CYS:H	14	0.19
(1,414)	1:A:63:TRP:H	1:A:63:TRP:HB2	4	0.19
(1,414)	1:A:63:TRP:H	1:A:63:TRP:HB3	4	0.19
(1,390)	1:A:51:CYS:HB2	1:A:52:GLY:H	5	0.19
(1,390)	1:A:51:CYS:HB3	1:A:52:GLY:H	5	0.19

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,374)	1:A:61:VAL:H	1:A:49:ILE:H	13	0.19
(1,372)	1:A:48:GLU:H	1:A:48:GLU:HA	1	0.19
(1,372)	1:A:48:GLU:H	1:A:48:GLU:HA	11	0.19
(1,372)	1:A:48:GLU:H	1:A:48:GLU:HA	19	0.19
(1,351)	1:A:32:SER:H	1:A:33:ASP:H	16	0.19
(1,35)	1:A:115:ASP:H	1:A:116:GLU:H	16	0.19
(1,349)	1:A:32:SER:H	1:A:33:ASP:H	16	0.19
(1,343)	1:A:28:CYS:HB2	1:A:28:CYS:H	10	0.19
(1,343)	1:A:28:CYS:HB3	1:A:28:CYS:H	10	0.19
(1,343)	1:A:28:CYS:HB2	1:A:28:CYS:H	18	0.19
(1,343)	1:A:28:CYS:HB3	1:A:28:CYS:H	18	0.19
(1,335)	1:A:45:ARG:HD2	1:A:24:GLY:H	10	0.19
(1,335)	1:A:45:ARG:HD3	1:A:24:GLY:H	10	0.19
(1,313)	1:A:14:GLN:HG2	1:A:14:GLN:H	16	0.19
(1,313)	1:A:14:GLN:HG3	1:A:14:GLN:H	16	0.19
(1,298)	1:A:14:GLN:H	1:A:11:ASN:H	2	0.19
(1,290)	1:A:8:PHE:HA	1:A:9:VAL:H	7	0.19
(1,290)	1:A:8:PHE:HA	1:A:9:VAL:H	12	0.19
(1,283)	1:A:8:PHE:H	1:A:7:ASP:H	11	0.19
(1,28)	1:A:118:ASP:H	1:A:117:LEU:H	17	0.19
(1,279)	1:A:6:SER:HB2	1:A:6:SER:H	8	0.19
(1,279)	1:A:6:SER:HB3	1:A:6:SER:H	8	0.19
(1,277)	1:A:6:SER:HB2	1:A:6:SER:H	8	0.19
(1,277)	1:A:6:SER:HB3	1:A:6:SER:H	8	0.19
(1,240)	1:A:90:PHE:H	1:A:98:ILE:HD11	8	0.19
(1,240)	1:A:90:PHE:H	1:A:98:ILE:HD12	8	0.19
(1,240)	1:A:90:PHE:H	1:A:98:ILE:HD13	8	0.19
(1,240)	1:A:90:PHE:H	1:A:98:ILE:HD11	19	0.19
(1,240)	1:A:90:PHE:H	1:A:98:ILE:HD12	19	0.19
(1,240)	1:A:90:PHE:H	1:A:98:ILE:HD13	19	0.19
(1,228)	1:A:92:CYS:HB2	1:A:93:SER:H	11	0.19
(1,228)	1:A:92:CYS:HB3	1:A:93:SER:H	11	0.19
(1,226)	1:A:92:CYS:HB2	1:A:94:SER:H	4	0.19
(1,226)	1:A:92:CYS:HB3	1:A:94:SER:H	4	0.19
(1,22)	1:A:91:THR:H	1:A:92:CYS:H	15	0.19
(1,215)	1:A:96:ARG:H	1:A:92:CYS:HB2	8	0.19
(1,215)	1:A:96:ARG:H	1:A:92:CYS:HB3	8	0.19
(1,203)	1:A:89:GLU:HB2	1:A:98:ILE:H	1	0.19
(1,203)	1:A:89:GLU:HB3	1:A:98:ILE:H	1	0.19
(1,187)	1:A:103:VAL:HG11	1:A:102:PHE:H	13	0.19
(1,187)	1:A:103:VAL:HG12	1:A:102:PHE:H	13	0.19
(1,187)	1:A:103:VAL:HG13	1:A:102:PHE:H	13	0.19

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,187)	1:A:103:VAL:HG21	1:A:102:PHE:H	13	0.19
(1,187)	1:A:103:VAL:HG22	1:A:102:PHE:H	13	0.19
(1,187)	1:A:103:VAL:HG23	1:A:102:PHE:H	13	0.19
(1,180)	1:A:99:SER:HB2	1:A:102:PHE:H	4	0.19
(1,180)	1:A:99:SER:HB3	1:A:102:PHE:H	4	0.19
(1,180)	1:A:99:SER:HB2	1:A:102:PHE:H	11	0.19
(1,180)	1:A:99:SER:HB3	1:A:102:PHE:H	11	0.19
(1,14)	1:A:110:CYS:H	1:A:109:ASP:H	16	0.19
(1,126)	1:A:117:LEU:HD11	1:A:114:SER:H	9	0.19
(1,126)	1:A:117:LEU:HD12	1:A:114:SER:H	9	0.19
(1,126)	1:A:117:LEU:HD13	1:A:114:SER:H	9	0.19
(1,126)	1:A:117:LEU:HD21	1:A:114:SER:H	9	0.19
(1,126)	1:A:117:LEU:HD22	1:A:114:SER:H	9	0.19
(1,126)	1:A:117:LEU:HD23	1:A:114:SER:H	9	0.19
(1,123)	1:A:115:ASP:HB2	1:A:115:ASP:H	11	0.19
(1,123)	1:A:115:ASP:HB3	1:A:115:ASP:H	11	0.19
(4,7)	1:A:8:PHE:H	1:A:16:VAL:O	5	0.18
(3,7)	2:A:202:CA:CA	1:A:63:TRP:O	20	0.18
(2,97)	1:A:20:TRP:HB2	1:A:20:TRP:H	3	0.18
(2,97)	1:A:20:TRP:HB3	1:A:20:TRP:H	3	0.18
(2,97)	1:A:21:LYS:HA	1:A:20:TRP:H	3	0.18
(2,89)	1:A:107:GLN:HB2	1:A:108:ASP:H	16	0.18
(2,89)	1:A:107:GLN:HB3	1:A:108:ASP:H	16	0.18
(2,80)	1:A:41:MET:HA	1:A:56:THR:H	10	0.18
(2,80)	1:A:42:ARG:HA	1:A:56:THR:H	10	0.18
(2,80)	1:A:56:THR:HB	1:A:56:THR:H	10	0.18
(2,8)	1:A:24:GLY:HA2	1:A:46:ILE:H	4	0.18
(2,8)	1:A:24:GLY:HA3	1:A:46:ILE:H	4	0.18
(2,8)	1:A:45:ARG:HA	1:A:46:ILE:H	4	0.18
(2,56)	1:A:114:SER:HA	1:A:117:LEU:H	3	0.18
(2,56)	1:A:114:SER:HA	1:A:117:LEU:H	7	0.18
(2,5)	1:A:39:CYS:HB2	1:A:42:ARG:H	14	0.18
(2,5)	1:A:39:CYS:HB3	1:A:42:ARG:H	14	0.18
(2,5)	1:A:42:ARG:HD2	1:A:42:ARG:H	14	0.18
(2,5)	1:A:42:ARG:HD3	1:A:42:ARG:H	14	0.18
(2,5)	1:A:39:CYS:HB2	1:A:42:ARG:H	18	0.18
(2,5)	1:A:39:CYS:HB3	1:A:42:ARG:H	18	0.18
(2,5)	1:A:42:ARG:HD2	1:A:42:ARG:H	18	0.18
(2,5)	1:A:42:ARG:HD3	1:A:42:ARG:H	18	0.18
(2,382)	1:A:72:ASP:HB2	1:A:73:SER:H	12	0.18
(2,382)	1:A:72:ASP:HB3	1:A:73:SER:H	12	0.18
(2,375)	1:A:48:GLU:HB2	1:A:61:VAL:H	4	0.18

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,375)	1:A:48:GLU:HB3	1:A:61:VAL:H	4	0.18
(2,375)	1:A:60:PRO:HD3	1:A:61:VAL:H	4	0.18
(2,375)	1:A:48:GLU:HB2	1:A:61:VAL:H	7	0.18
(2,375)	1:A:48:GLU:HB3	1:A:61:VAL:H	7	0.18
(2,375)	1:A:60:PRO:HD3	1:A:61:VAL:H	7	0.18
(2,375)	1:A:48:GLU:HB2	1:A:61:VAL:H	15	0.18
(2,375)	1:A:48:GLU:HB3	1:A:61:VAL:H	15	0.18
(2,375)	1:A:60:PRO:HD3	1:A:61:VAL:H	15	0.18
(2,365)	1:A:69:ASN:HA	1:A:70:ASP:H	4	0.18
(2,365)	1:A:70:ASP:HA	1:A:70:ASP:H	4	0.18
(2,349)	1:A:99:SER:HB2	1:A:101:ASN:H	7	0.18
(2,349)	1:A:99:SER:HB3	1:A:101:ASN:H	7	0.18
(2,349)	1:A:102:PHE:HB2	1:A:101:ASN:H	7	0.18
(2,349)	1:A:102:PHE:HB3	1:A:101:ASN:H	7	0.18
(2,349)	1:A:99:SER:HB2	1:A:101:ASN:H	13	0.18
(2,349)	1:A:99:SER:HB3	1:A:101:ASN:H	13	0.18
(2,349)	1:A:102:PHE:HB2	1:A:101:ASN:H	13	0.18
(2,349)	1:A:102:PHE:HB3	1:A:101:ASN:H	13	0.18
(2,349)	1:A:99:SER:HB2	1:A:101:ASN:H	20	0.18
(2,349)	1:A:99:SER:HB3	1:A:101:ASN:H	20	0.18
(2,349)	1:A:102:PHE:HB2	1:A:101:ASN:H	20	0.18
(2,349)	1:A:102:PHE:HB3	1:A:101:ASN:H	20	0.18
(2,345)	1:A:84:THR:HG1	1:A:85:CYS:H	13	0.18
(2,345)	1:A:84:THR:HG21	1:A:85:CYS:H	13	0.18
(2,345)	1:A:84:THR:HG22	1:A:85:CYS:H	13	0.18
(2,345)	1:A:84:THR:HG23	1:A:85:CYS:H	13	0.18
(2,345)	1:A:91:THR:HG21	1:A:85:CYS:H	13	0.18
(2,345)	1:A:91:THR:HG22	1:A:85:CYS:H	13	0.18
(2,345)	1:A:91:THR:HG23	1:A:85:CYS:H	13	0.18
(2,331)	1:A:2:THR:H	1:A:99:SER:H	8	0.18
(2,331)	1:A:3:CYS:H	1:A:99:SER:H	8	0.18
(2,331)	1:A:80:CYS:H	1:A:99:SER:H	8	0.18
(2,331)	1:A:81:GLY:H	1:A:99:SER:H	8	0.18
(2,331)	1:A:101:ASN:H	1:A:99:SER:H	8	0.18
(2,328)	1:A:49:ILE:HG21	1:A:62:SER:H	11	0.18
(2,328)	1:A:49:ILE:HG22	1:A:62:SER:H	11	0.18
(2,328)	1:A:49:ILE:HG23	1:A:62:SER:H	11	0.18
(2,328)	1:A:59:ILE:HD11	1:A:62:SER:H	11	0.18
(2,328)	1:A:59:ILE:HD12	1:A:62:SER:H	11	0.18
(2,328)	1:A:59:ILE:HD13	1:A:62:SER:H	11	0.18
(2,328)	1:A:60:PRO:HB2	1:A:62:SER:H	11	0.18
(2,328)	1:A:60:PRO:HB3	1:A:62:SER:H	11	0.18

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,328)	1:A:61:VAL:HG11	1:A:62:SER:H	11	0.18
(2,328)	1:A:61:VAL:HG12	1:A:62:SER:H	11	0.18
(2,328)	1:A:61:VAL:HG13	1:A:62:SER:H	11	0.18
(2,328)	1:A:61:VAL:HG21	1:A:62:SER:H	11	0.18
(2,328)	1:A:61:VAL:HG21	1:A:62:SER:H	11	0.18
(2,328)	1:A:61:VAL:HG22	1:A:62:SER:H	11	0.18
(2,328)	1:A:61:VAL:HG22	1:A:62:SER:H	11	0.18
(2,328)	1:A:61:VAL:HG23	1:A:62:SER:H	11	0.18
(2,328)	1:A:61:VAL:HG23	1:A:62:SER:H	11	0.18
(2,327)	1:A:64:ARG:HG2	1:A:71:CYS:H	6	0.18
(2,327)	1:A:64:ARG:HG3	1:A:71:CYS:H	6	0.18
(2,327)	1:A:68:GLU:HG2	1:A:71:CYS:H	6	0.18
(2,327)	1:A:68:GLU:HG3	1:A:71:CYS:H	6	0.18
(2,303)	1:A:75:GLU:HB2	1:A:77:GLU:H	20	0.18
(2,303)	1:A:75:GLU:HB3	1:A:77:GLU:H	20	0.18
(2,303)	1:A:77:GLU:HG2	1:A:77:GLU:H	20	0.18
(2,303)	1:A:77:GLU:HG3	1:A:77:GLU:H	20	0.18
(2,303)	1:A:78:GLU:HB2	1:A:77:GLU:H	20	0.18
(2,303)	1:A:78:GLU:HB3	1:A:77:GLU:H	20	0.18
(2,303)	1:A:87:PRO:HG2	1:A:77:GLU:H	20	0.18
(2,303)	1:A:87:PRO:HG3	1:A:77:GLU:H	20	0.18
(2,296)	1:A:113:GLY:HA2	1:A:117:LEU:H	2	0.18
(2,296)	1:A:113:GLY:HA3	1:A:117:LEU:H	2	0.18
(2,296)	1:A:114:SER:HB2	1:A:117:LEU:H	2	0.18
(2,296)	1:A:114:SER:HB3	1:A:117:LEU:H	2	0.18
(2,292)	1:A:3:CYS:HB2	1:A:8:PHE:H	3	0.18
(2,292)	1:A:3:CYS:HB3	1:A:8:PHE:H	3	0.18
(2,292)	1:A:7:ASP:HB2	1:A:8:PHE:H	3	0.18
(2,292)	1:A:7:ASP:HB3	1:A:8:PHE:H	3	0.18
(2,292)	1:A:8:PHE:HB2	1:A:8:PHE:H	3	0.18
(2,292)	1:A:8:PHE:HB3	1:A:8:PHE:H	3	0.18
(2,292)	1:A:3:CYS:HB2	1:A:8:PHE:H	4	0.18
(2,292)	1:A:3:CYS:HB3	1:A:8:PHE:H	4	0.18
(2,292)	1:A:7:ASP:HB2	1:A:8:PHE:H	4	0.18
(2,292)	1:A:7:ASP:HB3	1:A:8:PHE:H	4	0.18
(2,292)	1:A:8:PHE:HB2	1:A:8:PHE:H	4	0.18
(2,292)	1:A:8:PHE:HB3	1:A:8:PHE:H	4	0.18
(2,261)	1:A:110:CYS:HB2	1:A:110:CYS:H	4	0.18
(2,261)	1:A:110:CYS:HB3	1:A:110:CYS:H	4	0.18
(2,261)	1:A:111:SER:HB2	1:A:110:CYS:H	4	0.18
(2,261)	1:A:113:GLY:HA2	1:A:110:CYS:H	4	0.18
(2,261)	1:A:113:GLY:HA3	1:A:110:CYS:H	4	0.18

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,261)	1:A:110:CYS:HB2	1:A:110:CYS:H	7	0.18
(2,261)	1:A:110:CYS:HB3	1:A:110:CYS:H	7	0.18
(2,261)	1:A:111:SER:HB2	1:A:110:CYS:H	7	0.18
(2,261)	1:A:113:GLY:HA2	1:A:110:CYS:H	7	0.18
(2,261)	1:A:113:GLY:HA3	1:A:110:CYS:H	7	0.18
(2,259)	1:A:69:ASN:HB2	1:A:69:ASN:HD21	1	0.18
(2,259)	1:A:69:ASN:HB3	1:A:69:ASN:HD21	1	0.18
(2,259)	1:A:70:ASP:HB2	1:A:69:ASN:HD21	1	0.18
(2,259)	1:A:70:ASP:HB3	1:A:69:ASN:HD21	1	0.18
(2,259)	1:A:69:ASN:HB2	1:A:69:ASN:HD21	8	0.18
(2,259)	1:A:69:ASN:HB3	1:A:69:ASN:HD21	8	0.18
(2,259)	1:A:70:ASP:HB2	1:A:69:ASN:HD21	8	0.18
(2,259)	1:A:70:ASP:HB3	1:A:69:ASN:HD21	8	0.18
(2,259)	1:A:69:ASN:HB2	1:A:69:ASN:HD21	11	0.18
(2,259)	1:A:69:ASN:HB3	1:A:69:ASN:HD21	11	0.18
(2,259)	1:A:70:ASP:HB2	1:A:69:ASN:HD21	11	0.18
(2,259)	1:A:70:ASP:HB3	1:A:69:ASN:HD21	11	0.18
(2,25)	1:A:79:ASN:HD22	1:A:80:CYS:HA	14	0.18
(2,25)	1:A:86:SER:HA	1:A:80:CYS:HA	14	0.18
(2,25)	1:A:79:ASN:HD22	1:A:80:CYS:HA	18	0.18
(2,25)	1:A:86:SER:HA	1:A:80:CYS:HA	18	0.18
(2,246)	1:A:90:PHE:HB2	1:A:100:ARG:H	11	0.18
(2,246)	1:A:90:PHE:HB3	1:A:100:ARG:H	11	0.18
(2,22)	1:A:75:GLU:HA	1:A:78:GLU:H	15	0.18
(2,22)	1:A:87:PRO:HD2	1:A:78:GLU:H	15	0.18
(2,188)	1:A:16:VAL:HG11	1:A:19:ARG:H	13	0.18
(2,188)	1:A:16:VAL:HG12	1:A:19:ARG:H	13	0.18
(2,188)	1:A:16:VAL:HG13	1:A:19:ARG:H	13	0.18
(2,188)	1:A:16:VAL:HG21	1:A:19:ARG:H	13	0.18
(2,188)	1:A:16:VAL:HG22	1:A:19:ARG:H	13	0.18
(2,188)	1:A:16:VAL:HG23	1:A:19:ARG:H	13	0.18
(2,177)	1:A:22:CYS:HB2	1:A:44:CYS:H	10	0.18
(2,177)	1:A:22:CYS:HB3	1:A:44:CYS:H	10	0.18
(2,177)	1:A:44:CYS:HB2	1:A:44:CYS:H	10	0.18
(2,177)	1:A:44:CYS:HB3	1:A:44:CYS:H	10	0.18
(2,173)	1:A:69:ASN:HD21	1:A:69:ASN:H	8	0.18
(2,164)	1:A:14:GLN:HB2	1:A:14:GLN:H	4	0.18
(2,164)	1:A:14:GLN:HB3	1:A:14:GLN:H	4	0.18
(2,160)	1:A:43:THR:HG1	1:A:43:THR:H	1	0.18
(2,160)	1:A:43:THR:HG1	1:A:43:THR:H	1	0.18
(2,160)	1:A:43:THR:HG21	1:A:43:THR:H	1	0.18
(2,160)	1:A:43:THR:HG21	1:A:43:THR:H	1	0.18

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,160)	1:A:43:THR:HG22	1:A:43:THR:H	1	0.18
(2,160)	1:A:43:THR:HG22	1:A:43:THR:H	1	0.18
(2,160)	1:A:43:THR:HG23	1:A:43:THR:H	1	0.18
(2,160)	1:A:43:THR:HG23	1:A:43:THR:H	1	0.18
(2,160)	1:A:56:THR:HG1	1:A:43:THR:H	1	0.18
(2,160)	1:A:56:THR:HG21	1:A:43:THR:H	1	0.18
(2,160)	1:A:56:THR:HG22	1:A:43:THR:H	1	0.18
(2,160)	1:A:56:THR:HG23	1:A:43:THR:H	1	0.18
(2,149)	1:A:49:ILE:HG21	1:A:59:ILE:H	11	0.18
(2,149)	1:A:49:ILE:HG22	1:A:59:ILE:H	11	0.18
(2,149)	1:A:49:ILE:HG23	1:A:59:ILE:H	11	0.18
(2,149)	1:A:59:ILE:HD11	1:A:59:ILE:H	11	0.18
(2,149)	1:A:59:ILE:HD12	1:A:59:ILE:H	11	0.18
(2,149)	1:A:59:ILE:HD13	1:A:59:ILE:H	11	0.18
(2,149)	1:A:59:ILE:HG21	1:A:59:ILE:H	11	0.18
(2,149)	1:A:59:ILE:HG22	1:A:59:ILE:H	11	0.18
(2,149)	1:A:59:ILE:HG23	1:A:59:ILE:H	11	0.18
(2,134)	1:A:79:ASN:HB2	1:A:85:CYS:H	18	0.18
(2,134)	1:A:79:ASN:HB3	1:A:85:CYS:H	18	0.18
(2,134)	1:A:97:CYS:HB2	1:A:85:CYS:H	18	0.18
(2,134)	1:A:97:CYS:HB3	1:A:85:CYS:H	18	0.18
(2,13)	1:A:110:CYS:HB2	1:A:113:GLY:H	8	0.18
(2,13)	1:A:110:CYS:HB3	1:A:113:GLY:H	8	0.18
(2,13)	1:A:111:SER:HB2	1:A:113:GLY:H	8	0.18
(2,13)	1:A:111:SER:HB3	1:A:113:GLY:H	8	0.18
(2,13)	1:A:113:GLY:HA2	1:A:113:GLY:H	8	0.18
(2,13)	1:A:113:GLY:HA3	1:A:113:GLY:H	8	0.18
(2,116)	1:A:37:GLU:HB2	1:A:38:GLN:HE22	12	0.18
(2,116)	1:A:37:GLU:HB3	1:A:38:GLN:HE22	12	0.18
(2,116)	1:A:37:GLU:HB3	1:A:38:GLN:HE22	12	0.18
(2,116)	1:A:38:GLN:HB2	1:A:38:GLN:HE22	12	0.18
(2,116)	1:A:38:GLN:HB2	1:A:38:GLN:HE22	12	0.18
(2,116)	1:A:38:GLN:HB3	1:A:38:GLN:HE22	12	0.18
(2,110)	1:A:17:PRO:HB2	1:A:19:ARG:H	16	0.18
(2,110)	1:A:17:PRO:HB3	1:A:19:ARG:H	16	0.18
(2,110)	1:A:19:ARG:HB2	1:A:19:ARG:H	16	0.18
(2,110)	1:A:19:ARG:HB3	1:A:19:ARG:H	16	0.18
(2,104)	1:A:63:TRP:HB2	1:A:80:CYS:H	14	0.18
(2,104)	1:A:63:TRP:HB3	1:A:80:CYS:H	14	0.18
(2,104)	1:A:80:CYS:HB3	1:A:80:CYS:H	14	0.18
(2,101)	1:A:37:GLU:HB2	1:A:38:GLN:HE21	8	0.18
(2,101)	1:A:37:GLU:HB3	1:A:38:GLN:HE21	8	0.18

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,101)	1:A:38:GLN:HB2	1:A:38:GLN:HE21	8	0.18
(2,101)	1:A:38:GLN:HB3	1:A:38:GLN:HE21	8	0.18
(2,101)	1:A:37:GLU:HB2	1:A:38:GLN:HE21	12	0.18
(2,101)	1:A:37:GLU:HB3	1:A:38:GLN:HE21	12	0.18
(2,101)	1:A:38:GLN:HB2	1:A:38:GLN:HE21	12	0.18
(2,101)	1:A:38:GLN:HB3	1:A:38:GLN:HE21	12	0.18
(1,925)	1:A:8:PHE:HB3	1:A:16:VAL:HG21	4	0.18
(1,925)	1:A:8:PHE:HB3	1:A:16:VAL:HG22	4	0.18
(1,925)	1:A:8:PHE:HB3	1:A:16:VAL:HG23	4	0.18
(1,925)	1:A:8:PHE:HB3	1:A:16:VAL:HG21	19	0.18
(1,925)	1:A:8:PHE:HB3	1:A:16:VAL:HG22	19	0.18
(1,925)	1:A:8:PHE:HB3	1:A:16:VAL:HG23	19	0.18
(1,911)	1:A:57:GLN:HE21	1:A:71:CYS:H	3	0.18
(1,911)	1:A:57:GLN:HE21	1:A:71:CYS:H	6	0.18
(1,909)	1:A:43:THR:HG1	1:A:46:ILE:H	2	0.18
(1,909)	1:A:43:THR:HG21	1:A:46:ILE:H	2	0.18
(1,909)	1:A:43:THR:HG22	1:A:46:ILE:H	2	0.18
(1,909)	1:A:43:THR:HG23	1:A:46:ILE:H	2	0.18
(1,909)	1:A:43:THR:HG1	1:A:46:ILE:H	7	0.18
(1,909)	1:A:43:THR:HG21	1:A:46:ILE:H	7	0.18
(1,909)	1:A:43:THR:HG22	1:A:46:ILE:H	7	0.18
(1,909)	1:A:43:THR:HG23	1:A:46:ILE:H	7	0.18
(1,891)	1:A:64:ARG:H	1:A:80:CYS:HB2	4	0.18
(1,891)	1:A:64:ARG:H	1:A:80:CYS:HB3	4	0.18
(1,884)	1:A:50:SER:H	1:A:59:ILE:H	6	0.18
(1,884)	1:A:50:SER:H	1:A:59:ILE:H	8	0.18
(1,884)	1:A:50:SER:H	1:A:59:ILE:H	13	0.18
(1,884)	1:A:50:SER:H	1:A:59:ILE:H	19	0.18
(1,872)	1:A:32:SER:H	1:A:33:ASP:HB2	12	0.18
(1,872)	1:A:32:SER:H	1:A:33:ASP:HB3	12	0.18
(1,869)	1:A:14:GLN:HE22	1:A:28:CYS:H	3	0.18
(1,867)	1:A:34:GLU:HG2	1:A:24:GLY:H	18	0.18
(1,867)	1:A:34:GLU:HG3	1:A:24:GLY:H	18	0.18
(1,864)	1:A:20:TRP:HA	1:A:20:TRP:HE1	8	0.18
(1,863)	1:A:17:PRO:HD2	1:A:20:TRP:HE1	19	0.18
(1,863)	1:A:17:PRO:HD3	1:A:20:TRP:HE1	19	0.18
(1,844)	1:A:79:ASN:HB2	1:A:92:CYS:H	15	0.18
(1,844)	1:A:79:ASN:HB3	1:A:92:CYS:H	15	0.18
(1,842)	1:A:80:CYS:HA	1:A:84:THR:H	2	0.18
(1,842)	1:A:80:CYS:HA	1:A:84:THR:H	13	0.18
(1,838)	1:A:58:CYS:HA	1:A:52:GLY:H	20	0.18
(1,837)	1:A:50:SER:H	1:A:45:ARG:HD2	2	0.18

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,837)	1:A:50:SER:H	1:A:45:ARG:HD3	2	0.18
(1,837)	1:A:50:SER:H	1:A:45:ARG:HD2	16	0.18
(1,837)	1:A:50:SER:H	1:A:45:ARG:HD3	16	0.18
(1,832)	1:A:35:SER:H	1:A:38:GLN:H	3	0.18
(1,822)	1:A:113:GLY:HA2	1:A:116:GLU:H	7	0.18
(1,822)	1:A:113:GLY:HA3	1:A:116:GLU:H	7	0.18
(1,810)	1:A:101:ASN:HD21	1:A:105:ASN:HD22	4	0.18
(1,809)	1:A:106:GLY:H	1:A:104:CYS:H	1	0.18
(1,809)	1:A:106:GLY:H	1:A:104:CYS:H	8	0.18
(1,809)	1:A:106:GLY:H	1:A:104:CYS:H	20	0.18
(1,806)	1:A:101:ASN:HD21	1:A:102:PHE:H	11	0.18
(1,801)	1:A:102:PHE:HB2	1:A:98:ILE:H	7	0.18
(1,801)	1:A:102:PHE:HB3	1:A:98:ILE:H	7	0.18
(1,794)	1:A:82:ASN:HD22	1:A:94:SER:H	3	0.18
(1,791)	1:A:85:CYS:HB2	1:A:89:GLU:H	14	0.18
(1,791)	1:A:85:CYS:HB3	1:A:89:GLU:H	14	0.18
(1,788)	1:A:80:CYS:H	1:A:78:GLU:H	16	0.18
(1,788)	1:A:80:CYS:H	1:A:78:GLU:H	20	0.18
(1,784)	1:A:71:CYS:HB2	1:A:76:ASP:H	7	0.18
(1,784)	1:A:71:CYS:HB3	1:A:76:ASP:H	7	0.18
(1,772)	1:A:68:GLU:H	1:A:64:ARG:H	13	0.18
(1,766)	1:A:48:GLU:HB2	1:A:58:CYS:H	18	0.18
(1,766)	1:A:48:GLU:HB3	1:A:58:CYS:H	18	0.18
(1,759)	1:A:57:GLN:HE21	1:A:71:CYS:HA	3	0.18
(1,744)	1:A:48:GLU:H	1:A:47:HIS:H	2	0.18
(1,731)	1:A:28:CYS:HB2	1:A:32:SER:H	14	0.18
(1,731)	1:A:28:CYS:HB3	1:A:32:SER:H	14	0.18
(1,726)	1:A:34:GLU:HG2	1:A:27:ASP:H	3	0.18
(1,726)	1:A:34:GLU:HG3	1:A:27:ASP:H	3	0.18
(1,726)	1:A:34:GLU:HG2	1:A:27:ASP:H	13	0.18
(1,726)	1:A:34:GLU:HG3	1:A:27:ASP:H	13	0.18
(1,724)	1:A:34:GLU:HB2	1:A:25:ASP:H	1	0.18
(1,724)	1:A:34:GLU:HB3	1:A:25:ASP:H	1	0.18
(1,724)	1:A:34:GLU:HB2	1:A:25:ASP:H	9	0.18
(1,724)	1:A:34:GLU:HB3	1:A:25:ASP:H	9	0.18
(1,718)	1:A:16:VAL:HB	1:A:20:TRP:HE1	8	0.18
(1,718)	1:A:16:VAL:HB	1:A:20:TRP:HE1	10	0.18
(1,69)	1:A:78:GLU:HG2	1:A:78:GLU:H	1	0.18
(1,69)	1:A:78:GLU:HG3	1:A:78:GLU:H	1	0.18
(1,689)	1:A:69:ASN:HD21	1:A:69:ASN:H	8	0.18
(1,683)	1:A:78:GLU:HG2	1:A:79:ASN:HD21	16	0.18
(1,683)	1:A:78:GLU:HG3	1:A:79:ASN:HD21	16	0.18

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,680)	1:A:79:ASN:HD22	1:A:79:ASN:HB2	14	0.18
(1,680)	1:A:79:ASN:HD22	1:A:79:ASN:HB3	14	0.18
(1,680)	1:A:79:ASN:HD22	1:A:79:ASN:HB2	17	0.18
(1,680)	1:A:79:ASN:HD22	1:A:79:ASN:HB3	17	0.18
(1,679)	1:A:78:GLU:HG2	1:A:79:ASN:HD22	6	0.18
(1,679)	1:A:78:GLU:HG3	1:A:79:ASN:HD22	6	0.18
(1,664)	1:A:105:ASN:HB2	1:A:105:ASN:HD21	1	0.18
(1,664)	1:A:105:ASN:HB3	1:A:105:ASN:HD21	1	0.18
(1,664)	1:A:105:ASN:HB2	1:A:105:ASN:HD21	5	0.18
(1,664)	1:A:105:ASN:HB3	1:A:105:ASN:HD21	5	0.18
(1,664)	1:A:105:ASN:HB2	1:A:105:ASN:HD21	8	0.18
(1,664)	1:A:105:ASN:HB3	1:A:105:ASN:HD21	8	0.18
(1,664)	1:A:105:ASN:HB2	1:A:105:ASN:HD21	9	0.18
(1,664)	1:A:105:ASN:HB3	1:A:105:ASN:HD21	9	0.18
(1,664)	1:A:105:ASN:HB2	1:A:105:ASN:HD21	10	0.18
(1,664)	1:A:105:ASN:HB3	1:A:105:ASN:HD21	10	0.18
(1,664)	1:A:105:ASN:HB2	1:A:105:ASN:HD21	13	0.18
(1,664)	1:A:105:ASN:HB3	1:A:105:ASN:HD21	13	0.18
(1,664)	1:A:105:ASN:HB2	1:A:105:ASN:HD21	20	0.18
(1,664)	1:A:105:ASN:HB3	1:A:105:ASN:HD21	20	0.18
(1,636)	1:A:78:GLU:HB2	1:A:79:ASN:HD22	2	0.18
(1,636)	1:A:78:GLU:HB2	1:A:79:ASN:HD22	2	0.18
(1,636)	1:A:78:GLU:HB3	1:A:79:ASN:HD22	2	0.18
(1,636)	1:A:78:GLU:HB3	1:A:79:ASN:HD22	2	0.18
(1,628)	1:A:71:CYS:HB2	1:A:57:GLN:HE22	9	0.18
(1,628)	1:A:71:CYS:HB3	1:A:57:GLN:HE22	9	0.18
(1,626)	1:A:71:CYS:HA	1:A:57:GLN:HE22	4	0.18
(1,623)	1:A:30:ASP:HB2	1:A:12:ASN:HD22	6	0.18
(1,623)	1:A:30:ASP:HB3	1:A:12:ASN:HD22	6	0.18
(1,612)	1:A:15:CYS:H	1:A:14:GLN:HE22	19	0.18
(1,607)	1:A:11:ASN:HB2	1:A:11:ASN:HD21	11	0.18
(1,607)	1:A:11:ASN:HB3	1:A:11:ASN:HD21	11	0.18
(1,607)	1:A:11:ASN:HB2	1:A:11:ASN:HD21	16	0.18
(1,607)	1:A:11:ASN:HB3	1:A:11:ASN:HD21	16	0.18
(1,607)	1:A:11:ASN:HB2	1:A:11:ASN:HD21	19	0.18
(1,607)	1:A:11:ASN:HB3	1:A:11:ASN:HD21	19	0.18
(1,6)	1:A:23:ASP:H	1:A:24:GLY:H	6	0.18
(1,6)	1:A:23:ASP:H	1:A:24:GLY:H	7	0.18
(1,591)	1:A:69:ASN:HB2	1:A:69:ASN:HD21	3	0.18
(1,591)	1:A:69:ASN:HB3	1:A:69:ASN:HD21	3	0.18
(1,59)	1:A:65:CYS:H	1:A:66:ASP:H	19	0.18
(1,586)	1:A:69:ASN:HA	1:A:64:ARG:H	10	0.18

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,585)	1:A:28:CYS:H	1:A:27:ASP:H	1	0.18
(1,580)	1:A:48:GLU:HG2	1:A:49:ILE:H	7	0.18
(1,580)	1:A:48:GLU:HG3	1:A:49:ILE:H	7	0.18
(1,578)	1:A:52:GLY:H	1:A:50:SER:HB2	10	0.18
(1,578)	1:A:52:GLY:H	1:A:50:SER:HB3	10	0.18
(1,569)	1:A:85:CYS:H	1:A:84:THR:H	8	0.18
(1,543)	1:A:112:ASP:HB2	1:A:114:SER:H	13	0.18
(1,543)	1:A:112:ASP:HB3	1:A:114:SER:H	13	0.18
(1,541)	1:A:115:ASP:HB2	1:A:116:GLU:H	3	0.18
(1,541)	1:A:115:ASP:HB3	1:A:116:GLU:H	3	0.18
(1,516)	1:A:49:ILE:H	1:A:59:ILE:H	20	0.18
(1,504)	1:A:39:CYS:HB2	1:A:39:CYS:H	12	0.18
(1,504)	1:A:39:CYS:HB3	1:A:39:CYS:H	12	0.18
(1,499)	1:A:33:ASP:HB2	1:A:33:ASP:H	16	0.18
(1,499)	1:A:33:ASP:HB3	1:A:33:ASP:H	16	0.18
(1,483)	1:A:10:CYS:HB2	1:A:14:GLN:H	15	0.18
(1,483)	1:A:10:CYS:HB3	1:A:14:GLN:H	15	0.18
(1,482)	1:A:11:ASN:HD21	1:A:11:ASN:H	16	0.18
(1,476)	1:A:7:ASP:H	1:A:3:CYS:HB2	2	0.18
(1,476)	1:A:7:ASP:H	1:A:3:CYS:HB3	2	0.18
(1,475)	1:A:75:GLU:H	1:A:76:ASP:H	1	0.18
(1,475)	1:A:75:GLU:H	1:A:76:ASP:H	12	0.18
(1,475)	1:A:75:GLU:H	1:A:76:ASP:H	20	0.18
(1,473)	1:A:85:CYS:H	1:A:86:SER:H	2	0.18
(1,468)	1:A:78:GLU:HG2	1:A:79:ASN:H	2	0.18
(1,468)	1:A:78:GLU:HG3	1:A:79:ASN:H	2	0.18
(1,468)	1:A:78:GLU:HG2	1:A:79:ASN:H	11	0.18
(1,468)	1:A:78:GLU:HG3	1:A:79:ASN:H	11	0.18
(1,466)	1:A:80:CYS:HA	1:A:79:ASN:H	1	0.18
(1,466)	1:A:80:CYS:HA	1:A:79:ASN:H	5	0.18
(1,466)	1:A:80:CYS:HA	1:A:79:ASN:H	9	0.18
(1,462)	1:A:79:ASN:H	1:A:78:GLU:H	15	0.18
(1,460)	1:A:74:GLY:HA2	1:A:77:GLU:H	2	0.18
(1,460)	1:A:74:GLY:HA3	1:A:77:GLU:H	2	0.18
(1,451)	1:A:75:GLU:H	1:A:76:ASP:H	1	0.18
(1,451)	1:A:75:GLU:H	1:A:76:ASP:H	12	0.18
(1,451)	1:A:75:GLU:H	1:A:76:ASP:H	20	0.18
(1,445)	1:A:75:GLU:H	1:A:74:GLY:H	12	0.18
(1,443)	1:A:73:SER:H	1:A:71:CYS:HB2	12	0.18
(1,443)	1:A:73:SER:H	1:A:71:CYS:HB3	12	0.18
(1,443)	1:A:73:SER:H	1:A:71:CYS:HB2	14	0.18
(1,443)	1:A:73:SER:H	1:A:71:CYS:HB3	14	0.18

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,42)	1:A:96:ARG:H	1:A:97:CYS:H	2	0.18
(1,419)	1:A:65:CYS:HB2	1:A:66:ASP:H	13	0.18
(1,419)	1:A:65:CYS:HB3	1:A:66:ASP:H	13	0.18
(1,415)	1:A:64:ARG:HA	1:A:65:CYS:H	6	0.18
(1,41)	1:A:96:ARG:H	1:A:97:CYS:H	2	0.18
(1,409)	1:A:60:PRO:HA	1:A:61:VAL:H	1	0.18
(1,399)	1:A:54:HIS:H	1:A:53:ALA:HB1	1	0.18
(1,399)	1:A:54:HIS:H	1:A:53:ALA:HB2	1	0.18
(1,399)	1:A:54:HIS:H	1:A:53:ALA:HB3	1	0.18
(1,390)	1:A:51:CYS:HB2	1:A:52:GLY:H	8	0.18
(1,390)	1:A:51:CYS:HB3	1:A:52:GLY:H	8	0.18
(1,390)	1:A:51:CYS:HB2	1:A:52:GLY:H	13	0.18
(1,390)	1:A:51:CYS:HB3	1:A:52:GLY:H	13	0.18
(1,390)	1:A:51:CYS:HB2	1:A:52:GLY:H	16	0.18
(1,390)	1:A:51:CYS:HB3	1:A:52:GLY:H	16	0.18
(1,378)	1:A:48:GLU:HG2	1:A:49:ILE:H	7	0.18
(1,378)	1:A:48:GLU:HG3	1:A:49:ILE:H	7	0.18
(1,372)	1:A:48:GLU:H	1:A:48:GLU:HA	8	0.18
(1,369)	1:A:43:THR:HB	1:A:44:CYS:H	1	0.18
(1,369)	1:A:43:THR:HB	1:A:44:CYS:H	14	0.18
(1,369)	1:A:43:THR:HB	1:A:44:CYS:H	17	0.18
(1,367)	1:A:42:ARG:HG2	1:A:43:THR:H	9	0.18
(1,367)	1:A:42:ARG:HG2	1:A:43:THR:H	9	0.18
(1,367)	1:A:42:ARG:HG3	1:A:43:THR:H	9	0.18
(1,367)	1:A:42:ARG:HG3	1:A:43:THR:H	9	0.18
(1,351)	1:A:32:SER:H	1:A:33:ASP:H	1	0.18
(1,351)	1:A:32:SER:H	1:A:33:ASP:H	2	0.18
(1,351)	1:A:32:SER:H	1:A:33:ASP:H	13	0.18
(1,351)	1:A:32:SER:H	1:A:33:ASP:H	20	0.18
(1,349)	1:A:32:SER:H	1:A:33:ASP:H	1	0.18
(1,349)	1:A:32:SER:H	1:A:33:ASP:H	2	0.18
(1,349)	1:A:32:SER:H	1:A:33:ASP:H	13	0.18
(1,349)	1:A:32:SER:H	1:A:33:ASP:H	20	0.18
(1,339)	1:A:25:ASP:H	1:A:20:TRP:HB2	7	0.18
(1,339)	1:A:25:ASP:H	1:A:20:TRP:HB3	7	0.18
(1,33)	1:A:115:ASP:H	1:A:114:SER:H	2	0.18
(1,33)	1:A:115:ASP:H	1:A:114:SER:H	8	0.18
(1,328)	1:A:22:CYS:HB2	1:A:22:CYS:H	8	0.18
(1,328)	1:A:22:CYS:HB3	1:A:22:CYS:H	8	0.18
(1,328)	1:A:22:CYS:HB2	1:A:22:CYS:H	9	0.18
(1,328)	1:A:22:CYS:HB3	1:A:22:CYS:H	9	0.18
(1,312)	1:A:14:GLN:HG2	1:A:14:GLN:H	15	0.18

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,312)	1:A:14:GLN:HG3	1:A:14:GLN:H	15	0.18
(1,312)	1:A:14:GLN:HG2	1:A:14:GLN:H	20	0.18
(1,312)	1:A:14:GLN:HG3	1:A:14:GLN:H	20	0.18
(1,308)	1:A:13:GLY:H	1:A:14:GLN:H	15	0.18
(1,302)	1:A:14:GLN:H	1:A:12:ASN:H	15	0.18
(1,299)	1:A:11:ASN:H	1:A:12:ASN:H	1	0.18
(1,290)	1:A:8:PHE:HA	1:A:9:VAL:H	4	0.18
(1,290)	1:A:8:PHE:HA	1:A:9:VAL:H	11	0.18
(1,28)	1:A:118:ASP:H	1:A:117:LEU:H	5	0.18
(1,28)	1:A:118:ASP:H	1:A:117:LEU:H	14	0.18
(1,269)	1:A:7:ASP:H	1:A:4:ALA:H	6	0.18
(1,248)	1:A:83:ILE:HB	1:A:84:THR:H	1	0.18
(1,248)	1:A:83:ILE:HB	1:A:84:THR:H	11	0.18
(1,241)	1:A:86:SER:H	1:A:89:GLU:H	17	0.18
(1,24)	1:A:104:CYS:H	1:A:105:ASN:H	6	0.18
(1,24)	1:A:104:CYS:H	1:A:105:ASN:H	7	0.18
(1,23)	1:A:104:CYS:H	1:A:105:ASN:H	6	0.18
(1,23)	1:A:104:CYS:H	1:A:105:ASN:H	7	0.18
(1,228)	1:A:92:CYS:HB2	1:A:93:SER:H	4	0.18
(1,228)	1:A:92:CYS:HB3	1:A:93:SER:H	4	0.18
(1,228)	1:A:92:CYS:HB2	1:A:93:SER:H	14	0.18
(1,228)	1:A:92:CYS:HB3	1:A:93:SER:H	14	0.18
(1,226)	1:A:92:CYS:HB2	1:A:94:SER:H	20	0.18
(1,226)	1:A:92:CYS:HB3	1:A:94:SER:H	20	0.18
(1,22)	1:A:91:THR:H	1:A:92:CYS:H	3	0.18
(1,22)	1:A:91:THR:H	1:A:92:CYS:H	12	0.18
(1,215)	1:A:96:ARG:H	1:A:92:CYS:HB2	2	0.18
(1,215)	1:A:96:ARG:H	1:A:92:CYS:HB3	2	0.18
(1,205)	1:A:98:ILE:HG12	1:A:98:ILE:H	15	0.18
(1,205)	1:A:98:ILE:HG13	1:A:98:ILE:H	15	0.18
(1,204)	1:A:98:ILE:HG12	1:A:98:ILE:H	8	0.18
(1,204)	1:A:98:ILE:HG13	1:A:98:ILE:H	8	0.18
(1,204)	1:A:98:ILE:HG12	1:A:98:ILE:H	14	0.18
(1,204)	1:A:98:ILE:HG13	1:A:98:ILE:H	14	0.18
(1,184)	1:A:103:VAL:HB	1:A:102:PHE:H	15	0.18
(1,18)	1:A:81:GLY:H	1:A:82:ASN:H	17	0.18
(1,174)	1:A:103:VAL:H	1:A:101:ASN:HB2	18	0.18
(1,174)	1:A:103:VAL:H	1:A:101:ASN:HB3	18	0.18
(1,17)	1:A:81:GLY:H	1:A:80:CYS:H	20	0.18
(1,137)	1:A:109:ASP:H	1:A:113:GLY:HA2	5	0.18
(1,137)	1:A:109:ASP:H	1:A:113:GLY:HA3	5	0.18
(1,123)	1:A:115:ASP:HB2	1:A:115:ASP:H	3	0.18

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,123)	1:A:115:ASP:HB3	1:A:115:ASP:H	3	0.18
(1,123)	1:A:115:ASP:HB2	1:A:115:ASP:H	19	0.18
(1,123)	1:A:115:ASP:HB3	1:A:115:ASP:H	19	0.18
(4,5)	1:A:49:ILE:O	1:A:59:ILE:H	7	0.17
(4,5)	1:A:49:ILE:O	1:A:59:ILE:H	11	0.17
(4,2)	1:A:90:PHE:O	1:A:98:ILE:H	18	0.17
(3,7)	2:A:202:CA:CA	1:A:63:TRP:O	3	0.17
(3,7)	2:A:202:CA:CA	1:A:63:TRP:O	11	0.17
(3,7)	2:A:202:CA:CA	1:A:63:TRP:O	16	0.17
(2,97)	1:A:20:TRP:HB2	1:A:20:TRP:H	20	0.17
(2,97)	1:A:20:TRP:HB3	1:A:20:TRP:H	20	0.17
(2,97)	1:A:21:LYS:HA	1:A:20:TRP:H	20	0.17
(2,91)	1:A:83:ILE:HD11	1:A:84:THR:H	8	0.17
(2,91)	1:A:83:ILE:HD12	1:A:84:THR:H	8	0.17
(2,91)	1:A:83:ILE:HD13	1:A:84:THR:H	8	0.17
(2,91)	1:A:83:ILE:HG21	1:A:84:THR:H	8	0.17
(2,91)	1:A:83:ILE:HG22	1:A:84:THR:H	8	0.17
(2,91)	1:A:83:ILE:HG23	1:A:84:THR:H	8	0.17
(2,64)	1:A:45:ARG:HB2	1:A:46:ILE:H	17	0.17
(2,64)	1:A:45:ARG:HB3	1:A:46:ILE:H	17	0.17
(2,64)	1:A:46:ILE:HG12	1:A:46:ILE:H	17	0.17
(2,64)	1:A:46:ILE:HG13	1:A:46:ILE:H	17	0.17
(2,44)	1:A:83:ILE:HD11	1:A:97:CYS:H	2	0.17
(2,44)	1:A:83:ILE:HD12	1:A:97:CYS:H	2	0.17
(2,44)	1:A:83:ILE:HD13	1:A:97:CYS:H	2	0.17
(2,44)	1:A:83:ILE:HG21	1:A:97:CYS:H	2	0.17
(2,44)	1:A:83:ILE:HG22	1:A:97:CYS:H	2	0.17
(2,44)	1:A:83:ILE:HG23	1:A:97:CYS:H	2	0.17
(2,42)	1:A:49:ILE:HG21	1:A:61:VAL:H	13	0.17
(2,42)	1:A:49:ILE:HG22	1:A:61:VAL:H	13	0.17
(2,42)	1:A:49:ILE:HG23	1:A:61:VAL:H	13	0.17
(2,42)	1:A:59:ILE:HD11	1:A:61:VAL:H	13	0.17
(2,42)	1:A:59:ILE:HD12	1:A:61:VAL:H	13	0.17
(2,42)	1:A:59:ILE:HD13	1:A:61:VAL:H	13	0.17
(2,42)	1:A:60:PRO:HB2	1:A:61:VAL:H	13	0.17
(2,42)	1:A:60:PRO:HB3	1:A:61:VAL:H	13	0.17
(2,42)	1:A:61:VAL:HG11	1:A:61:VAL:H	13	0.17
(2,42)	1:A:61:VAL:HG12	1:A:61:VAL:H	13	0.17
(2,42)	1:A:61:VAL:HG13	1:A:61:VAL:H	13	0.17
(2,42)	1:A:61:VAL:HG21	1:A:61:VAL:H	13	0.17
(2,42)	1:A:61:VAL:HG22	1:A:61:VAL:H	13	0.17
(2,42)	1:A:61:VAL:HG23	1:A:61:VAL:H	13	0.17

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,376)	1:A:61:VAL:HB	1:A:88:ASP:H	8	0.17
(2,376)	1:A:62:SER:H	1:A:88:ASP:H	8	0.17
(2,376)	1:A:87:PRO:HB2	1:A:88:ASP:H	8	0.17
(2,376)	1:A:87:PRO:HB3	1:A:88:ASP:H	8	0.17
(2,376)	1:A:61:VAL:HB	1:A:88:ASP:H	16	0.17
(2,376)	1:A:62:SER:H	1:A:88:ASP:H	16	0.17
(2,376)	1:A:87:PRO:HB2	1:A:88:ASP:H	16	0.17
(2,376)	1:A:87:PRO:HB3	1:A:88:ASP:H	16	0.17
(2,375)	1:A:48:GLU:HB2	1:A:61:VAL:H	8	0.17
(2,375)	1:A:48:GLU:HB3	1:A:61:VAL:H	8	0.17
(2,375)	1:A:60:PRO:HD3	1:A:61:VAL:H	8	0.17
(2,371)	1:A:83:ILE:HD11	1:A:83:ILE:H	1	0.17
(2,371)	1:A:83:ILE:HD12	1:A:83:ILE:H	1	0.17
(2,371)	1:A:83:ILE:HD13	1:A:83:ILE:H	1	0.17
(2,371)	1:A:83:ILE:HG21	1:A:83:ILE:H	1	0.17
(2,371)	1:A:83:ILE:HG22	1:A:83:ILE:H	1	0.17
(2,371)	1:A:83:ILE:HG23	1:A:83:ILE:H	1	0.17
(2,363)	1:A:49:ILE:HB	1:A:49:ILE:H	4	0.17
(2,363)	1:A:59:ILE:HB	1:A:49:ILE:H	4	0.17
(2,349)	1:A:99:SER:HB2	1:A:101:ASN:H	4	0.17
(2,349)	1:A:99:SER:HB3	1:A:101:ASN:H	4	0.17
(2,349)	1:A:102:PHE:HB2	1:A:101:ASN:H	4	0.17
(2,349)	1:A:102:PHE:HB3	1:A:101:ASN:H	4	0.17
(2,349)	1:A:99:SER:HB2	1:A:101:ASN:H	11	0.17
(2,349)	1:A:99:SER:HB3	1:A:101:ASN:H	11	0.17
(2,349)	1:A:102:PHE:HB2	1:A:101:ASN:H	11	0.17
(2,349)	1:A:102:PHE:HB3	1:A:101:ASN:H	11	0.17
(2,349)	1:A:99:SER:HB2	1:A:101:ASN:H	14	0.17
(2,349)	1:A:99:SER:HB3	1:A:101:ASN:H	14	0.17
(2,349)	1:A:102:PHE:HB2	1:A:101:ASN:H	14	0.17
(2,349)	1:A:102:PHE:HB3	1:A:101:ASN:H	14	0.17
(2,345)	1:A:84:THR:HG1	1:A:85:CYS:H	15	0.17
(2,345)	1:A:84:THR:HG21	1:A:85:CYS:H	15	0.17
(2,345)	1:A:84:THR:HG22	1:A:85:CYS:H	15	0.17
(2,345)	1:A:84:THR:HG23	1:A:85:CYS:H	15	0.17
(2,345)	1:A:91:THR:HG21	1:A:85:CYS:H	15	0.17
(2,345)	1:A:91:THR:HG22	1:A:85:CYS:H	15	0.17
(2,345)	1:A:91:THR:HG23	1:A:85:CYS:H	15	0.17
(2,327)	1:A:64:ARG:HG2	1:A:71:CYS:H	20	0.17
(2,327)	1:A:64:ARG:HG3	1:A:71:CYS:H	20	0.17
(2,327)	1:A:68:GLU:HG2	1:A:71:CYS:H	20	0.17
(2,327)	1:A:68:GLU:HG3	1:A:71:CYS:H	20	0.17

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,316)	1:A:90:PHE:HB2	1:A:98:ILE:H	9	0.17
(2,316)	1:A:90:PHE:HB3	1:A:98:ILE:H	9	0.17
(2,316)	1:A:97:CYS:HB2	1:A:98:ILE:H	9	0.17
(2,316)	1:A:97:CYS:HB3	1:A:98:ILE:H	9	0.17
(2,312)	1:A:73:SER:HB2	1:A:73:SER:H	2	0.17
(2,312)	1:A:73:SER:HB3	1:A:73:SER:H	2	0.17
(2,312)	1:A:74:GLY:HA2	1:A:73:SER:H	2	0.17
(2,312)	1:A:74:GLY:HA3	1:A:73:SER:H	2	0.17
(2,308)	1:A:50:SER:HB2	1:A:51:CYS:H	18	0.17
(2,308)	1:A:50:SER:HB3	1:A:51:CYS:H	18	0.17
(2,308)	1:A:55:SER:HB3	1:A:51:CYS:H	18	0.17
(2,306)	1:A:71:CYS:HB2	1:A:77:GLU:H	12	0.17
(2,306)	1:A:71:CYS:HB3	1:A:77:GLU:H	12	0.17
(2,306)	1:A:80:CYS:HB2	1:A:77:GLU:H	12	0.17
(2,306)	1:A:80:CYS:HB3	1:A:77:GLU:H	12	0.17
(2,300)	1:A:44:CYS:HB2	1:A:48:GLU:H	18	0.17
(2,300)	1:A:44:CYS:HB3	1:A:48:GLU:H	18	0.17
(2,300)	1:A:48:GLU:HG2	1:A:48:GLU:H	18	0.17
(2,300)	1:A:48:GLU:HG3	1:A:48:GLU:H	18	0.17
(2,293)	1:A:18:SER:HA	1:A:8:PHE:H	9	0.17
(2,293)	1:A:18:SER:HB2	1:A:8:PHE:H	9	0.17
(2,293)	1:A:18:SER:HB3	1:A:8:PHE:H	9	0.17
(2,292)	1:A:3:CYS:HB2	1:A:8:PHE:H	18	0.17
(2,292)	1:A:3:CYS:HB3	1:A:8:PHE:H	18	0.17
(2,292)	1:A:7:ASP:HB2	1:A:8:PHE:H	18	0.17
(2,292)	1:A:7:ASP:HB3	1:A:8:PHE:H	18	0.17
(2,292)	1:A:8:PHE:HB2	1:A:8:PHE:H	18	0.17
(2,292)	1:A:8:PHE:HB3	1:A:8:PHE:H	18	0.17
(2,279)	1:A:10:CYS:HA	1:A:11:ASN:H	9	0.17
(2,279)	1:A:11:ASN:HA	1:A:11:ASN:H	9	0.17
(2,259)	1:A:69:ASN:HB2	1:A:69:ASN:HD21	7	0.17
(2,259)	1:A:69:ASN:HB3	1:A:69:ASN:HD21	7	0.17
(2,259)	1:A:70:ASP:HB2	1:A:69:ASN:HD21	7	0.17
(2,259)	1:A:70:ASP:HB3	1:A:69:ASN:HD21	7	0.17
(2,255)	1:A:37:GLU:HB2	1:A:39:CYS:H	13	0.17
(2,255)	1:A:37:GLU:HB3	1:A:39:CYS:H	13	0.17
(2,255)	1:A:37:GLU:HB3	1:A:39:CYS:H	13	0.17
(2,255)	1:A:38:GLN:HB2	1:A:39:CYS:H	13	0.17
(2,255)	1:A:38:GLN:HB2	1:A:39:CYS:H	13	0.17
(2,255)	1:A:38:GLN:HB3	1:A:39:CYS:H	13	0.17
(2,236)	1:A:19:ARG:HB2	1:A:21:LYS:H	1	0.17
(2,236)	1:A:19:ARG:HB3	1:A:21:LYS:H	1	0.17

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,236)	1:A:21:LYS:HB2	1:A:21:LYS:H	1	0.17
(2,236)	1:A:21:LYS:HB3	1:A:21:LYS:H	1	0.17
(2,193)	1:A:98:ILE:HD11	1:A:109:ASP:H	1	0.17
(2,193)	1:A:98:ILE:HD12	1:A:109:ASP:H	1	0.17
(2,193)	1:A:98:ILE:HD13	1:A:109:ASP:H	1	0.17
(2,193)	1:A:117:LEU:HD11	1:A:109:ASP:H	1	0.17
(2,193)	1:A:117:LEU:HD12	1:A:109:ASP:H	1	0.17
(2,193)	1:A:117:LEU:HD13	1:A:109:ASP:H	1	0.17
(2,193)	1:A:117:LEU:HD21	1:A:109:ASP:H	1	0.17
(2,193)	1:A:117:LEU:HD22	1:A:109:ASP:H	1	0.17
(2,193)	1:A:117:LEU:HD23	1:A:109:ASP:H	1	0.17
(2,193)	1:A:98:ILE:HD11	1:A:109:ASP:H	10	0.17
(2,193)	1:A:98:ILE:HD12	1:A:109:ASP:H	10	0.17
(2,193)	1:A:98:ILE:HD13	1:A:109:ASP:H	10	0.17
(2,193)	1:A:117:LEU:HD11	1:A:109:ASP:H	10	0.17
(2,193)	1:A:117:LEU:HD12	1:A:109:ASP:H	10	0.17
(2,193)	1:A:117:LEU:HD13	1:A:109:ASP:H	10	0.17
(2,193)	1:A:117:LEU:HD21	1:A:109:ASP:H	10	0.17
(2,193)	1:A:117:LEU:HD22	1:A:109:ASP:H	10	0.17
(2,193)	1:A:117:LEU:HD23	1:A:109:ASP:H	10	0.17
(2,188)	1:A:16:VAL:HG11	1:A:19:ARG:H	3	0.17
(2,188)	1:A:16:VAL:HG12	1:A:19:ARG:H	3	0.17
(2,188)	1:A:16:VAL:HG13	1:A:19:ARG:H	3	0.17
(2,188)	1:A:16:VAL:HG21	1:A:19:ARG:H	3	0.17
(2,188)	1:A:16:VAL:HG22	1:A:19:ARG:H	3	0.17
(2,188)	1:A:16:VAL:HG23	1:A:19:ARG:H	3	0.17
(2,164)	1:A:14:GLN:HB2	1:A:14:GLN:H	13	0.17
(2,164)	1:A:14:GLN:HB3	1:A:14:GLN:H	13	0.17
(2,164)	1:A:14:GLN:HB2	1:A:14:GLN:H	14	0.17
(2,164)	1:A:14:GLN:HB3	1:A:14:GLN:H	14	0.17
(2,156)	1:A:51:CYS:HB2	1:A:71:CYS:H	12	0.17
(2,156)	1:A:51:CYS:HB3	1:A:71:CYS:H	12	0.17
(2,156)	1:A:71:CYS:HB2	1:A:71:CYS:H	12	0.17
(2,156)	1:A:71:CYS:HB3	1:A:71:CYS:H	12	0.17
(2,151)	1:A:46:ILE:HD11	1:A:46:ILE:H	4	0.17
(2,151)	1:A:46:ILE:HD12	1:A:46:ILE:H	4	0.17
(2,151)	1:A:46:ILE:HD13	1:A:46:ILE:H	4	0.17
(2,151)	1:A:46:ILE:HG21	1:A:46:ILE:H	4	0.17
(2,151)	1:A:46:ILE:HG22	1:A:46:ILE:H	4	0.17
(2,151)	1:A:46:ILE:HG23	1:A:46:ILE:H	4	0.17
(2,132)	1:A:45:ARG:HB2	1:A:45:ARG:H	20	0.17
(2,132)	1:A:45:ARG:HB3	1:A:45:ARG:H	20	0.17

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,132)	1:A:46:ILE:HG12	1:A:45:ARG:H	20	0.17
(2,132)	1:A:46:ILE:HG13	1:A:45:ARG:H	20	0.17
(2,110)	1:A:17:PRO:HB2	1:A:19:ARG:H	3	0.17
(2,110)	1:A:17:PRO:HB3	1:A:19:ARG:H	3	0.17
(2,110)	1:A:19:ARG:HB2	1:A:19:ARG:H	3	0.17
(2,110)	1:A:19:ARG:HB3	1:A:19:ARG:H	3	0.17
(2,110)	1:A:17:PRO:HB2	1:A:19:ARG:H	4	0.17
(2,110)	1:A:17:PRO:HB3	1:A:19:ARG:H	4	0.17
(2,110)	1:A:19:ARG:HB2	1:A:19:ARG:H	4	0.17
(2,110)	1:A:19:ARG:HB3	1:A:19:ARG:H	4	0.17
(2,110)	1:A:17:PRO:HB2	1:A:19:ARG:H	9	0.17
(2,110)	1:A:17:PRO:HB3	1:A:19:ARG:H	9	0.17
(2,110)	1:A:19:ARG:HB2	1:A:19:ARG:H	9	0.17
(2,110)	1:A:19:ARG:HB3	1:A:19:ARG:H	9	0.17
(2,110)	1:A:17:PRO:HB2	1:A:19:ARG:H	17	0.17
(2,110)	1:A:17:PRO:HB3	1:A:19:ARG:H	17	0.17
(2,110)	1:A:19:ARG:HB2	1:A:19:ARG:H	17	0.17
(2,110)	1:A:19:ARG:HB3	1:A:19:ARG:H	17	0.17
(2,104)	1:A:63:TRP:HB2	1:A:80:CYS:H	18	0.17
(2,104)	1:A:63:TRP:HB3	1:A:80:CYS:H	18	0.17
(2,104)	1:A:80:CYS:HB3	1:A:80:CYS:H	18	0.17
(1,930)	1:A:102:PHE:HE2	1:A:107:GLN:HG2	9	0.17
(1,925)	1:A:8:PHE:HB3	1:A:16:VAL:HG21	11	0.17
(1,925)	1:A:8:PHE:HB3	1:A:16:VAL:HG22	11	0.17
(1,925)	1:A:8:PHE:HB3	1:A:16:VAL:HG23	11	0.17
(1,925)	1:A:8:PHE:HB3	1:A:16:VAL:HG21	16	0.17
(1,925)	1:A:8:PHE:HB3	1:A:16:VAL:HG22	16	0.17
(1,925)	1:A:8:PHE:HB3	1:A:16:VAL:HG23	16	0.17
(1,924)	1:A:8:PHE:HB2	1:A:16:VAL:HG11	5	0.17
(1,924)	1:A:8:PHE:HB2	1:A:16:VAL:HG12	5	0.17
(1,924)	1:A:8:PHE:HB2	1:A:16:VAL:HG13	5	0.17
(1,924)	1:A:8:PHE:HB2	1:A:16:VAL:HG21	5	0.17
(1,924)	1:A:8:PHE:HB2	1:A:16:VAL:HG22	5	0.17
(1,924)	1:A:8:PHE:HB2	1:A:16:VAL:HG23	5	0.17
(1,911)	1:A:57:GLN:HE21	1:A:71:CYS:H	13	0.17
(1,902)	1:A:94:SER:HB2	1:A:82:ASN:HD21	14	0.17
(1,902)	1:A:94:SER:HB3	1:A:82:ASN:HD21	14	0.17
(1,898)	1:A:57:GLN:HE22	1:A:71:CYS:H	4	0.17
(1,886)	1:A:51:CYS:H	1:A:58:CYS:H	2	0.17
(1,886)	1:A:51:CYS:H	1:A:58:CYS:H	14	0.17
(1,886)	1:A:51:CYS:H	1:A:58:CYS:H	17	0.17
(1,876)	1:A:39:CYS:HB2	1:A:43:THR:H	7	0.17

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,876)	1:A:39:CYS:HB3	1:A:43:THR:H	7	0.17
(1,876)	1:A:39:CYS:HB2	1:A:43:THR:H	8	0.17
(1,876)	1:A:39:CYS:HB3	1:A:43:THR:H	8	0.17
(1,869)	1:A:14:GLN:HE22	1:A:28:CYS:H	6	0.17
(1,864)	1:A:20:TRP:HA	1:A:20:TRP:HE1	14	0.17
(1,864)	1:A:20:TRP:HA	1:A:20:TRP:HE1	20	0.17
(1,863)	1:A:17:PRO:HD2	1:A:20:TRP:HE1	1	0.17
(1,863)	1:A:17:PRO:HD3	1:A:20:TRP:HE1	1	0.17
(1,860)	1:A:16:VAL:HB	1:A:19:ARG:H	20	0.17
(1,859)	1:A:3:CYS:HB2	1:A:18:SER:H	1	0.17
(1,859)	1:A:3:CYS:HB3	1:A:18:SER:H	1	0.17
(1,842)	1:A:80:CYS:HA	1:A:84:THR:H	15	0.17
(1,84)	1:A:14:GLN:HG2	1:A:29:GLU:H	19	0.17
(1,84)	1:A:14:GLN:HG3	1:A:29:GLU:H	19	0.17
(1,84)	1:A:14:GLN:HG2	1:A:29:GLU:H	20	0.17
(1,84)	1:A:14:GLN:HG3	1:A:29:GLU:H	20	0.17
(1,838)	1:A:58:CYS:HA	1:A:52:GLY:H	10	0.17
(1,837)	1:A:50:SER:H	1:A:45:ARG:HD2	6	0.17
(1,837)	1:A:50:SER:H	1:A:45:ARG:HD3	6	0.17
(1,820)	1:A:110:CYS:H	1:A:115:ASP:H	19	0.17
(1,816)	1:A:109:ASP:H	1:A:116:GLU:HG2	15	0.17
(1,816)	1:A:109:ASP:H	1:A:116:GLU:HG3	15	0.17
(1,811)	1:A:107:GLN:H	1:A:105:ASN:HD21	13	0.17
(1,809)	1:A:106:GLY:H	1:A:104:CYS:H	11	0.17
(1,803)	1:A:101:ASN:HD21	1:A:99:SER:H	16	0.17
(1,796)	1:A:96:ARG:H	1:A:83:ILE:HG21	18	0.17
(1,796)	1:A:96:ARG:H	1:A:83:ILE:HG22	18	0.17
(1,796)	1:A:96:ARG:H	1:A:83:ILE:HG23	18	0.17
(1,792)	1:A:97:CYS:HB2	1:A:91:THR:H	3	0.17
(1,792)	1:A:97:CYS:HB3	1:A:91:THR:H	3	0.17
(1,791)	1:A:85:CYS:HB2	1:A:89:GLU:H	20	0.17
(1,791)	1:A:85:CYS:HB3	1:A:89:GLU:H	20	0.17
(1,786)	1:A:71:CYS:H	1:A:76:ASP:H	4	0.17
(1,781)	1:A:73:SER:H	1:A:71:CYS:HB2	13	0.17
(1,781)	1:A:73:SER:H	1:A:71:CYS:HB3	13	0.17
(1,781)	1:A:73:SER:H	1:A:71:CYS:HB2	17	0.17
(1,781)	1:A:73:SER:H	1:A:71:CYS:HB3	17	0.17
(1,768)	1:A:58:CYS:HA	1:A:59:ILE:H	10	0.17
(1,763)	1:A:58:CYS:HB2	1:A:58:CYS:H	10	0.17
(1,763)	1:A:58:CYS:HB3	1:A:58:CYS:H	10	0.17
(1,744)	1:A:48:GLU:H	1:A:47:HIS:H	7	0.17
(1,744)	1:A:48:GLU:H	1:A:47:HIS:H	13	0.17

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,744)	1:A:48:GLU:H	1:A:47:HIS:H	19	0.17
(1,74)	1:A:65:CYS:H	1:A:65:CYS:HB2	11	0.17
(1,74)	1:A:65:CYS:H	1:A:65:CYS:HB3	11	0.17
(1,735)	1:A:28:CYS:HB2	1:A:33:ASP:H	7	0.17
(1,735)	1:A:28:CYS:HB3	1:A:33:ASP:H	7	0.17
(1,731)	1:A:28:CYS:HB2	1:A:32:SER:H	17	0.17
(1,731)	1:A:28:CYS:HB3	1:A:32:SER:H	17	0.17
(1,726)	1:A:34:GLU:HG2	1:A:27:ASP:H	16	0.17
(1,726)	1:A:34:GLU:HG3	1:A:27:ASP:H	16	0.17
(1,718)	1:A:16:VAL:HB	1:A:20:TRP:HE1	11	0.17
(1,718)	1:A:16:VAL:HB	1:A:20:TRP:HE1	13	0.17
(1,696)	1:A:44:CYS:HB2	1:A:34:GLU:H	9	0.17
(1,696)	1:A:44:CYS:HB3	1:A:34:GLU:H	9	0.17
(1,681)	1:A:79:ASN:HD21	1:A:87:PRO:HD2	16	0.17
(1,681)	1:A:79:ASN:HD21	1:A:87:PRO:HD3	16	0.17
(1,664)	1:A:105:ASN:HB2	1:A:105:ASN:HD21	6	0.17
(1,664)	1:A:105:ASN:HB3	1:A:105:ASN:HD21	6	0.17
(1,664)	1:A:105:ASN:HB2	1:A:105:ASN:HD21	11	0.17
(1,664)	1:A:105:ASN:HB3	1:A:105:ASN:HD21	11	0.17
(1,664)	1:A:105:ASN:HB2	1:A:105:ASN:HD21	19	0.17
(1,664)	1:A:105:ASN:HB3	1:A:105:ASN:HD21	19	0.17
(1,612)	1:A:15:CYS:H	1:A:14:GLN:HE22	5	0.17
(1,612)	1:A:15:CYS:H	1:A:14:GLN:HE22	11	0.17
(1,607)	1:A:11:ASN:HB2	1:A:11:ASN:HD21	13	0.17
(1,607)	1:A:11:ASN:HB3	1:A:11:ASN:HD21	13	0.17
(1,607)	1:A:11:ASN:HB2	1:A:11:ASN:HD21	20	0.17
(1,607)	1:A:11:ASN:HB3	1:A:11:ASN:HD21	20	0.17
(1,603)	1:A:32:SER:HB2	1:A:11:ASN:HD22	2	0.17
(1,603)	1:A:32:SER:HB3	1:A:11:ASN:HD22	2	0.17
(1,6)	1:A:23:ASP:H	1:A:24:GLY:H	1	0.17
(1,6)	1:A:23:ASP:H	1:A:24:GLY:H	2	0.17
(1,6)	1:A:23:ASP:H	1:A:24:GLY:H	10	0.17
(1,6)	1:A:23:ASP:H	1:A:24:GLY:H	16	0.17
(1,598)	1:A:74:GLY:HA2	1:A:69:ASN:HD22	8	0.17
(1,598)	1:A:74:GLY:HA3	1:A:69:ASN:HD22	8	0.17
(1,597)	1:A:74:GLY:HA2	1:A:69:ASN:HD22	8	0.17
(1,597)	1:A:74:GLY:HA3	1:A:69:ASN:HD22	8	0.17
(1,592)	1:A:74:GLY:HA2	1:A:69:ASN:HD21	20	0.17
(1,592)	1:A:74:GLY:HA3	1:A:69:ASN:HD21	20	0.17
(1,591)	1:A:69:ASN:HB2	1:A:69:ASN:HD21	1	0.17
(1,591)	1:A:69:ASN:HB3	1:A:69:ASN:HD21	1	0.17
(1,591)	1:A:69:ASN:HB2	1:A:69:ASN:HD21	8	0.17

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,591)	1:A:69:ASN:HB3	1:A:69:ASN:HD21	8	0.17
(1,591)	1:A:69:ASN:HB2	1:A:69:ASN:HD21	11	0.17
(1,591)	1:A:69:ASN:HB3	1:A:69:ASN:HD21	11	0.17
(1,582)	1:A:46:ILE:H	1:A:45:ARG:H	14	0.17
(1,560)	1:A:90:PHE:H	1:A:99:SER:H	16	0.17
(1,556)	1:A:101:ASN:HD21	1:A:101:ASN:H	9	0.17
(1,542)	1:A:112:ASP:H	1:A:114:SER:H	8	0.17
(1,541)	1:A:115:ASP:HB2	1:A:116:GLU:H	6	0.17
(1,541)	1:A:115:ASP:HB3	1:A:116:GLU:H	6	0.17
(1,53)	1:A:77:GLU:H	1:A:76:ASP:H	12	0.17
(1,52)	1:A:76:ASP:H	1:A:77:GLU:H	12	0.17
(1,516)	1:A:49:ILE:H	1:A:59:ILE:H	9	0.17
(1,516)	1:A:49:ILE:H	1:A:59:ILE:H	16	0.17
(1,510)	1:A:48:GLU:HB2	1:A:48:GLU:H	18	0.17
(1,510)	1:A:48:GLU:HB3	1:A:48:GLU:H	18	0.17
(1,509)	1:A:46:ILE:HA	1:A:46:ILE:H	4	0.17
(1,504)	1:A:39:CYS:HB2	1:A:39:CYS:H	8	0.17
(1,504)	1:A:39:CYS:HB3	1:A:39:CYS:H	8	0.17
(1,501)	1:A:34:GLU:HB2	1:A:34:GLU:H	20	0.17
(1,501)	1:A:34:GLU:HB3	1:A:34:GLU:H	20	0.17
(1,499)	1:A:33:ASP:HB2	1:A:33:ASP:H	17	0.17
(1,499)	1:A:33:ASP:HB3	1:A:33:ASP:H	17	0.17
(1,49)	1:A:94:SER:H	1:A:93:SER:H	7	0.17
(1,483)	1:A:10:CYS:HB2	1:A:14:GLN:H	4	0.17
(1,483)	1:A:10:CYS:HB3	1:A:14:GLN:H	4	0.17
(1,483)	1:A:10:CYS:HB2	1:A:14:GLN:H	20	0.17
(1,483)	1:A:10:CYS:HB3	1:A:14:GLN:H	20	0.17
(1,475)	1:A:75:GLU:H	1:A:76:ASP:H	16	0.17
(1,475)	1:A:75:GLU:H	1:A:76:ASP:H	18	0.17
(1,475)	1:A:75:GLU:H	1:A:76:ASP:H	19	0.17
(1,473)	1:A:85:CYS:H	1:A:86:SER:H	1	0.17
(1,473)	1:A:85:CYS:H	1:A:86:SER:H	20	0.17
(1,468)	1:A:78:GLU:HG2	1:A:79:ASN:H	3	0.17
(1,468)	1:A:78:GLU:HG3	1:A:79:ASN:H	3	0.17
(1,454)	1:A:78:GLU:HG2	1:A:76:ASP:H	12	0.17
(1,454)	1:A:78:GLU:HG3	1:A:76:ASP:H	12	0.17
(1,451)	1:A:75:GLU:H	1:A:76:ASP:H	16	0.17
(1,451)	1:A:75:GLU:H	1:A:76:ASP:H	18	0.17
(1,451)	1:A:75:GLU:H	1:A:76:ASP:H	19	0.17
(1,443)	1:A:73:SER:H	1:A:71:CYS:HB2	15	0.17
(1,443)	1:A:73:SER:H	1:A:71:CYS:HB3	15	0.17
(1,438)	1:A:72:ASP:H	1:A:73:SER:H	10	0.17

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,435)	1:A:72:ASP:HA	1:A:72:ASP:H	5	0.17
(1,419)	1:A:65:CYS:HB2	1:A:66:ASP:H	2	0.17
(1,419)	1:A:65:CYS:HB3	1:A:66:ASP:H	2	0.17
(1,418)	1:A:64:ARG:HA	1:A:66:ASP:H	1	0.17
(1,418)	1:A:64:ARG:HA	1:A:66:ASP:H	15	0.17
(1,415)	1:A:64:ARG:HA	1:A:65:CYS:H	15	0.17
(1,414)	1:A:63:TRP:H	1:A:63:TRP:HB2	1	0.17
(1,414)	1:A:63:TRP:H	1:A:63:TRP:HB3	1	0.17
(1,414)	1:A:63:TRP:H	1:A:63:TRP:HB2	14	0.17
(1,414)	1:A:63:TRP:H	1:A:63:TRP:HB3	14	0.17
(1,409)	1:A:60:PRO:HA	1:A:61:VAL:H	13	0.17
(1,409)	1:A:60:PRO:HA	1:A:61:VAL:H	17	0.17
(1,383)	1:A:51:CYS:H	1:A:50:SER:HA	18	0.17
(1,377)	1:A:60:PRO:HA	1:A:49:ILE:H	3	0.17
(1,375)	1:A:48:GLU:HA	1:A:49:ILE:H	6	0.17
(1,374)	1:A:61:VAL:H	1:A:49:ILE:H	19	0.17
(1,369)	1:A:43:THR:HB	1:A:44:CYS:H	7	0.17
(1,359)	1:A:40:HIS:H	1:A:40:HIS:HB2	17	0.17
(1,359)	1:A:40:HIS:H	1:A:40:HIS:HB3	17	0.17
(1,348)	1:A:30:ASP:HB2	1:A:31:GLY:H	7	0.17
(1,348)	1:A:30:ASP:HB3	1:A:31:GLY:H	7	0.17
(1,346)	1:A:32:SER:H	1:A:31:GLY:H	8	0.17
(1,339)	1:A:25:ASP:H	1:A:20:TRP:HB2	2	0.17
(1,339)	1:A:25:ASP:H	1:A:20:TRP:HB3	2	0.17
(1,339)	1:A:25:ASP:H	1:A:20:TRP:HB2	9	0.17
(1,339)	1:A:25:ASP:H	1:A:20:TRP:HB3	9	0.17
(1,313)	1:A:14:GLN:HG2	1:A:14:GLN:H	3	0.17
(1,313)	1:A:14:GLN:HG3	1:A:14:GLN:H	3	0.17
(1,312)	1:A:14:GLN:HG2	1:A:14:GLN:H	4	0.17
(1,312)	1:A:14:GLN:HG3	1:A:14:GLN:H	4	0.17
(1,312)	1:A:14:GLN:HG2	1:A:14:GLN:H	14	0.17
(1,312)	1:A:14:GLN:HG3	1:A:14:GLN:H	14	0.17
(1,308)	1:A:13:GLY:H	1:A:14:GLN:H	6	0.17
(1,308)	1:A:13:GLY:H	1:A:14:GLN:H	10	0.17
(1,302)	1:A:14:GLN:H	1:A:12:ASN:H	14	0.17
(1,293)	1:A:8:PHE:HB2	1:A:9:VAL:H	16	0.17
(1,293)	1:A:8:PHE:HB3	1:A:9:VAL:H	16	0.17
(1,290)	1:A:8:PHE:HA	1:A:9:VAL:H	1	0.17
(1,290)	1:A:8:PHE:HA	1:A:9:VAL:H	6	0.17
(1,28)	1:A:118:ASP:H	1:A:117:LEU:H	18	0.17
(1,257)	1:A:82:ASN:HB2	1:A:82:ASN:H	6	0.17
(1,257)	1:A:82:ASN:HB2	1:A:82:ASN:H	6	0.17

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,257)	1:A:82:ASN:HB3	1:A:82:ASN:H	6	0.17
(1,257)	1:A:82:ASN:HB3	1:A:82:ASN:H	6	0.17
(1,257)	1:A:82:ASN:HB2	1:A:82:ASN:H	18	0.17
(1,257)	1:A:82:ASN:HB2	1:A:82:ASN:H	18	0.17
(1,257)	1:A:82:ASN:HB3	1:A:82:ASN:H	18	0.17
(1,257)	1:A:82:ASN:HB3	1:A:82:ASN:H	18	0.17
(1,241)	1:A:86:SER:H	1:A:89:GLU:H	10	0.17
(1,24)	1:A:104:CYS:H	1:A:105:ASN:H	4	0.17
(1,23)	1:A:104:CYS:H	1:A:105:ASN:H	4	0.17
(1,226)	1:A:92:CYS:HB2	1:A:94:SER:H	12	0.17
(1,226)	1:A:92:CYS:HB3	1:A:94:SER:H	12	0.17
(1,226)	1:A:92:CYS:HB2	1:A:94:SER:H	15	0.17
(1,226)	1:A:92:CYS:HB3	1:A:94:SER:H	15	0.17
(1,22)	1:A:91:THR:H	1:A:92:CYS:H	4	0.17
(1,22)	1:A:91:THR:H	1:A:92:CYS:H	11	0.17
(1,22)	1:A:91:THR:H	1:A:92:CYS:H	14	0.17
(1,205)	1:A:98:ILE:HG12	1:A:98:ILE:H	20	0.17
(1,205)	1:A:98:ILE:HG13	1:A:98:ILE:H	20	0.17
(1,196)	1:A:98:ILE:HA	1:A:99:SER:H	3	0.17
(1,187)	1:A:103:VAL:HG11	1:A:102:PHE:H	20	0.17
(1,187)	1:A:103:VAL:HG12	1:A:102:PHE:H	20	0.17
(1,187)	1:A:103:VAL:HG13	1:A:102:PHE:H	20	0.17
(1,187)	1:A:103:VAL:HG21	1:A:102:PHE:H	20	0.17
(1,187)	1:A:103:VAL:HG22	1:A:102:PHE:H	20	0.17
(1,187)	1:A:103:VAL:HG23	1:A:102:PHE:H	20	0.17
(1,184)	1:A:103:VAL:HB	1:A:102:PHE:H	14	0.17
(1,18)	1:A:81:GLY:H	1:A:82:ASN:H	8	0.17
(1,17)	1:A:81:GLY:H	1:A:80:CYS:H	14	0.17
(1,143)	1:A:106:GLY:H	1:A:107:GLN:H	10	0.17
(1,130)	1:A:115:ASP:HB2	1:A:113:GLY:H	20	0.17
(1,130)	1:A:115:ASP:HB3	1:A:113:GLY:H	20	0.17
(1,128)	1:A:114:SER:HA	1:A:114:SER:H	11	0.17
(1,127)	1:A:114:SER:H	1:A:114:SER:HB2	18	0.17
(1,127)	1:A:114:SER:H	1:A:114:SER:HB3	18	0.17
(1,123)	1:A:115:ASP:HB2	1:A:115:ASP:H	10	0.17
(1,123)	1:A:115:ASP:HB3	1:A:115:ASP:H	10	0.17
(1,123)	1:A:115:ASP:HB2	1:A:115:ASP:H	15	0.17
(1,123)	1:A:115:ASP:HB3	1:A:115:ASP:H	15	0.17
(1,123)	1:A:115:ASP:HB2	1:A:115:ASP:H	16	0.17
(1,123)	1:A:115:ASP:HB3	1:A:115:ASP:H	16	0.17
(1,116)	1:A:116:GLU:HG2	1:A:116:GLU:H	19	0.17
(1,116)	1:A:116:GLU:HG3	1:A:116:GLU:H	19	0.17

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(4,5)	1:A:49:ILE:O	1:A:59:ILE:H	10	0.16
(3,7)	2:A:202:CA:CA	1:A:63:TRP:O	2	0.16
(3,7)	2:A:202:CA:CA	1:A:63:TRP:O	13	0.16
(3,7)	2:A:202:CA:CA	1:A:63:TRP:O	15	0.16
(2,97)	1:A:20:TRP:HB2	1:A:20:TRP:H	18	0.16
(2,97)	1:A:20:TRP:HB3	1:A:20:TRP:H	18	0.16
(2,97)	1:A:21:LYS:HA	1:A:20:TRP:H	18	0.16
(2,89)	1:A:107:GLN:HB2	1:A:108:ASP:H	19	0.16
(2,89)	1:A:107:GLN:HB3	1:A:108:ASP:H	19	0.16
(2,72)	1:A:110:CYS:HB2	1:A:113:GLY:H	11	0.16
(2,72)	1:A:110:CYS:HB3	1:A:113:GLY:H	11	0.16
(2,72)	1:A:112:ASP:HB2	1:A:113:GLY:H	11	0.16
(2,72)	1:A:112:ASP:HB3	1:A:113:GLY:H	11	0.16
(2,72)	1:A:110:CYS:HB2	1:A:113:GLY:H	18	0.16
(2,72)	1:A:110:CYS:HB3	1:A:113:GLY:H	18	0.16
(2,72)	1:A:112:ASP:HB2	1:A:113:GLY:H	18	0.16
(2,72)	1:A:112:ASP:HB3	1:A:113:GLY:H	18	0.16
(2,72)	1:A:110:CYS:HB2	1:A:113:GLY:H	20	0.16
(2,72)	1:A:110:CYS:HB3	1:A:113:GLY:H	20	0.16
(2,72)	1:A:112:ASP:HB2	1:A:113:GLY:H	20	0.16
(2,72)	1:A:112:ASP:HB3	1:A:113:GLY:H	20	0.16
(2,64)	1:A:45:ARG:HB2	1:A:46:ILE:H	1	0.16
(2,64)	1:A:45:ARG:HB3	1:A:46:ILE:H	1	0.16
(2,64)	1:A:46:ILE:HG12	1:A:46:ILE:H	1	0.16
(2,64)	1:A:46:ILE:HG13	1:A:46:ILE:H	1	0.16
(2,46)	1:A:114:SER:HG	1:A:115:ASP:H	8	0.16
(2,46)	1:A:116:GLU:HA	1:A:115:ASP:H	8	0.16
(2,46)	1:A:119:CYS:HA	1:A:115:ASP:H	8	0.16
(2,388)	1:A:64:ARG:HD2	1:A:68:GLU:H	20	0.16
(2,388)	1:A:64:ARG:HD3	1:A:68:GLU:H	20	0.16
(2,388)	1:A:66:ASP:HB2	1:A:68:GLU:H	20	0.16
(2,388)	1:A:66:ASP:HB3	1:A:68:GLU:H	20	0.16
(2,376)	1:A:61:VAL:HB	1:A:88:ASP:H	9	0.16
(2,376)	1:A:62:SER:H	1:A:88:ASP:H	9	0.16
(2,376)	1:A:87:PRO:HB2	1:A:88:ASP:H	9	0.16
(2,376)	1:A:87:PRO:HB3	1:A:88:ASP:H	9	0.16
(2,376)	1:A:61:VAL:HB	1:A:88:ASP:H	19	0.16
(2,376)	1:A:62:SER:H	1:A:88:ASP:H	19	0.16
(2,376)	1:A:87:PRO:HB2	1:A:88:ASP:H	19	0.16
(2,376)	1:A:87:PRO:HB3	1:A:88:ASP:H	19	0.16
(2,375)	1:A:48:GLU:HB2	1:A:61:VAL:H	2	0.16
(2,375)	1:A:48:GLU:HB3	1:A:61:VAL:H	2	0.16

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,375)	1:A:60:PRO:HD3	1:A:61:VAL:H	2	0.16
(2,365)	1:A:69:ASN:HA	1:A:70:ASP:H	3	0.16
(2,365)	1:A:70:ASP:HA	1:A:70:ASP:H	3	0.16
(2,365)	1:A:69:ASN:HA	1:A:70:ASP:H	14	0.16
(2,365)	1:A:70:ASP:HA	1:A:70:ASP:H	14	0.16
(2,349)	1:A:99:SER:HB2	1:A:101:ASN:H	3	0.16
(2,349)	1:A:99:SER:HB3	1:A:101:ASN:H	3	0.16
(2,349)	1:A:102:PHE:HB2	1:A:101:ASN:H	3	0.16
(2,349)	1:A:102:PHE:HB3	1:A:101:ASN:H	3	0.16
(2,342)	1:A:17:PRO:HB2	1:A:20:TRP:HE1	11	0.16
(2,342)	1:A:17:PRO:HB3	1:A:20:TRP:HE1	11	0.16
(2,342)	1:A:19:ARG:HB2	1:A:20:TRP:HE1	11	0.16
(2,342)	1:A:19:ARG:HB3	1:A:20:TRP:HE1	11	0.16
(2,331)	1:A:2:THR:H	1:A:99:SER:H	7	0.16
(2,331)	1:A:3:CYS:H	1:A:99:SER:H	7	0.16
(2,331)	1:A:80:CYS:H	1:A:99:SER:H	7	0.16
(2,331)	1:A:81:GLY:H	1:A:99:SER:H	7	0.16
(2,331)	1:A:101:ASN:H	1:A:99:SER:H	7	0.16
(2,32)	1:A:69:ASN:HB2	1:A:70:ASP:H	12	0.16
(2,32)	1:A:69:ASN:HB3	1:A:70:ASP:H	12	0.16
(2,32)	1:A:70:ASP:HB2	1:A:70:ASP:H	12	0.16
(2,32)	1:A:70:ASP:HB3	1:A:70:ASP:H	12	0.16
(2,32)	1:A:76:ASP:HB2	1:A:70:ASP:H	12	0.16
(2,32)	1:A:76:ASP:HB3	1:A:70:ASP:H	12	0.16
(2,300)	1:A:44:CYS:HB2	1:A:48:GLU:H	4	0.16
(2,300)	1:A:44:CYS:HB3	1:A:48:GLU:H	4	0.16
(2,300)	1:A:48:GLU:HG2	1:A:48:GLU:H	4	0.16
(2,300)	1:A:48:GLU:HG3	1:A:48:GLU:H	4	0.16
(2,3)	1:A:49:ILE:HD11	1:A:49:ILE:H	12	0.16
(2,3)	1:A:49:ILE:HD12	1:A:49:ILE:H	12	0.16
(2,3)	1:A:49:ILE:HD13	1:A:49:ILE:H	12	0.16
(2,3)	1:A:49:ILE:HG12	1:A:49:ILE:H	12	0.16
(2,3)	1:A:49:ILE:HG13	1:A:49:ILE:H	12	0.16
(2,3)	1:A:49:ILE:HG21	1:A:49:ILE:H	12	0.16
(2,3)	1:A:49:ILE:HG22	1:A:49:ILE:H	12	0.16
(2,3)	1:A:49:ILE:HG23	1:A:49:ILE:H	12	0.16
(2,3)	1:A:59:ILE:HD11	1:A:49:ILE:H	12	0.16
(2,3)	1:A:59:ILE:HD12	1:A:49:ILE:H	12	0.16
(2,3)	1:A:59:ILE:HD13	1:A:49:ILE:H	12	0.16
(2,3)	1:A:59:ILE:HG21	1:A:49:ILE:H	12	0.16
(2,3)	1:A:59:ILE:HG22	1:A:49:ILE:H	12	0.16
(2,3)	1:A:59:ILE:HG23	1:A:49:ILE:H	12	0.16

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,3)	1:A:61:VAL:HG11	1:A:49:ILE:H	12	0.16
(2,3)	1:A:61:VAL:HG12	1:A:49:ILE:H	12	0.16
(2,3)	1:A:61:VAL:HG13	1:A:49:ILE:H	12	0.16
(2,3)	1:A:61:VAL:HG21	1:A:49:ILE:H	12	0.16
(2,3)	1:A:61:VAL:HG21	1:A:49:ILE:H	12	0.16
(2,3)	1:A:61:VAL:HG22	1:A:49:ILE:H	12	0.16
(2,3)	1:A:61:VAL:HG22	1:A:49:ILE:H	12	0.16
(2,3)	1:A:61:VAL:HG23	1:A:49:ILE:H	12	0.16
(2,3)	1:A:61:VAL:HG23	1:A:49:ILE:H	12	0.16
(2,296)	1:A:113:GLY:HA2	1:A:117:LEU:H	18	0.16
(2,296)	1:A:113:GLY:HA3	1:A:117:LEU:H	18	0.16
(2,296)	1:A:114:SER:HB2	1:A:117:LEU:H	18	0.16
(2,296)	1:A:114:SER:HB3	1:A:117:LEU:H	18	0.16
(2,293)	1:A:18:SER:HA	1:A:8:PHE:H	6	0.16
(2,293)	1:A:18:SER:HB2	1:A:8:PHE:H	6	0.16
(2,293)	1:A:18:SER:HB3	1:A:8:PHE:H	6	0.16
(2,292)	1:A:3:CYS:HB2	1:A:8:PHE:H	1	0.16
(2,292)	1:A:3:CYS:HB3	1:A:8:PHE:H	1	0.16
(2,292)	1:A:7:ASP:HB2	1:A:8:PHE:H	1	0.16
(2,292)	1:A:7:ASP:HB3	1:A:8:PHE:H	1	0.16
(2,292)	1:A:8:PHE:HB2	1:A:8:PHE:H	1	0.16
(2,292)	1:A:8:PHE:HB3	1:A:8:PHE:H	1	0.16
(2,277)	1:A:19:ARG:HG2	1:A:19:ARG:H	16	0.16
(2,277)	1:A:19:ARG:HG2	1:A:19:ARG:H	16	0.16
(2,277)	1:A:19:ARG:HG3	1:A:19:ARG:H	16	0.16
(2,277)	1:A:19:ARG:HG3	1:A:19:ARG:H	16	0.16
(2,277)	1:A:21:LYS:HD2	1:A:19:ARG:H	16	0.16
(2,276)	1:A:42:ARG:HA	1:A:57:GLN:H	10	0.16
(2,276)	1:A:43:THR:HA	1:A:57:GLN:H	10	0.16
(2,276)	1:A:56:THR:HB	1:A:57:GLN:H	10	0.16
(2,263)	1:A:62:SER:HB2	1:A:63:TRP:H	1	0.16
(2,263)	1:A:62:SER:HB3	1:A:63:TRP:H	1	0.16
(2,263)	1:A:63:TRP:HB2	1:A:63:TRP:H	1	0.16
(2,263)	1:A:62:SER:HB2	1:A:63:TRP:H	17	0.16
(2,263)	1:A:62:SER:HB3	1:A:63:TRP:H	17	0.16
(2,263)	1:A:63:TRP:HB2	1:A:63:TRP:H	17	0.16
(2,262)	1:A:51:CYS:HB2	1:A:74:GLY:H	6	0.16
(2,262)	1:A:51:CYS:HB3	1:A:74:GLY:H	6	0.16
(2,262)	1:A:71:CYS:HB2	1:A:74:GLY:H	6	0.16
(2,262)	1:A:71:CYS:HB3	1:A:74:GLY:H	6	0.16
(2,255)	1:A:37:GLU:HB2	1:A:39:CYS:H	20	0.16
(2,255)	1:A:37:GLU:HB3	1:A:39:CYS:H	20	0.16

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,255)	1:A:37:GLU:HB3	1:A:39:CYS:H	20	0.16
(2,255)	1:A:38:GLN:HB2	1:A:39:CYS:H	20	0.16
(2,255)	1:A:38:GLN:HB2	1:A:39:CYS:H	20	0.16
(2,255)	1:A:38:GLN:HB3	1:A:39:CYS:H	20	0.16
(2,254)	1:A:33:ASP:HB2	1:A:38:GLN:HE21	6	0.16
(2,254)	1:A:33:ASP:HB3	1:A:38:GLN:HE21	6	0.16
(2,254)	1:A:37:GLU:HG2	1:A:38:GLN:HE21	6	0.16
(2,254)	1:A:37:GLU:HG3	1:A:38:GLN:HE21	6	0.16
(2,254)	1:A:38:GLN:HG2	1:A:38:GLN:HE21	6	0.16
(2,254)	1:A:38:GLN:HG3	1:A:38:GLN:HE21	6	0.16
(2,246)	1:A:90:PHE:HB2	1:A:100:ARG:H	9	0.16
(2,246)	1:A:90:PHE:HB3	1:A:100:ARG:H	9	0.16
(2,246)	1:A:90:PHE:HB2	1:A:100:ARG:H	14	0.16
(2,246)	1:A:90:PHE:HB3	1:A:100:ARG:H	14	0.16
(2,24)	1:A:11:ASN:HB2	1:A:11:ASN:H	12	0.16
(2,24)	1:A:11:ASN:HB3	1:A:11:ASN:H	12	0.16
(2,24)	1:A:12:ASN:HB2	1:A:11:ASN:H	12	0.16
(2,236)	1:A:19:ARG:HB2	1:A:21:LYS:H	5	0.16
(2,236)	1:A:19:ARG:HB3	1:A:21:LYS:H	5	0.16
(2,236)	1:A:21:LYS:HB2	1:A:21:LYS:H	5	0.16
(2,236)	1:A:21:LYS:HB3	1:A:21:LYS:H	5	0.16
(2,236)	1:A:19:ARG:HB2	1:A:21:LYS:H	8	0.16
(2,236)	1:A:19:ARG:HB3	1:A:21:LYS:H	8	0.16
(2,236)	1:A:21:LYS:HB2	1:A:21:LYS:H	8	0.16
(2,236)	1:A:21:LYS:HB3	1:A:21:LYS:H	8	0.16
(2,236)	1:A:19:ARG:HB2	1:A:21:LYS:H	11	0.16
(2,236)	1:A:19:ARG:HB3	1:A:21:LYS:H	11	0.16
(2,236)	1:A:21:LYS:HB2	1:A:21:LYS:H	11	0.16
(2,236)	1:A:21:LYS:HB3	1:A:21:LYS:H	11	0.16
(2,236)	1:A:19:ARG:HB2	1:A:21:LYS:H	13	0.16
(2,236)	1:A:19:ARG:HB3	1:A:21:LYS:H	13	0.16
(2,236)	1:A:21:LYS:HB2	1:A:21:LYS:H	13	0.16
(2,236)	1:A:21:LYS:HB3	1:A:21:LYS:H	13	0.16
(2,234)	1:A:64:ARG:HB2	1:A:66:ASP:H	8	0.16
(2,234)	1:A:64:ARG:HB3	1:A:66:ASP:H	8	0.16
(2,234)	1:A:64:ARG:HG2	1:A:66:ASP:H	8	0.16
(2,234)	1:A:64:ARG:HG3	1:A:66:ASP:H	8	0.16
(2,211)	1:A:49:ILE:HD11	1:A:49:ILE:H	8	0.16
(2,211)	1:A:49:ILE:HD12	1:A:49:ILE:H	8	0.16
(2,211)	1:A:49:ILE:HD13	1:A:49:ILE:H	8	0.16
(2,211)	1:A:49:ILE:HG12	1:A:49:ILE:H	8	0.16
(2,211)	1:A:49:ILE:HG13	1:A:49:ILE:H	8	0.16

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,211)	1:A:49:ILE:HG21	1:A:49:ILE:H	8	0.16
(2,211)	1:A:49:ILE:HG22	1:A:49:ILE:H	8	0.16
(2,211)	1:A:49:ILE:HG23	1:A:49:ILE:H	8	0.16
(2,209)	1:A:28:CYS:HB2	1:A:31:GLY:H	16	0.16
(2,209)	1:A:28:CYS:HB3	1:A:31:GLY:H	16	0.16
(2,209)	1:A:29:GLU:HA	1:A:31:GLY:H	16	0.16
(2,209)	1:A:32:SER:HA	1:A:31:GLY:H	16	0.16
(2,209)	1:A:32:SER:HB2	1:A:31:GLY:H	16	0.16
(2,209)	1:A:32:SER:HB3	1:A:31:GLY:H	16	0.16
(2,200)	1:A:77:GLU:HG2	1:A:76:ASP:H	18	0.16
(2,200)	1:A:77:GLU:HG3	1:A:76:ASP:H	18	0.16
(2,200)	1:A:87:PRO:HG2	1:A:76:ASP:H	18	0.16
(2,200)	1:A:87:PRO:HG3	1:A:76:ASP:H	18	0.16
(2,18)	1:A:111:SER:HA	1:A:113:GLY:H	8	0.16
(2,18)	1:A:113:GLY:HA2	1:A:113:GLY:H	8	0.16
(2,18)	1:A:113:GLY:HA3	1:A:113:GLY:H	8	0.16
(2,164)	1:A:14:GLN:HB2	1:A:14:GLN:H	3	0.16
(2,164)	1:A:14:GLN:HB3	1:A:14:GLN:H	3	0.16
(2,137)	1:A:116:GLU:HB2	1:A:117:LEU:H	2	0.16
(2,137)	1:A:116:GLU:HB3	1:A:117:LEU:H	2	0.16
(2,137)	1:A:117:LEU:HB2	1:A:117:LEU:H	2	0.16
(2,137)	1:A:117:LEU:HB3	1:A:117:LEU:H	2	0.16
(2,13)	1:A:110:CYS:HB2	1:A:113:GLY:H	10	0.16
(2,13)	1:A:110:CYS:HB3	1:A:113:GLY:H	10	0.16
(2,13)	1:A:111:SER:HB2	1:A:113:GLY:H	10	0.16
(2,13)	1:A:111:SER:HB3	1:A:113:GLY:H	10	0.16
(2,13)	1:A:113:GLY:HA2	1:A:113:GLY:H	10	0.16
(2,13)	1:A:113:GLY:HA3	1:A:113:GLY:H	10	0.16
(1,930)	1:A:102:PHE:HE2	1:A:107:GLN:HG2	20	0.16
(1,925)	1:A:8:PHE:HB3	1:A:16:VAL:HG21	10	0.16
(1,925)	1:A:8:PHE:HB3	1:A:16:VAL:HG22	10	0.16
(1,925)	1:A:8:PHE:HB3	1:A:16:VAL:HG23	10	0.16
(1,917)	1:A:28:CYS:H	1:A:14:GLN:HG2	2	0.16
(1,915)	1:A:51:CYS:HA	1:A:71:CYS:H	13	0.16
(1,905)	1:A:101:ASN:HD21	1:A:105:ASN:HD21	2	0.16
(1,9)	1:A:12:ASN:H	1:A:11:ASN:H	15	0.16
(1,884)	1:A:50:SER:H	1:A:59:ILE:H	12	0.16
(1,882)	1:A:58:CYS:HA	1:A:50:SER:H	1	0.16
(1,873)	1:A:34:GLU:HB2	1:A:33:ASP:H	4	0.16
(1,873)	1:A:34:GLU:HB3	1:A:33:ASP:H	4	0.16
(1,872)	1:A:32:SER:H	1:A:33:ASP:HB2	16	0.16
(1,872)	1:A:32:SER:H	1:A:33:ASP:HB3	16	0.16

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,864)	1:A:20:TRP:HA	1:A:20:TRP:HE1	3	0.16
(1,864)	1:A:20:TRP:HA	1:A:20:TRP:HE1	18	0.16
(1,863)	1:A:17:PRO:HD2	1:A:20:TRP:HE1	5	0.16
(1,863)	1:A:17:PRO:HD3	1:A:20:TRP:HE1	5	0.16
(1,851)	1:A:32:SER:H	1:A:11:ASN:HD22	18	0.16
(1,849)	1:A:33:ASP:H	1:A:11:ASN:H	1	0.16
(1,844)	1:A:79:ASN:HB2	1:A:92:CYS:H	6	0.16
(1,844)	1:A:79:ASN:HB3	1:A:92:CYS:H	6	0.16
(1,839)	1:A:55:SER:H	1:A:57:GLN:H	18	0.16
(1,832)	1:A:35:SER:H	1:A:38:GLN:H	17	0.16
(1,820)	1:A:110:CYS:H	1:A:115:ASP:H	17	0.16
(1,816)	1:A:109:ASP:H	1:A:116:GLU:HG2	12	0.16
(1,816)	1:A:109:ASP:H	1:A:116:GLU:HG3	12	0.16
(1,810)	1:A:101:ASN:HD21	1:A:105:ASN:HD22	14	0.16
(1,810)	1:A:101:ASN:HD21	1:A:105:ASN:HD22	17	0.16
(1,809)	1:A:106:GLY:H	1:A:104:CYS:H	15	0.16
(1,808)	1:A:116:GLU:HB2	1:A:104:CYS:H	17	0.16
(1,808)	1:A:116:GLU:HB3	1:A:104:CYS:H	17	0.16
(1,806)	1:A:101:ASN:HD21	1:A:102:PHE:H	14	0.16
(1,800)	1:A:85:CYS:HB2	1:A:98:ILE:H	2	0.16
(1,800)	1:A:85:CYS:HB3	1:A:98:ILE:H	2	0.16
(1,80)	1:A:44:CYS:HB2	1:A:45:ARG:H	8	0.16
(1,80)	1:A:44:CYS:HB3	1:A:45:ARG:H	8	0.16
(1,799)	1:A:85:CYS:HA	1:A:97:CYS:H	14	0.16
(1,798)	1:A:85:CYS:HB2	1:A:97:CYS:H	6	0.16
(1,798)	1:A:85:CYS:HB3	1:A:97:CYS:H	6	0.16
(1,796)	1:A:96:ARG:H	1:A:83:ILE:HG21	14	0.16
(1,796)	1:A:96:ARG:H	1:A:83:ILE:HG22	14	0.16
(1,796)	1:A:96:ARG:H	1:A:83:ILE:HG23	14	0.16
(1,796)	1:A:96:ARG:H	1:A:83:ILE:HG21	17	0.16
(1,796)	1:A:96:ARG:H	1:A:83:ILE:HG22	17	0.16
(1,796)	1:A:96:ARG:H	1:A:83:ILE:HG23	17	0.16
(1,792)	1:A:97:CYS:HB2	1:A:91:THR:H	4	0.16
(1,792)	1:A:97:CYS:HB3	1:A:91:THR:H	4	0.16
(1,791)	1:A:85:CYS:HB2	1:A:89:GLU:H	4	0.16
(1,791)	1:A:85:CYS:HB3	1:A:89:GLU:H	4	0.16
(1,788)	1:A:80:CYS:H	1:A:78:GLU:H	3	0.16
(1,784)	1:A:71:CYS:HB2	1:A:76:ASP:H	1	0.16
(1,784)	1:A:71:CYS:HB3	1:A:76:ASP:H	1	0.16
(1,784)	1:A:71:CYS:HB2	1:A:76:ASP:H	4	0.16
(1,784)	1:A:71:CYS:HB3	1:A:76:ASP:H	4	0.16
(1,741)	1:A:9:VAL:HG11	1:A:38:GLN:HE21	7	0.16

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,741)	1:A:9:VAL:HG12	1:A:38:GLN:HE21	7	0.16
(1,741)	1:A:9:VAL:HG13	1:A:38:GLN:HE21	7	0.16
(1,741)	1:A:9:VAL:HG21	1:A:38:GLN:HE21	7	0.16
(1,741)	1:A:9:VAL:HG22	1:A:38:GLN:HE21	7	0.16
(1,741)	1:A:9:VAL:HG23	1:A:38:GLN:HE21	7	0.16
(1,74)	1:A:65:CYS:H	1:A:65:CYS:HB2	10	0.16
(1,74)	1:A:65:CYS:H	1:A:65:CYS:HB3	10	0.16
(1,735)	1:A:28:CYS:HB2	1:A:33:ASP:H	9	0.16
(1,735)	1:A:28:CYS:HB3	1:A:33:ASP:H	9	0.16
(1,731)	1:A:28:CYS:HB2	1:A:32:SER:H	5	0.16
(1,731)	1:A:28:CYS:HB3	1:A:32:SER:H	5	0.16
(1,731)	1:A:28:CYS:HB2	1:A:32:SER:H	9	0.16
(1,731)	1:A:28:CYS:HB3	1:A:32:SER:H	9	0.16
(1,724)	1:A:34:GLU:HB2	1:A:25:ASP:H	20	0.16
(1,724)	1:A:34:GLU:HB3	1:A:25:ASP:H	20	0.16
(1,718)	1:A:16:VAL:HB	1:A:20:TRP:HE1	3	0.16
(1,717)	1:A:20:TRP:HE1	1:A:20:TRP:H	12	0.16
(1,716)	1:A:28:CYS:HB2	1:A:14:GLN:HE22	17	0.16
(1,716)	1:A:28:CYS:HB3	1:A:14:GLN:HE22	17	0.16
(1,711)	1:A:10:CYS:HB2	1:A:11:ASN:H	1	0.16
(1,711)	1:A:10:CYS:HB3	1:A:11:ASN:H	1	0.16
(1,705)	1:A:100:ARG:H	1:A:100:ARG:HD2	14	0.16
(1,705)	1:A:100:ARG:H	1:A:100:ARG:HD3	14	0.16
(1,7)	1:A:22:CYS:H	1:A:23:ASP:H	10	0.16
(1,680)	1:A:79:ASN:HD22	1:A:79:ASN:HB2	15	0.16
(1,680)	1:A:79:ASN:HD22	1:A:79:ASN:HB3	15	0.16
(1,664)	1:A:105:ASN:HB2	1:A:105:ASN:HD21	2	0.16
(1,664)	1:A:105:ASN:HB3	1:A:105:ASN:HD21	2	0.16
(1,664)	1:A:105:ASN:HB2	1:A:105:ASN:HD21	3	0.16
(1,664)	1:A:105:ASN:HB3	1:A:105:ASN:HD21	3	0.16
(1,664)	1:A:105:ASN:HB2	1:A:105:ASN:HD21	7	0.16
(1,664)	1:A:105:ASN:HB3	1:A:105:ASN:HD21	7	0.16
(1,664)	1:A:105:ASN:HB2	1:A:105:ASN:HD21	17	0.16
(1,664)	1:A:105:ASN:HB3	1:A:105:ASN:HD21	17	0.16
(1,648)	1:A:101:ASN:HD22	1:A:101:ASN:HA	2	0.16
(1,645)	1:A:101:ASN:HD22	1:A:101:ASN:H	7	0.16
(1,63)	1:A:39:CYS:H	1:A:40:HIS:H	8	0.16
(1,626)	1:A:71:CYS:HA	1:A:57:GLN:HE22	18	0.16
(1,623)	1:A:30:ASP:HB2	1:A:12:ASN:HD22	9	0.16
(1,623)	1:A:30:ASP:HB3	1:A:12:ASN:HD22	9	0.16
(1,610)	1:A:14:GLN:HE22	1:A:29:GLU:H	16	0.16
(1,607)	1:A:11:ASN:HB2	1:A:11:ASN:HD21	7	0.16

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,607)	1:A:11:ASN:HB3	1:A:11:ASN:HD21	7	0.16
(1,6)	1:A:23:ASP:H	1:A:24:GLY:H	5	0.16
(1,596)	1:A:74:GLY:HA2	1:A:69:ASN:HD21	12	0.16
(1,596)	1:A:74:GLY:HA3	1:A:69:ASN:HD21	12	0.16
(1,591)	1:A:69:ASN:HB2	1:A:69:ASN:HD21	7	0.16
(1,591)	1:A:69:ASN:HB3	1:A:69:ASN:HD21	7	0.16
(1,59)	1:A:65:CYS:H	1:A:66:ASP:H	3	0.16
(1,59)	1:A:65:CYS:H	1:A:66:ASP:H	4	0.16
(1,59)	1:A:65:CYS:H	1:A:66:ASP:H	16	0.16
(1,59)	1:A:65:CYS:H	1:A:66:ASP:H	20	0.16
(1,580)	1:A:48:GLU:HG2	1:A:49:ILE:H	13	0.16
(1,580)	1:A:48:GLU:HG3	1:A:49:ILE:H	13	0.16
(1,562)	1:A:102:PHE:HB2	1:A:99:SER:H	14	0.16
(1,562)	1:A:102:PHE:HB3	1:A:99:SER:H	14	0.16
(1,560)	1:A:90:PHE:H	1:A:99:SER:H	10	0.16
(1,56)	1:A:70:ASP:H	1:A:71:CYS:H	2	0.16
(1,551)	1:A:104:CYS:HB2	1:A:104:CYS:H	6	0.16
(1,551)	1:A:104:CYS:HB3	1:A:104:CYS:H	6	0.16
(1,551)	1:A:104:CYS:HB2	1:A:104:CYS:H	13	0.16
(1,551)	1:A:104:CYS:HB3	1:A:104:CYS:H	13	0.16
(1,550)	1:A:104:CYS:HB2	1:A:104:CYS:H	6	0.16
(1,550)	1:A:104:CYS:HB3	1:A:104:CYS:H	6	0.16
(1,550)	1:A:104:CYS:HB2	1:A:104:CYS:H	13	0.16
(1,550)	1:A:104:CYS:HB3	1:A:104:CYS:H	13	0.16
(1,541)	1:A:115:ASP:HB2	1:A:116:GLU:H	9	0.16
(1,541)	1:A:115:ASP:HB3	1:A:116:GLU:H	9	0.16
(1,536)	1:A:89:GLU:HB2	1:A:86:SER:H	5	0.16
(1,536)	1:A:89:GLU:HB3	1:A:86:SER:H	5	0.16
(1,518)	1:A:49:ILE:H	1:A:61:VAL:H	3	0.16
(1,518)	1:A:49:ILE:H	1:A:61:VAL:H	6	0.16
(1,517)	1:A:59:ILE:HG12	1:A:59:ILE:H	1	0.16
(1,517)	1:A:59:ILE:HG12	1:A:59:ILE:H	1	0.16
(1,517)	1:A:59:ILE:HG13	1:A:59:ILE:H	1	0.16
(1,517)	1:A:59:ILE:HG13	1:A:59:ILE:H	1	0.16
(1,516)	1:A:49:ILE:H	1:A:59:ILE:H	7	0.16
(1,516)	1:A:49:ILE:H	1:A:59:ILE:H	10	0.16
(1,512)	1:A:59:ILE:H	1:A:49:ILE:H	8	0.16
(1,510)	1:A:48:GLU:HB2	1:A:48:GLU:H	14	0.16
(1,510)	1:A:48:GLU:HB3	1:A:48:GLU:H	14	0.16
(1,501)	1:A:34:GLU:HB2	1:A:34:GLU:H	7	0.16
(1,501)	1:A:34:GLU:HB3	1:A:34:GLU:H	7	0.16
(1,501)	1:A:34:GLU:HB2	1:A:34:GLU:H	13	0.16

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,501)	1:A:34:GLU:HB3	1:A:34:GLU:H	13	0.16
(1,499)	1:A:33:ASP:HB2	1:A:33:ASP:H	2	0.16
(1,499)	1:A:33:ASP:HB3	1:A:33:ASP:H	2	0.16
(1,499)	1:A:33:ASP:HB2	1:A:33:ASP:H	3	0.16
(1,499)	1:A:33:ASP:HB3	1:A:33:ASP:H	3	0.16
(1,499)	1:A:33:ASP:HB2	1:A:33:ASP:H	18	0.16
(1,499)	1:A:33:ASP:HB3	1:A:33:ASP:H	18	0.16
(1,495)	1:A:31:GLY:H	1:A:29:GLU:H	16	0.16
(1,49)	1:A:94:SER:H	1:A:93:SER:H	8	0.16
(1,485)	1:A:8:PHE:H	1:A:18:SER:H	9	0.16
(1,483)	1:A:10:CYS:HB2	1:A:14:GLN:H	13	0.16
(1,483)	1:A:10:CYS:HB3	1:A:14:GLN:H	13	0.16
(1,477)	1:A:9:VAL:HA	1:A:9:VAL:H	18	0.16
(1,476)	1:A:7:ASP:H	1:A:3:CYS:HB2	16	0.16
(1,476)	1:A:7:ASP:H	1:A:3:CYS:HB3	16	0.16
(1,473)	1:A:85:CYS:H	1:A:86:SER:H	6	0.16
(1,473)	1:A:85:CYS:H	1:A:86:SER:H	9	0.16
(1,469)	1:A:78:GLU:HB2	1:A:79:ASN:H	18	0.16
(1,469)	1:A:78:GLU:HB2	1:A:79:ASN:H	18	0.16
(1,469)	1:A:78:GLU:HB3	1:A:79:ASN:H	18	0.16
(1,469)	1:A:78:GLU:HB3	1:A:79:ASN:H	18	0.16
(1,466)	1:A:80:CYS:HA	1:A:79:ASN:H	7	0.16
(1,462)	1:A:79:ASN:H	1:A:78:GLU:H	4	0.16
(1,462)	1:A:79:ASN:H	1:A:78:GLU:H	5	0.16
(1,462)	1:A:79:ASN:H	1:A:78:GLU:H	8	0.16
(1,446)	1:A:73:SER:H	1:A:74:GLY:H	4	0.16
(1,443)	1:A:73:SER:H	1:A:71:CYS:HB2	20	0.16
(1,443)	1:A:73:SER:H	1:A:71:CYS:HB3	20	0.16
(1,439)	1:A:75:GLU:H	1:A:73:SER:H	4	0.16
(1,439)	1:A:75:GLU:H	1:A:73:SER:H	18	0.16
(1,435)	1:A:72:ASP:HA	1:A:72:ASP:H	7	0.16
(1,435)	1:A:72:ASP:HA	1:A:72:ASP:H	9	0.16
(1,435)	1:A:72:ASP:HA	1:A:72:ASP:H	17	0.16
(1,42)	1:A:96:ARG:H	1:A:97:CYS:H	1	0.16
(1,415)	1:A:64:ARG:HA	1:A:65:CYS:H	7	0.16
(1,415)	1:A:64:ARG:HA	1:A:65:CYS:H	17	0.16
(1,414)	1:A:63:TRP:H	1:A:63:TRP:HB2	5	0.16
(1,414)	1:A:63:TRP:H	1:A:63:TRP:HB3	5	0.16
(1,41)	1:A:96:ARG:H	1:A:97:CYS:H	1	0.16
(1,409)	1:A:60:PRO:HA	1:A:61:VAL:H	5	0.16
(1,409)	1:A:60:PRO:HA	1:A:61:VAL:H	9	0.16
(1,409)	1:A:60:PRO:HA	1:A:61:VAL:H	11	0.16

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,409)	1:A:60:PRO:HA	1:A:61:VAL:H	20	0.16
(1,390)	1:A:51:CYS:HB2	1:A:52:GLY:H	11	0.16
(1,390)	1:A:51:CYS:HB3	1:A:52:GLY:H	11	0.16
(1,386)	1:A:51:CYS:HB2	1:A:51:CYS:H	12	0.16
(1,386)	1:A:51:CYS:HB3	1:A:51:CYS:H	12	0.16
(1,378)	1:A:48:GLU:HG2	1:A:49:ILE:H	13	0.16
(1,378)	1:A:48:GLU:HG3	1:A:49:ILE:H	13	0.16
(1,374)	1:A:61:VAL:H	1:A:49:ILE:H	2	0.16
(1,374)	1:A:61:VAL:H	1:A:49:ILE:H	7	0.16
(1,372)	1:A:48:GLU:H	1:A:48:GLU:HA	17	0.16
(1,370)	1:A:44:CYS:HB2	1:A:44:CYS:H	19	0.16
(1,370)	1:A:44:CYS:HB3	1:A:44:CYS:H	19	0.16
(1,369)	1:A:43:THR:HB	1:A:44:CYS:H	2	0.16
(1,365)	1:A:43:THR:HB	1:A:43:THR:H	19	0.16
(1,351)	1:A:32:SER:H	1:A:33:ASP:H	12	0.16
(1,35)	1:A:115:ASP:H	1:A:116:GLU:H	9	0.16
(1,349)	1:A:32:SER:H	1:A:33:ASP:H	12	0.16
(1,348)	1:A:30:ASP:HB2	1:A:31:GLY:H	16	0.16
(1,348)	1:A:30:ASP:HB3	1:A:31:GLY:H	16	0.16
(1,343)	1:A:28:CYS:HB2	1:A:28:CYS:H	5	0.16
(1,343)	1:A:28:CYS:HB3	1:A:28:CYS:H	5	0.16
(1,339)	1:A:25:ASP:H	1:A:20:TRP:HB2	11	0.16
(1,339)	1:A:25:ASP:H	1:A:20:TRP:HB3	11	0.16
(1,328)	1:A:22:CYS:HB2	1:A:22:CYS:H	10	0.16
(1,328)	1:A:22:CYS:HB3	1:A:22:CYS:H	10	0.16
(1,320)	1:A:7:ASP:HA	1:A:18:SER:H	14	0.16
(1,312)	1:A:14:GLN:HG2	1:A:14:GLN:H	8	0.16
(1,312)	1:A:14:GLN:HG3	1:A:14:GLN:H	8	0.16
(1,308)	1:A:13:GLY:H	1:A:14:GLN:H	7	0.16
(1,308)	1:A:13:GLY:H	1:A:14:GLN:H	13	0.16
(1,299)	1:A:11:ASN:H	1:A:12:ASN:H	2	0.16
(1,290)	1:A:8:PHE:HA	1:A:9:VAL:H	8	0.16
(1,290)	1:A:8:PHE:HA	1:A:9:VAL:H	15	0.16
(1,290)	1:A:8:PHE:HA	1:A:9:VAL:H	17	0.16
(1,290)	1:A:8:PHE:HA	1:A:9:VAL:H	20	0.16
(1,286)	1:A:7:ASP:HB2	1:A:7:ASP:H	3	0.16
(1,286)	1:A:7:ASP:HB3	1:A:7:ASP:H	3	0.16
(1,286)	1:A:7:ASP:HB2	1:A:7:ASP:H	18	0.16
(1,286)	1:A:7:ASP:HB3	1:A:7:ASP:H	18	0.16
(1,28)	1:A:118:ASP:H	1:A:117:LEU:H	11	0.16
(1,257)	1:A:82:ASN:HB2	1:A:82:ASN:H	5	0.16
(1,257)	1:A:82:ASN:HB2	1:A:82:ASN:H	5	0.16

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,257)	1:A:82:ASN:HB3	1:A:82:ASN:H	5	0.16
(1,257)	1:A:82:ASN:HB3	1:A:82:ASN:H	5	0.16
(1,241)	1:A:86:SER:H	1:A:89:GLU:H	15	0.16
(1,204)	1:A:98:ILE:HG12	1:A:98:ILE:H	6	0.16
(1,204)	1:A:98:ILE:HG13	1:A:98:ILE:H	6	0.16
(1,204)	1:A:98:ILE:HG12	1:A:98:ILE:H	11	0.16
(1,204)	1:A:98:ILE:HG13	1:A:98:ILE:H	11	0.16
(1,204)	1:A:98:ILE:HG12	1:A:98:ILE:H	13	0.16
(1,204)	1:A:98:ILE:HG13	1:A:98:ILE:H	13	0.16
(1,190)	1:A:101:ASN:HB2	1:A:101:ASN:H	6	0.16
(1,190)	1:A:101:ASN:HB3	1:A:101:ASN:H	6	0.16
(1,190)	1:A:101:ASN:HB2	1:A:101:ASN:H	18	0.16
(1,190)	1:A:101:ASN:HB3	1:A:101:ASN:H	18	0.16
(1,180)	1:A:99:SER:HB2	1:A:102:PHE:H	1	0.16
(1,180)	1:A:99:SER:HB3	1:A:102:PHE:H	1	0.16
(1,174)	1:A:103:VAL:H	1:A:101:ASN:HB2	9	0.16
(1,174)	1:A:103:VAL:H	1:A:101:ASN:HB3	9	0.16
(1,143)	1:A:106:GLY:H	1:A:107:GLN:H	3	0.16
(1,130)	1:A:115:ASP:HB2	1:A:113:GLY:H	12	0.16
(1,130)	1:A:115:ASP:HB3	1:A:113:GLY:H	12	0.16
(1,128)	1:A:114:SER:HA	1:A:114:SER:H	3	0.16
(1,128)	1:A:114:SER:HA	1:A:114:SER:H	4	0.16
(1,125)	1:A:114:SER:H	1:A:113:GLY:HA2	18	0.16
(1,125)	1:A:114:SER:H	1:A:113:GLY:HA3	18	0.16
(1,123)	1:A:115:ASP:HB2	1:A:115:ASP:H	9	0.16
(1,123)	1:A:115:ASP:HB3	1:A:115:ASP:H	9	0.16
(1,123)	1:A:115:ASP:HB2	1:A:115:ASP:H	13	0.16
(1,123)	1:A:115:ASP:HB3	1:A:115:ASP:H	13	0.16
(1,122)	1:A:115:ASP:HB2	1:A:115:ASP:H	12	0.16
(1,122)	1:A:115:ASP:HB3	1:A:115:ASP:H	12	0.16
(1,12)	1:A:34:GLU:H	1:A:33:ASP:H	15	0.16
(1,114)	1:A:117:LEU:HD11	1:A:117:LEU:H	16	0.16
(1,114)	1:A:117:LEU:HD12	1:A:117:LEU:H	16	0.16
(1,114)	1:A:117:LEU:HD13	1:A:117:LEU:H	16	0.16
(1,114)	1:A:117:LEU:HD21	1:A:117:LEU:H	16	0.16
(1,114)	1:A:117:LEU:HD22	1:A:117:LEU:H	16	0.16
(1,114)	1:A:117:LEU:HD23	1:A:117:LEU:H	16	0.16
(1,109)	1:A:119:CYS:H	1:A:117:LEU:HG	15	0.16
(4,5)	1:A:49:ILE:O	1:A:59:ILE:H	5	0.15
(4,2)	1:A:90:PHE:O	1:A:98:ILE:H	6	0.15
(3,7)	2:A:202:CA:CA	1:A:63:TRP:O	19	0.15
(3,10)	2:A:202:CA:CA	1:A:70:ASP:OD2	7	0.15

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,89)	1:A:107:GLN:HB2	1:A:108:ASP:H	11	0.15
(2,89)	1:A:107:GLN:HB3	1:A:108:ASP:H	11	0.15
(2,72)	1:A:110:CYS:HB2	1:A:113:GLY:H	12	0.15
(2,72)	1:A:110:CYS:HB3	1:A:113:GLY:H	12	0.15
(2,72)	1:A:112:ASP:HB2	1:A:113:GLY:H	12	0.15
(2,72)	1:A:112:ASP:HB3	1:A:113:GLY:H	12	0.15
(2,66)	1:A:4:ALA:H	1:A:7:ASP:H	2	0.15
(2,66)	1:A:5:GLU:H	1:A:7:ASP:H	2	0.15
(2,66)	1:A:4:ALA:H	1:A:7:ASP:H	14	0.15
(2,66)	1:A:5:GLU:H	1:A:7:ASP:H	14	0.15
(2,42)	1:A:49:ILE:HG21	1:A:61:VAL:H	14	0.15
(2,42)	1:A:49:ILE:HG22	1:A:61:VAL:H	14	0.15
(2,42)	1:A:49:ILE:HG23	1:A:61:VAL:H	14	0.15
(2,42)	1:A:59:ILE:HD11	1:A:61:VAL:H	14	0.15
(2,42)	1:A:59:ILE:HD12	1:A:61:VAL:H	14	0.15
(2,42)	1:A:59:ILE:HD13	1:A:61:VAL:H	14	0.15
(2,42)	1:A:60:PRO:HB2	1:A:61:VAL:H	14	0.15
(2,42)	1:A:60:PRO:HB3	1:A:61:VAL:H	14	0.15
(2,42)	1:A:61:VAL:HG11	1:A:61:VAL:H	14	0.15
(2,42)	1:A:61:VAL:HG12	1:A:61:VAL:H	14	0.15
(2,42)	1:A:61:VAL:HG13	1:A:61:VAL:H	14	0.15
(2,42)	1:A:61:VAL:HG21	1:A:61:VAL:H	14	0.15
(2,42)	1:A:61:VAL:HG22	1:A:61:VAL:H	14	0.15
(2,42)	1:A:61:VAL:HG23	1:A:61:VAL:H	14	0.15
(2,388)	1:A:64:ARG:HD2	1:A:68:GLU:H	2	0.15
(2,388)	1:A:64:ARG:HD3	1:A:68:GLU:H	2	0.15
(2,388)	1:A:66:ASP:HB2	1:A:68:GLU:H	2	0.15
(2,388)	1:A:66:ASP:HB3	1:A:68:GLU:H	2	0.15
(2,388)	1:A:64:ARG:HD2	1:A:68:GLU:H	7	0.15
(2,388)	1:A:64:ARG:HD3	1:A:68:GLU:H	7	0.15
(2,388)	1:A:66:ASP:HB2	1:A:68:GLU:H	7	0.15
(2,388)	1:A:66:ASP:HB3	1:A:68:GLU:H	7	0.15
(2,382)	1:A:72:ASP:HB2	1:A:73:SER:H	9	0.15
(2,382)	1:A:72:ASP:HB3	1:A:73:SER:H	9	0.15
(2,376)	1:A:61:VAL:HB	1:A:88:ASP:H	4	0.15
(2,376)	1:A:62:SER:H	1:A:88:ASP:H	4	0.15
(2,376)	1:A:87:PRO:HB2	1:A:88:ASP:H	4	0.15
(2,376)	1:A:87:PRO:HB3	1:A:88:ASP:H	4	0.15
(2,376)	1:A:61:VAL:HB	1:A:88:ASP:H	14	0.15
(2,376)	1:A:62:SER:H	1:A:88:ASP:H	14	0.15
(2,376)	1:A:87:PRO:HB2	1:A:88:ASP:H	14	0.15
(2,376)	1:A:87:PRO:HB3	1:A:88:ASP:H	14	0.15

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,376)	1:A:61:VAL:HB	1:A:88:ASP:H	18	0.15
(2,376)	1:A:62:SER:H	1:A:88:ASP:H	18	0.15
(2,376)	1:A:87:PRO:HB2	1:A:88:ASP:H	18	0.15
(2,376)	1:A:87:PRO:HB3	1:A:88:ASP:H	18	0.15
(2,367)	1:A:35:SER:HB2	1:A:37:GLU:H	7	0.15
(2,367)	1:A:35:SER:HB3	1:A:37:GLU:H	7	0.15
(2,367)	1:A:36:PRO:HA	1:A:37:GLU:H	7	0.15
(2,365)	1:A:69:ASN:HA	1:A:70:ASP:H	9	0.15
(2,365)	1:A:70:ASP:HA	1:A:70:ASP:H	9	0.15
(2,365)	1:A:69:ASN:HA	1:A:70:ASP:H	11	0.15
(2,365)	1:A:70:ASP:HA	1:A:70:ASP:H	11	0.15
(2,365)	1:A:69:ASN:HA	1:A:70:ASP:H	18	0.15
(2,365)	1:A:70:ASP:HA	1:A:70:ASP:H	18	0.15
(2,362)	1:A:14:GLN:HB2	1:A:10:CYS:H	5	0.15
(2,362)	1:A:14:GLN:HB3	1:A:10:CYS:H	5	0.15
(2,349)	1:A:99:SER:HB2	1:A:101:ASN:H	1	0.15
(2,349)	1:A:99:SER:HB3	1:A:101:ASN:H	1	0.15
(2,349)	1:A:102:PHE:HB2	1:A:101:ASN:H	1	0.15
(2,349)	1:A:102:PHE:HB3	1:A:101:ASN:H	1	0.15
(2,345)	1:A:84:THR:HG1	1:A:85:CYS:H	5	0.15
(2,345)	1:A:84:THR:HG21	1:A:85:CYS:H	5	0.15
(2,345)	1:A:84:THR:HG22	1:A:85:CYS:H	5	0.15
(2,345)	1:A:84:THR:HG23	1:A:85:CYS:H	5	0.15
(2,345)	1:A:91:THR:HG21	1:A:85:CYS:H	5	0.15
(2,345)	1:A:91:THR:HG22	1:A:85:CYS:H	5	0.15
(2,345)	1:A:91:THR:HG23	1:A:85:CYS:H	5	0.15
(2,339)	1:A:9:VAL:HG11	1:A:13:GLY:H	12	0.15
(2,339)	1:A:9:VAL:HG12	1:A:13:GLY:H	12	0.15
(2,339)	1:A:9:VAL:HG13	1:A:13:GLY:H	12	0.15
(2,339)	1:A:9:VAL:HG21	1:A:13:GLY:H	12	0.15
(2,339)	1:A:9:VAL:HG22	1:A:13:GLY:H	12	0.15
(2,339)	1:A:9:VAL:HG23	1:A:13:GLY:H	12	0.15
(2,331)	1:A:2:THR:H	1:A:99:SER:H	16	0.15
(2,331)	1:A:3:CYS:H	1:A:99:SER:H	16	0.15
(2,331)	1:A:80:CYS:H	1:A:99:SER:H	16	0.15
(2,331)	1:A:81:GLY:H	1:A:99:SER:H	16	0.15
(2,331)	1:A:101:ASN:H	1:A:99:SER:H	16	0.15
(2,310)	1:A:14:GLN:HG2	1:A:14:GLN:HE22	15	0.15
(2,310)	1:A:14:GLN:HG3	1:A:14:GLN:HE22	15	0.15
(2,310)	1:A:27:ASP:HB2	1:A:14:GLN:HE22	15	0.15
(2,310)	1:A:27:ASP:HB3	1:A:14:GLN:HE22	15	0.15
(2,300)	1:A:44:CYS:HB2	1:A:48:GLU:H	10	0.15

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,300)	1:A:44:CYS:HB3	1:A:48:GLU:H	10	0.15
(2,300)	1:A:48:GLU:HG2	1:A:48:GLU:H	10	0.15
(2,300)	1:A:48:GLU:HG3	1:A:48:GLU:H	10	0.15
(2,295)	1:A:10:CYS:HA	1:A:38:GLN:HE21	4	0.15
(2,295)	1:A:38:GLN:HA	1:A:38:GLN:HE21	4	0.15
(2,293)	1:A:18:SER:HA	1:A:8:PHE:H	12	0.15
(2,293)	1:A:18:SER:HB2	1:A:8:PHE:H	12	0.15
(2,293)	1:A:18:SER:HB3	1:A:8:PHE:H	12	0.15
(2,292)	1:A:3:CYS:HB2	1:A:8:PHE:H	5	0.15
(2,292)	1:A:3:CYS:HB3	1:A:8:PHE:H	5	0.15
(2,292)	1:A:7:ASP:HB2	1:A:8:PHE:H	5	0.15
(2,292)	1:A:7:ASP:HB3	1:A:8:PHE:H	5	0.15
(2,292)	1:A:8:PHE:HB2	1:A:8:PHE:H	5	0.15
(2,292)	1:A:8:PHE:HB3	1:A:8:PHE:H	5	0.15
(2,292)	1:A:3:CYS:HB2	1:A:8:PHE:H	15	0.15
(2,292)	1:A:3:CYS:HB3	1:A:8:PHE:H	15	0.15
(2,292)	1:A:7:ASP:HB2	1:A:8:PHE:H	15	0.15
(2,292)	1:A:7:ASP:HB3	1:A:8:PHE:H	15	0.15
(2,292)	1:A:8:PHE:HB2	1:A:8:PHE:H	15	0.15
(2,292)	1:A:8:PHE:HB3	1:A:8:PHE:H	15	0.15
(2,288)	1:A:75:GLU:HB2	1:A:75:GLU:H	8	0.15
(2,288)	1:A:75:GLU:HB3	1:A:75:GLU:H	8	0.15
(2,276)	1:A:42:ARG:HA	1:A:57:GLN:H	16	0.15
(2,276)	1:A:43:THR:HA	1:A:57:GLN:H	16	0.15
(2,276)	1:A:56:THR:HB	1:A:57:GLN:H	16	0.15
(2,263)	1:A:62:SER:HB2	1:A:63:TRP:H	5	0.15
(2,263)	1:A:62:SER:HB3	1:A:63:TRP:H	5	0.15
(2,263)	1:A:63:TRP:HB2	1:A:63:TRP:H	5	0.15
(2,259)	1:A:69:ASN:HB2	1:A:69:ASN:HD21	5	0.15
(2,259)	1:A:69:ASN:HB3	1:A:69:ASN:HD21	5	0.15
(2,259)	1:A:70:ASP:HB2	1:A:69:ASN:HD21	5	0.15
(2,259)	1:A:70:ASP:HB3	1:A:69:ASN:HD21	5	0.15
(2,259)	1:A:69:ASN:HB2	1:A:69:ASN:HD21	6	0.15
(2,259)	1:A:69:ASN:HB3	1:A:69:ASN:HD21	6	0.15
(2,259)	1:A:70:ASP:HB2	1:A:69:ASN:HD21	6	0.15
(2,259)	1:A:70:ASP:HB3	1:A:69:ASN:HD21	6	0.15
(2,259)	1:A:69:ASN:HB2	1:A:69:ASN:HD21	20	0.15
(2,259)	1:A:69:ASN:HB3	1:A:69:ASN:HD21	20	0.15
(2,259)	1:A:70:ASP:HB2	1:A:69:ASN:HD21	20	0.15
(2,259)	1:A:70:ASP:HB3	1:A:69:ASN:HD21	20	0.15
(2,246)	1:A:90:PHE:HB2	1:A:100:ARG:H	13	0.15
(2,246)	1:A:90:PHE:HB3	1:A:100:ARG:H	13	0.15

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,246)	1:A:90:PHE:HB2	1:A:100:ARG:H	18	0.15
(2,246)	1:A:90:PHE:HB3	1:A:100:ARG:H	18	0.15
(2,24)	1:A:11:ASN:HB2	1:A:11:ASN:H	19	0.15
(2,24)	1:A:11:ASN:HB3	1:A:11:ASN:H	19	0.15
(2,24)	1:A:12:ASN:HB2	1:A:11:ASN:H	19	0.15
(2,236)	1:A:19:ARG:HB2	1:A:21:LYS:H	2	0.15
(2,236)	1:A:19:ARG:HB3	1:A:21:LYS:H	2	0.15
(2,236)	1:A:21:LYS:HB2	1:A:21:LYS:H	2	0.15
(2,236)	1:A:21:LYS:HB3	1:A:21:LYS:H	2	0.15
(2,209)	1:A:28:CYS:HB2	1:A:31:GLY:H	13	0.15
(2,209)	1:A:28:CYS:HB3	1:A:31:GLY:H	13	0.15
(2,209)	1:A:29:GLU:HA	1:A:31:GLY:H	13	0.15
(2,209)	1:A:32:SER:HA	1:A:31:GLY:H	13	0.15
(2,209)	1:A:32:SER:HB2	1:A:31:GLY:H	13	0.15
(2,209)	1:A:32:SER:HB3	1:A:31:GLY:H	13	0.15
(2,191)	1:A:53:ALA:H	1:A:55:SER:H	1	0.15
(2,191)	1:A:54:HIS:H	1:A:55:SER:H	1	0.15
(2,191)	1:A:56:THR:H	1:A:55:SER:H	1	0.15
(2,188)	1:A:16:VAL:HG11	1:A:19:ARG:H	4	0.15
(2,188)	1:A:16:VAL:HG12	1:A:19:ARG:H	4	0.15
(2,188)	1:A:16:VAL:HG13	1:A:19:ARG:H	4	0.15
(2,188)	1:A:16:VAL:HG21	1:A:19:ARG:H	4	0.15
(2,188)	1:A:16:VAL:HG22	1:A:19:ARG:H	4	0.15
(2,188)	1:A:16:VAL:HG23	1:A:19:ARG:H	4	0.15
(2,179)	1:A:9:VAL:HG11	1:A:10:CYS:H	3	0.15
(2,179)	1:A:9:VAL:HG12	1:A:10:CYS:H	3	0.15
(2,179)	1:A:9:VAL:HG13	1:A:10:CYS:H	3	0.15
(2,179)	1:A:9:VAL:HG21	1:A:10:CYS:H	3	0.15
(2,179)	1:A:9:VAL:HG22	1:A:10:CYS:H	3	0.15
(2,179)	1:A:9:VAL:HG23	1:A:10:CYS:H	3	0.15
(2,164)	1:A:14:GLN:HB2	1:A:14:GLN:H	16	0.15
(2,164)	1:A:14:GLN:HB3	1:A:14:GLN:H	16	0.15
(2,134)	1:A:79:ASN:HB2	1:A:85:CYS:H	11	0.15
(2,134)	1:A:79:ASN:HB3	1:A:85:CYS:H	11	0.15
(2,134)	1:A:97:CYS:HB2	1:A:85:CYS:H	11	0.15
(2,134)	1:A:97:CYS:HB3	1:A:85:CYS:H	11	0.15
(2,133)	1:A:78:GLU:HG2	1:A:79:ASN:HD22	4	0.15
(2,133)	1:A:78:GLU:HG3	1:A:79:ASN:HD22	4	0.15
(2,133)	1:A:89:GLU:HB2	1:A:79:ASN:HD22	4	0.15
(2,133)	1:A:89:GLU:HB3	1:A:79:ASN:HD22	4	0.15
(2,132)	1:A:45:ARG:HB2	1:A:45:ARG:H	9	0.15
(2,132)	1:A:45:ARG:HB3	1:A:45:ARG:H	9	0.15

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,132)	1:A:46:ILE:HG12	1:A:45:ARG:H	9	0.15
(2,132)	1:A:46:ILE:HG13	1:A:45:ARG:H	9	0.15
(2,132)	1:A:45:ARG:HB2	1:A:45:ARG:H	10	0.15
(2,132)	1:A:45:ARG:HB3	1:A:45:ARG:H	10	0.15
(2,132)	1:A:46:ILE:HG12	1:A:45:ARG:H	10	0.15
(2,132)	1:A:46:ILE:HG13	1:A:45:ARG:H	10	0.15
(2,132)	1:A:45:ARG:HB2	1:A:45:ARG:H	18	0.15
(2,132)	1:A:45:ARG:HB3	1:A:45:ARG:H	18	0.15
(2,132)	1:A:46:ILE:HG12	1:A:45:ARG:H	18	0.15
(2,132)	1:A:46:ILE:HG13	1:A:45:ARG:H	18	0.15
(2,13)	1:A:110:CYS:HB2	1:A:113:GLY:H	1	0.15
(2,13)	1:A:110:CYS:HB3	1:A:113:GLY:H	1	0.15
(2,13)	1:A:111:SER:HB2	1:A:113:GLY:H	1	0.15
(2,13)	1:A:111:SER:HB3	1:A:113:GLY:H	1	0.15
(2,13)	1:A:113:GLY:HA2	1:A:113:GLY:H	1	0.15
(2,13)	1:A:113:GLY:HA3	1:A:113:GLY:H	1	0.15
(2,13)	1:A:110:CYS:HB2	1:A:113:GLY:H	17	0.15
(2,13)	1:A:110:CYS:HB3	1:A:113:GLY:H	17	0.15
(2,13)	1:A:111:SER:HB2	1:A:113:GLY:H	17	0.15
(2,13)	1:A:111:SER:HB3	1:A:113:GLY:H	17	0.15
(2,13)	1:A:113:GLY:HA2	1:A:113:GLY:H	17	0.15
(2,13)	1:A:113:GLY:HA3	1:A:113:GLY:H	17	0.15
(2,13)	1:A:110:CYS:HB2	1:A:113:GLY:H	19	0.15
(2,13)	1:A:110:CYS:HB3	1:A:113:GLY:H	19	0.15
(2,13)	1:A:111:SER:HB2	1:A:113:GLY:H	19	0.15
(2,13)	1:A:111:SER:HB3	1:A:113:GLY:H	19	0.15
(2,13)	1:A:113:GLY:HA2	1:A:113:GLY:H	19	0.15
(2,13)	1:A:113:GLY:HA3	1:A:113:GLY:H	19	0.15
(2,124)	1:A:43:THR:HG1	1:A:57:GLN:H	6	0.15
(2,124)	1:A:43:THR:HG1	1:A:57:GLN:H	6	0.15
(2,124)	1:A:43:THR:HG21	1:A:57:GLN:H	6	0.15
(2,124)	1:A:43:THR:HG21	1:A:57:GLN:H	6	0.15
(2,124)	1:A:43:THR:HG22	1:A:57:GLN:H	6	0.15
(2,124)	1:A:43:THR:HG22	1:A:57:GLN:H	6	0.15
(2,124)	1:A:43:THR:HG23	1:A:57:GLN:H	6	0.15
(2,124)	1:A:43:THR:HG23	1:A:57:GLN:H	6	0.15
(2,124)	1:A:56:THR:HG1	1:A:57:GLN:H	6	0.15
(2,124)	1:A:56:THR:HG21	1:A:57:GLN:H	6	0.15
(2,124)	1:A:56:THR:HG21	1:A:57:GLN:H	6	0.15
(2,124)	1:A:56:THR:HG22	1:A:57:GLN:H	6	0.15
(2,124)	1:A:56:THR:HG22	1:A:57:GLN:H	6	0.15
(2,124)	1:A:56:THR:HG23	1:A:57:GLN:H	6	0.15

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,124)	1:A:56:THR:HG23	1:A:57:GLN:H	6	0.15
(2,117)	1:A:14:GLN:HB2	1:A:12:ASN:HD21	5	0.15
(2,117)	1:A:14:GLN:HB3	1:A:12:ASN:HD21	5	0.15
(2,115)	1:A:80:CYS:H	1:A:81:GLY:H	9	0.15
(2,115)	1:A:85:CYS:H	1:A:81:GLY:H	9	0.15
(2,115)	1:A:80:CYS:H	1:A:81:GLY:H	19	0.15
(2,115)	1:A:85:CYS:H	1:A:81:GLY:H	19	0.15
(2,112)	1:A:83:ILE:HG12	1:A:84:THR:H	8	0.15
(2,112)	1:A:83:ILE:HG13	1:A:84:THR:H	8	0.15
(2,112)	1:A:84:THR:HG1	1:A:84:THR:H	8	0.15
(2,112)	1:A:84:THR:HG21	1:A:84:THR:H	8	0.15
(2,112)	1:A:84:THR:HG22	1:A:84:THR:H	8	0.15
(2,112)	1:A:84:THR:HG23	1:A:84:THR:H	8	0.15
(2,110)	1:A:17:PRO:HB2	1:A:19:ARG:H	1	0.15
(2,110)	1:A:17:PRO:HB3	1:A:19:ARG:H	1	0.15
(2,110)	1:A:19:ARG:HB2	1:A:19:ARG:H	1	0.15
(2,110)	1:A:19:ARG:HB3	1:A:19:ARG:H	1	0.15
(2,110)	1:A:17:PRO:HB2	1:A:19:ARG:H	7	0.15
(2,110)	1:A:17:PRO:HB3	1:A:19:ARG:H	7	0.15
(2,110)	1:A:19:ARG:HB2	1:A:19:ARG:H	7	0.15
(2,110)	1:A:19:ARG:HB3	1:A:19:ARG:H	7	0.15
(2,110)	1:A:17:PRO:HB2	1:A:19:ARG:H	14	0.15
(2,110)	1:A:17:PRO:HB3	1:A:19:ARG:H	14	0.15
(2,110)	1:A:19:ARG:HB2	1:A:19:ARG:H	14	0.15
(2,110)	1:A:19:ARG:HB3	1:A:19:ARG:H	14	0.15
(1,98)	1:A:98:ILE:HG12	1:A:99:SER:H	16	0.15
(1,98)	1:A:98:ILE:HG13	1:A:99:SER:H	16	0.15
(1,94)	1:A:120:ALA:H	1:A:119:CYS:HB2	19	0.15
(1,94)	1:A:120:ALA:H	1:A:119:CYS:HB3	19	0.15
(1,93)	1:A:8:PHE:H	1:A:7:ASP:HA	20	0.15
(1,928)	1:A:102:PHE:HA	1:A:103:VAL:HG11	16	0.15
(1,928)	1:A:102:PHE:HA	1:A:103:VAL:HG12	16	0.15
(1,928)	1:A:102:PHE:HA	1:A:103:VAL:HG13	16	0.15
(1,925)	1:A:8:PHE:HB3	1:A:16:VAL:HG21	7	0.15
(1,925)	1:A:8:PHE:HB3	1:A:16:VAL:HG22	7	0.15
(1,925)	1:A:8:PHE:HB3	1:A:16:VAL:HG23	7	0.15
(1,92)	1:A:7:ASP:HB2	1:A:8:PHE:H	10	0.15
(1,92)	1:A:7:ASP:HB3	1:A:8:PHE:H	10	0.15
(1,92)	1:A:7:ASP:HB2	1:A:8:PHE:H	14	0.15
(1,92)	1:A:7:ASP:HB3	1:A:8:PHE:H	14	0.15
(1,917)	1:A:28:CYS:H	1:A:14:GLN:HG2	5	0.15
(1,911)	1:A:57:GLN:HE21	1:A:71:CYS:H	19	0.15

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,909)	1:A:43:THR:HG1	1:A:46:ILE:H	17	0.15
(1,909)	1:A:43:THR:HG21	1:A:46:ILE:H	17	0.15
(1,909)	1:A:43:THR:HG22	1:A:46:ILE:H	17	0.15
(1,909)	1:A:43:THR:HG23	1:A:46:ILE:H	17	0.15
(1,906)	1:A:13:GLY:HA2	1:A:12:ASN:HD22	9	0.15
(1,906)	1:A:13:GLY:HA3	1:A:12:ASN:HD22	9	0.15
(1,900)	1:A:83:ILE:HG12	1:A:82:ASN:H	10	0.15
(1,900)	1:A:83:ILE:HG13	1:A:82:ASN:H	10	0.15
(1,891)	1:A:64:ARG:H	1:A:80:CYS:HB2	17	0.15
(1,891)	1:A:64:ARG:H	1:A:80:CYS:HB3	17	0.15
(1,886)	1:A:51:CYS:H	1:A:58:CYS:H	7	0.15
(1,884)	1:A:50:SER:H	1:A:59:ILE:H	7	0.15
(1,876)	1:A:39:CYS:HB2	1:A:43:THR:H	20	0.15
(1,876)	1:A:39:CYS:HB3	1:A:43:THR:H	20	0.15
(1,872)	1:A:32:SER:H	1:A:33:ASP:HB2	13	0.15
(1,872)	1:A:32:SER:H	1:A:33:ASP:HB3	13	0.15
(1,871)	1:A:30:ASP:HB2	1:A:32:SER:H	1	0.15
(1,871)	1:A:30:ASP:HB3	1:A:32:SER:H	1	0.15
(1,853)	1:A:10:CYS:HB2	1:A:12:ASN:H	15	0.15
(1,853)	1:A:10:CYS:HB3	1:A:12:ASN:H	15	0.15
(1,851)	1:A:32:SER:H	1:A:11:ASN:HD22	2	0.15
(1,851)	1:A:32:SER:H	1:A:11:ASN:HD22	3	0.15
(1,851)	1:A:32:SER:H	1:A:11:ASN:HD22	12	0.15
(1,838)	1:A:58:CYS:HA	1:A:52:GLY:H	15	0.15
(1,838)	1:A:58:CYS:HA	1:A:52:GLY:H	17	0.15
(1,835)	1:A:45:ARG:HB2	1:A:46:ILE:H	8	0.15
(1,835)	1:A:45:ARG:HB3	1:A:46:ILE:H	8	0.15
(1,831)	1:A:73:SER:H	1:A:75:GLU:H	2	0.15
(1,828)	1:A:85:CYS:HA	1:A:86:SER:H	4	0.15
(1,828)	1:A:85:CYS:HA	1:A:86:SER:H	16	0.15
(1,822)	1:A:113:GLY:HA2	1:A:116:GLU:H	6	0.15
(1,822)	1:A:113:GLY:HA3	1:A:116:GLU:H	6	0.15
(1,816)	1:A:109:ASP:H	1:A:116:GLU:HG2	13	0.15
(1,816)	1:A:109:ASP:H	1:A:116:GLU:HG3	13	0.15
(1,816)	1:A:109:ASP:H	1:A:116:GLU:HG2	20	0.15
(1,816)	1:A:109:ASP:H	1:A:116:GLU:HG3	20	0.15
(1,811)	1:A:107:GLN:H	1:A:105:ASN:HD21	18	0.15
(1,809)	1:A:106:GLY:H	1:A:104:CYS:H	14	0.15
(1,800)	1:A:85:CYS:HB2	1:A:98:ILE:H	19	0.15
(1,800)	1:A:85:CYS:HB3	1:A:98:ILE:H	19	0.15
(1,792)	1:A:97:CYS:HB2	1:A:91:THR:H	19	0.15
(1,792)	1:A:97:CYS:HB3	1:A:91:THR:H	19	0.15

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,791)	1:A:85:CYS:HB2	1:A:89:GLU:H	12	0.15
(1,791)	1:A:85:CYS:HB3	1:A:89:GLU:H	12	0.15
(1,787)	1:A:73:SER:H	1:A:76:ASP:H	13	0.15
(1,784)	1:A:71:CYS:HB2	1:A:76:ASP:H	14	0.15
(1,784)	1:A:71:CYS:HB3	1:A:76:ASP:H	14	0.15
(1,781)	1:A:73:SER:H	1:A:71:CYS:HB2	11	0.15
(1,781)	1:A:73:SER:H	1:A:71:CYS:HB3	11	0.15
(1,766)	1:A:48:GLU:HB2	1:A:58:CYS:H	14	0.15
(1,766)	1:A:48:GLU:HB3	1:A:58:CYS:H	14	0.15
(1,756)	1:A:57:GLN:HB2	1:A:57:GLN:HE21	6	0.15
(1,756)	1:A:57:GLN:HB2	1:A:57:GLN:HE21	6	0.15
(1,756)	1:A:57:GLN:HB3	1:A:57:GLN:HE21	6	0.15
(1,756)	1:A:57:GLN:HB3	1:A:57:GLN:HE21	6	0.15
(1,74)	1:A:65:CYS:H	1:A:65:CYS:HB2	8	0.15
(1,74)	1:A:65:CYS:H	1:A:65:CYS:HB3	8	0.15
(1,734)	1:A:32:SER:H	1:A:11:ASN:H	6	0.15
(1,726)	1:A:34:GLU:HG2	1:A:27:ASP:H	12	0.15
(1,726)	1:A:34:GLU:HG3	1:A:27:ASP:H	12	0.15
(1,718)	1:A:16:VAL:HB	1:A:20:TRP:HE1	6	0.15
(1,712)	1:A:32:SER:H	1:A:11:ASN:H	6	0.15
(1,705)	1:A:100:ARG:H	1:A:100:ARG:HD2	6	0.15
(1,705)	1:A:100:ARG:H	1:A:100:ARG:HD3	6	0.15
(1,7)	1:A:22:CYS:H	1:A:23:ASP:H	16	0.15
(1,698)	1:A:64:ARG:H	1:A:64:ARG:HG2	8	0.15
(1,698)	1:A:64:ARG:H	1:A:64:ARG:HG3	8	0.15
(1,683)	1:A:78:GLU:HG2	1:A:79:ASN:HD21	12	0.15
(1,683)	1:A:78:GLU:HG3	1:A:79:ASN:HD21	12	0.15
(1,683)	1:A:78:GLU:HG2	1:A:79:ASN:HD21	20	0.15
(1,683)	1:A:78:GLU:HG3	1:A:79:ASN:HD21	20	0.15
(1,664)	1:A:105:ASN:HB2	1:A:105:ASN:HD21	4	0.15
(1,664)	1:A:105:ASN:HB3	1:A:105:ASN:HD21	4	0.15
(1,662)	1:A:102:PHE:HB2	1:A:105:ASN:HD21	7	0.15
(1,662)	1:A:102:PHE:HB3	1:A:105:ASN:HD21	7	0.15
(1,658)	1:A:102:PHE:HA	1:A:105:ASN:HD22	8	0.15
(1,658)	1:A:102:PHE:HA	1:A:105:ASN:HD22	16	0.15
(1,645)	1:A:101:ASN:HD22	1:A:101:ASN:H	3	0.15
(1,627)	1:A:72:ASP:HA	1:A:57:GLN:HE22	15	0.15
(1,623)	1:A:30:ASP:HB2	1:A:12:ASN:HD22	3	0.15
(1,623)	1:A:30:ASP:HB3	1:A:12:ASN:HD22	3	0.15
(1,612)	1:A:15:CYS:H	1:A:14:GLN:HE22	1	0.15
(1,610)	1:A:14:GLN:HE22	1:A:29:GLU:H	11	0.15
(1,607)	1:A:11:ASN:HB2	1:A:11:ASN:HD21	17	0.15

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,607)	1:A:11:ASN:HB3	1:A:11:ASN:HD21	17	0.15
(1,601)	1:A:11:ASN:H	1:A:11:ASN:HD22	17	0.15
(1,59)	1:A:65:CYS:H	1:A:66:ASP:H	1	0.15
(1,59)	1:A:65:CYS:H	1:A:66:ASP:H	5	0.15
(1,59)	1:A:65:CYS:H	1:A:66:ASP:H	7	0.15
(1,59)	1:A:65:CYS:H	1:A:66:ASP:H	11	0.15
(1,59)	1:A:65:CYS:H	1:A:66:ASP:H	18	0.15
(1,586)	1:A:69:ASN:HA	1:A:64:ARG:H	13	0.15
(1,580)	1:A:48:GLU:HG2	1:A:49:ILE:H	5	0.15
(1,580)	1:A:48:GLU:HG3	1:A:49:ILE:H	5	0.15
(1,578)	1:A:52:GLY:H	1:A:50:SER:HB2	18	0.15
(1,578)	1:A:52:GLY:H	1:A:50:SER:HB3	18	0.15
(1,574)	1:A:64:ARG:H	1:A:65:CYS:H	20	0.15
(1,57)	1:A:66:ASP:H	1:A:67:GLY:H	10	0.15
(1,565)	1:A:91:THR:HG1	1:A:91:THR:H	12	0.15
(1,565)	1:A:91:THR:HG21	1:A:91:THR:H	12	0.15
(1,565)	1:A:91:THR:HG22	1:A:91:THR:H	12	0.15
(1,565)	1:A:91:THR:HG23	1:A:91:THR:H	12	0.15
(1,560)	1:A:90:PHE:H	1:A:99:SER:H	11	0.15
(1,560)	1:A:90:PHE:H	1:A:99:SER:H	13	0.15
(1,551)	1:A:104:CYS:HB2	1:A:104:CYS:H	5	0.15
(1,551)	1:A:104:CYS:HB3	1:A:104:CYS:H	5	0.15
(1,550)	1:A:104:CYS:HB2	1:A:104:CYS:H	5	0.15
(1,550)	1:A:104:CYS:HB3	1:A:104:CYS:H	5	0.15
(1,55)	1:A:71:CYS:H	1:A:70:ASP:H	12	0.15
(1,534)	1:A:77:GLU:HB2	1:A:77:GLU:H	19	0.15
(1,534)	1:A:77:GLU:HB3	1:A:77:GLU:H	19	0.15
(1,510)	1:A:48:GLU:HB2	1:A:48:GLU:H	3	0.15
(1,510)	1:A:48:GLU:HB3	1:A:48:GLU:H	3	0.15
(1,510)	1:A:48:GLU:HB2	1:A:48:GLU:H	10	0.15
(1,510)	1:A:48:GLU:HB3	1:A:48:GLU:H	10	0.15
(1,510)	1:A:48:GLU:HB2	1:A:48:GLU:H	15	0.15
(1,510)	1:A:48:GLU:HB3	1:A:48:GLU:H	15	0.15
(1,501)	1:A:34:GLU:HB2	1:A:34:GLU:H	17	0.15
(1,501)	1:A:34:GLU:HB3	1:A:34:GLU:H	17	0.15
(1,499)	1:A:33:ASP:HB2	1:A:33:ASP:H	1	0.15
(1,499)	1:A:33:ASP:HB3	1:A:33:ASP:H	1	0.15
(1,49)	1:A:94:SER:H	1:A:93:SER:H	14	0.15
(1,482)	1:A:11:ASN:HD21	1:A:11:ASN:H	1	0.15
(1,482)	1:A:11:ASN:HD21	1:A:11:ASN:H	7	0.15
(1,482)	1:A:11:ASN:HD21	1:A:11:ASN:H	17	0.15
(1,477)	1:A:9:VAL:HA	1:A:9:VAL:H	3	0.15

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,475)	1:A:75:GLU:H	1:A:76:ASP:H	5	0.15
(1,475)	1:A:75:GLU:H	1:A:76:ASP:H	9	0.15
(1,475)	1:A:75:GLU:H	1:A:76:ASP:H	14	0.15
(1,473)	1:A:85:CYS:H	1:A:86:SER:H	7	0.15
(1,473)	1:A:85:CYS:H	1:A:86:SER:H	15	0.15
(1,473)	1:A:85:CYS:H	1:A:86:SER:H	18	0.15
(1,473)	1:A:85:CYS:H	1:A:86:SER:H	19	0.15
(1,469)	1:A:78:GLU:HB2	1:A:79:ASN:H	14	0.15
(1,469)	1:A:78:GLU:HB2	1:A:79:ASN:H	14	0.15
(1,469)	1:A:78:GLU:HB3	1:A:79:ASN:H	14	0.15
(1,469)	1:A:78:GLU:HB3	1:A:79:ASN:H	14	0.15
(1,462)	1:A:79:ASN:H	1:A:78:GLU:H	7	0.15
(1,454)	1:A:78:GLU:HG2	1:A:76:ASP:H	6	0.15
(1,454)	1:A:78:GLU:HG3	1:A:76:ASP:H	6	0.15
(1,454)	1:A:78:GLU:HG2	1:A:76:ASP:H	11	0.15
(1,454)	1:A:78:GLU:HG3	1:A:76:ASP:H	11	0.15
(1,451)	1:A:75:GLU:H	1:A:76:ASP:H	5	0.15
(1,451)	1:A:75:GLU:H	1:A:76:ASP:H	9	0.15
(1,451)	1:A:75:GLU:H	1:A:76:ASP:H	14	0.15
(1,442)	1:A:73:SER:HB2	1:A:73:SER:H	2	0.15
(1,442)	1:A:73:SER:HB3	1:A:73:SER:H	2	0.15
(1,437)	1:A:72:ASP:H	1:A:71:CYS:H	12	0.15
(1,435)	1:A:72:ASP:HA	1:A:72:ASP:H	1	0.15
(1,435)	1:A:72:ASP:HA	1:A:72:ASP:H	11	0.15
(1,435)	1:A:72:ASP:HA	1:A:72:ASP:H	16	0.15
(1,42)	1:A:96:ARG:H	1:A:97:CYS:H	9	0.15
(1,42)	1:A:96:ARG:H	1:A:97:CYS:H	16	0.15
(1,419)	1:A:65:CYS:HB2	1:A:66:ASP:H	18	0.15
(1,419)	1:A:65:CYS:HB3	1:A:66:ASP:H	18	0.15
(1,41)	1:A:96:ARG:H	1:A:97:CYS:H	9	0.15
(1,41)	1:A:96:ARG:H	1:A:97:CYS:H	16	0.15
(1,409)	1:A:60:PRO:HA	1:A:61:VAL:H	2	0.15
(1,409)	1:A:60:PRO:HA	1:A:61:VAL:H	7	0.15
(1,409)	1:A:60:PRO:HA	1:A:61:VAL:H	16	0.15
(1,399)	1:A:54:HIS:H	1:A:53:ALA:HB1	5	0.15
(1,399)	1:A:54:HIS:H	1:A:53:ALA:HB2	5	0.15
(1,399)	1:A:54:HIS:H	1:A:53:ALA:HB3	5	0.15
(1,390)	1:A:51:CYS:HB2	1:A:52:GLY:H	19	0.15
(1,390)	1:A:51:CYS:HB3	1:A:52:GLY:H	19	0.15
(1,386)	1:A:51:CYS:HB2	1:A:51:CYS:H	4	0.15
(1,386)	1:A:51:CYS:HB3	1:A:51:CYS:H	4	0.15
(1,383)	1:A:51:CYS:H	1:A:50:SER:HA	20	0.15

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,378)	1:A:48:GLU:HG2	1:A:49:ILE:H	5	0.15
(1,378)	1:A:48:GLU:HG3	1:A:49:ILE:H	5	0.15
(1,369)	1:A:43:THR:HB	1:A:44:CYS:H	6	0.15
(1,369)	1:A:43:THR:HB	1:A:44:CYS:H	11	0.15
(1,359)	1:A:40:HIS:H	1:A:40:HIS:HB2	2	0.15
(1,359)	1:A:40:HIS:H	1:A:40:HIS:HB3	2	0.15
(1,359)	1:A:40:HIS:H	1:A:40:HIS:HB2	3	0.15
(1,359)	1:A:40:HIS:H	1:A:40:HIS:HB3	3	0.15
(1,359)	1:A:40:HIS:H	1:A:40:HIS:HB2	13	0.15
(1,359)	1:A:40:HIS:H	1:A:40:HIS:HB3	13	0.15
(1,357)	1:A:40:HIS:H	1:A:39:CYS:HA	4	0.15
(1,350)	1:A:31:GLY:H	1:A:32:SER:H	7	0.15
(1,346)	1:A:32:SER:H	1:A:31:GLY:H	5	0.15
(1,343)	1:A:28:CYS:HB2	1:A:28:CYS:H	15	0.15
(1,343)	1:A:28:CYS:HB3	1:A:28:CYS:H	15	0.15
(1,33)	1:A:115:ASP:H	1:A:114:SER:H	6	0.15
(1,329)	1:A:25:ASP:H	1:A:23:ASP:H	7	0.15
(1,320)	1:A:7:ASP:HA	1:A:18:SER:H	18	0.15
(1,313)	1:A:14:GLN:HG2	1:A:14:GLN:H	11	0.15
(1,313)	1:A:14:GLN:HG3	1:A:14:GLN:H	11	0.15
(1,302)	1:A:14:GLN:H	1:A:12:ASN:H	10	0.15
(1,293)	1:A:8:PHE:HB2	1:A:9:VAL:H	7	0.15
(1,293)	1:A:8:PHE:HB3	1:A:9:VAL:H	7	0.15
(1,290)	1:A:8:PHE:HA	1:A:9:VAL:H	2	0.15
(1,28)	1:A:118:ASP:H	1:A:117:LEU:H	12	0.15
(1,279)	1:A:6:SER:HB2	1:A:6:SER:H	6	0.15
(1,279)	1:A:6:SER:HB3	1:A:6:SER:H	6	0.15
(1,277)	1:A:6:SER:HB2	1:A:6:SER:H	6	0.15
(1,277)	1:A:6:SER:HB3	1:A:6:SER:H	6	0.15
(1,257)	1:A:82:ASN:HB2	1:A:82:ASN:H	1	0.15
(1,257)	1:A:82:ASN:HB2	1:A:82:ASN:H	1	0.15
(1,257)	1:A:82:ASN:HB3	1:A:82:ASN:H	1	0.15
(1,257)	1:A:82:ASN:HB3	1:A:82:ASN:H	1	0.15
(1,257)	1:A:82:ASN:HB2	1:A:82:ASN:H	2	0.15
(1,257)	1:A:82:ASN:HB2	1:A:82:ASN:H	2	0.15
(1,257)	1:A:82:ASN:HB3	1:A:82:ASN:H	2	0.15
(1,257)	1:A:82:ASN:HB3	1:A:82:ASN:H	2	0.15
(1,257)	1:A:82:ASN:HB2	1:A:82:ASN:H	3	0.15
(1,257)	1:A:82:ASN:HB2	1:A:82:ASN:H	3	0.15
(1,257)	1:A:82:ASN:HB3	1:A:82:ASN:H	3	0.15
(1,257)	1:A:82:ASN:HB3	1:A:82:ASN:H	3	0.15
(1,257)	1:A:82:ASN:HB2	1:A:82:ASN:H	15	0.15

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,257)	1:A:82:ASN:HB2	1:A:82:ASN:H	15	0.15
(1,257)	1:A:82:ASN:HB3	1:A:82:ASN:H	15	0.15
(1,257)	1:A:82:ASN:HB3	1:A:82:ASN:H	15	0.15
(1,248)	1:A:83:ILE:HB	1:A:84:THR:H	3	0.15
(1,241)	1:A:86:SER:H	1:A:89:GLU:H	8	0.15
(1,240)	1:A:90:PHE:H	1:A:98:ILE:HD11	1	0.15
(1,240)	1:A:90:PHE:H	1:A:98:ILE:HD12	1	0.15
(1,240)	1:A:90:PHE:H	1:A:98:ILE:HD13	1	0.15
(1,240)	1:A:90:PHE:H	1:A:98:ILE:HD11	14	0.15
(1,240)	1:A:90:PHE:H	1:A:98:ILE:HD12	14	0.15
(1,240)	1:A:90:PHE:H	1:A:98:ILE:HD13	14	0.15
(1,240)	1:A:90:PHE:H	1:A:98:ILE:HD11	17	0.15
(1,240)	1:A:90:PHE:H	1:A:98:ILE:HD12	17	0.15
(1,240)	1:A:90:PHE:H	1:A:98:ILE:HD13	17	0.15
(1,240)	1:A:90:PHE:H	1:A:98:ILE:HD11	20	0.15
(1,240)	1:A:90:PHE:H	1:A:98:ILE:HD12	20	0.15
(1,240)	1:A:90:PHE:H	1:A:98:ILE:HD13	20	0.15
(1,228)	1:A:92:CYS:HB2	1:A:93:SER:H	3	0.15
(1,228)	1:A:92:CYS:HB3	1:A:93:SER:H	3	0.15
(1,226)	1:A:92:CYS:HB2	1:A:94:SER:H	11	0.15
(1,226)	1:A:92:CYS:HB3	1:A:94:SER:H	11	0.15
(1,215)	1:A:96:ARG:H	1:A:92:CYS:HB2	17	0.15
(1,215)	1:A:96:ARG:H	1:A:92:CYS:HB3	17	0.15
(1,190)	1:A:101:ASN:HB2	1:A:101:ASN:H	8	0.15
(1,190)	1:A:101:ASN:HB3	1:A:101:ASN:H	8	0.15
(1,190)	1:A:101:ASN:HB2	1:A:101:ASN:H	19	0.15
(1,190)	1:A:101:ASN:HB3	1:A:101:ASN:H	19	0.15
(1,184)	1:A:103:VAL:HB	1:A:102:PHE:H	9	0.15
(1,180)	1:A:99:SER:HB2	1:A:102:PHE:H	19	0.15
(1,180)	1:A:99:SER:HB3	1:A:102:PHE:H	19	0.15
(1,134)	1:A:110:CYS:H	1:A:109:ASP:HB2	6	0.15
(1,134)	1:A:110:CYS:H	1:A:109:ASP:HB2	6	0.15
(1,134)	1:A:110:CYS:H	1:A:109:ASP:HB3	6	0.15
(1,134)	1:A:110:CYS:H	1:A:109:ASP:HB3	6	0.15
(1,128)	1:A:114:SER:HA	1:A:114:SER:H	7	0.15
(1,128)	1:A:114:SER:HA	1:A:114:SER:H	12	0.15
(1,128)	1:A:114:SER:HA	1:A:114:SER:H	18	0.15
(1,127)	1:A:114:SER:H	1:A:114:SER:HB2	7	0.15
(1,127)	1:A:114:SER:H	1:A:114:SER:HB3	7	0.15
(1,125)	1:A:114:SER:H	1:A:113:GLY:HA2	12	0.15
(1,125)	1:A:114:SER:H	1:A:113:GLY:HA3	12	0.15
(1,125)	1:A:114:SER:H	1:A:113:GLY:HA2	20	0.15

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,125)	1:A:114:SER:H	1:A:113:GLY:HA3	20	0.15
(1,123)	1:A:115:ASP:HB2	1:A:115:ASP:H	14	0.15
(1,123)	1:A:115:ASP:HB3	1:A:115:ASP:H	14	0.15
(1,12)	1:A:34:GLU:H	1:A:33:ASP:H	3	0.15
(1,109)	1:A:119:CYS:H	1:A:117:LEU:HG	12	0.15
(1,1)	1:A:112:ASP:H	1:A:113:GLY:H	5	0.15
(4,5)	1:A:49:ILE:O	1:A:59:ILE:H	13	0.14
(4,3)	1:A:92:CYS:H	1:A:96:ARG:O	8	0.14
(3,7)	2:A:202:CA:CA	1:A:63:TRP:O	6	0.14
(3,7)	2:A:202:CA:CA	1:A:63:TRP:O	14	0.14
(3,7)	2:A:202:CA:CA	1:A:63:TRP:O	18	0.14
(2,97)	1:A:20:TRP:HB2	1:A:20:TRP:H	14	0.14
(2,97)	1:A:20:TRP:HB3	1:A:20:TRP:H	14	0.14
(2,97)	1:A:21:LYS:HA	1:A:20:TRP:H	14	0.14
(2,94)	1:A:108:ASP:HB2	1:A:109:ASP:H	2	0.14
(2,94)	1:A:108:ASP:HB3	1:A:109:ASP:H	2	0.14
(2,94)	1:A:115:ASP:HB2	1:A:109:ASP:H	2	0.14
(2,94)	1:A:115:ASP:HB3	1:A:109:ASP:H	2	0.14
(2,89)	1:A:107:GLN:HB2	1:A:108:ASP:H	13	0.14
(2,89)	1:A:107:GLN:HB3	1:A:108:ASP:H	13	0.14
(2,89)	1:A:107:GLN:HB2	1:A:108:ASP:H	20	0.14
(2,89)	1:A:107:GLN:HB3	1:A:108:ASP:H	20	0.14
(2,8)	1:A:24:GLY:HA2	1:A:46:ILE:H	14	0.14
(2,8)	1:A:24:GLY:HA3	1:A:46:ILE:H	14	0.14
(2,8)	1:A:45:ARG:HA	1:A:46:ILE:H	14	0.14
(2,8)	1:A:24:GLY:HA2	1:A:46:ILE:H	15	0.14
(2,8)	1:A:24:GLY:HA3	1:A:46:ILE:H	15	0.14
(2,8)	1:A:45:ARG:HA	1:A:46:ILE:H	15	0.14
(2,72)	1:A:110:CYS:HB2	1:A:113:GLY:H	15	0.14
(2,72)	1:A:110:CYS:HB3	1:A:113:GLY:H	15	0.14
(2,72)	1:A:112:ASP:HB2	1:A:113:GLY:H	15	0.14
(2,72)	1:A:112:ASP:HB3	1:A:113:GLY:H	15	0.14
(2,66)	1:A:4:ALA:H	1:A:7:ASP:H	3	0.14
(2,66)	1:A:5:GLU:H	1:A:7:ASP:H	3	0.14
(2,66)	1:A:4:ALA:H	1:A:7:ASP:H	18	0.14
(2,66)	1:A:5:GLU:H	1:A:7:ASP:H	18	0.14
(2,388)	1:A:64:ARG:HD2	1:A:68:GLU:H	9	0.14
(2,388)	1:A:64:ARG:HD3	1:A:68:GLU:H	9	0.14
(2,388)	1:A:66:ASP:HB2	1:A:68:GLU:H	9	0.14
(2,388)	1:A:66:ASP:HB3	1:A:68:GLU:H	9	0.14
(2,382)	1:A:72:ASP:HB2	1:A:73:SER:H	8	0.14
(2,382)	1:A:72:ASP:HB3	1:A:73:SER:H	8	0.14

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,382)	1:A:72:ASP:HB2	1:A:73:SER:H	16	0.14
(2,382)	1:A:72:ASP:HB3	1:A:73:SER:H	16	0.14
(2,382)	1:A:72:ASP:HB2	1:A:73:SER:H	18	0.14
(2,382)	1:A:72:ASP:HB3	1:A:73:SER:H	18	0.14
(2,382)	1:A:72:ASP:HB2	1:A:73:SER:H	20	0.14
(2,382)	1:A:72:ASP:HB3	1:A:73:SER:H	20	0.14
(2,376)	1:A:61:VAL:HB	1:A:88:ASP:H	7	0.14
(2,376)	1:A:62:SER:H	1:A:88:ASP:H	7	0.14
(2,376)	1:A:87:PRO:HB2	1:A:88:ASP:H	7	0.14
(2,376)	1:A:87:PRO:HB3	1:A:88:ASP:H	7	0.14
(2,375)	1:A:48:GLU:HB2	1:A:61:VAL:H	3	0.14
(2,375)	1:A:48:GLU:HB3	1:A:61:VAL:H	3	0.14
(2,375)	1:A:60:PRO:HD3	1:A:61:VAL:H	3	0.14
(2,374)	1:A:20:TRP:HA	1:A:23:ASP:H	6	0.14
(2,374)	1:A:25:ASP:HA	1:A:23:ASP:H	6	0.14
(2,365)	1:A:69:ASN:HA	1:A:70:ASP:H	13	0.14
(2,365)	1:A:70:ASP:HA	1:A:70:ASP:H	13	0.14
(2,365)	1:A:69:ASN:HA	1:A:70:ASP:H	15	0.14
(2,365)	1:A:70:ASP:HA	1:A:70:ASP:H	15	0.14
(2,349)	1:A:99:SER:HB2	1:A:101:ASN:H	17	0.14
(2,349)	1:A:99:SER:HB3	1:A:101:ASN:H	17	0.14
(2,349)	1:A:102:PHE:HB2	1:A:101:ASN:H	17	0.14
(2,349)	1:A:102:PHE:HB3	1:A:101:ASN:H	17	0.14
(2,348)	1:A:35:SER:HB2	1:A:35:SER:H	12	0.14
(2,348)	1:A:35:SER:HB3	1:A:35:SER:H	12	0.14
(2,348)	1:A:36:PRO:HA	1:A:35:SER:H	12	0.14
(2,347)	1:A:18:SER:HA	1:A:18:SER:H	12	0.14
(2,347)	1:A:18:SER:HB2	1:A:18:SER:H	12	0.14
(2,347)	1:A:18:SER:HB3	1:A:18:SER:H	12	0.14
(2,342)	1:A:17:PRO:HB2	1:A:20:TRP:HE1	6	0.14
(2,342)	1:A:17:PRO:HB3	1:A:20:TRP:HE1	6	0.14
(2,342)	1:A:19:ARG:HB2	1:A:20:TRP:HE1	6	0.14
(2,342)	1:A:19:ARG:HB3	1:A:20:TRP:HE1	6	0.14
(2,339)	1:A:9:VAL:HG11	1:A:13:GLY:H	14	0.14
(2,339)	1:A:9:VAL:HG12	1:A:13:GLY:H	14	0.14
(2,339)	1:A:9:VAL:HG13	1:A:13:GLY:H	14	0.14
(2,339)	1:A:9:VAL:HG21	1:A:13:GLY:H	14	0.14
(2,339)	1:A:9:VAL:HG22	1:A:13:GLY:H	14	0.14
(2,339)	1:A:9:VAL:HG23	1:A:13:GLY:H	14	0.14
(2,339)	1:A:9:VAL:HG11	1:A:13:GLY:H	15	0.14
(2,339)	1:A:9:VAL:HG12	1:A:13:GLY:H	15	0.14
(2,339)	1:A:9:VAL:HG13	1:A:13:GLY:H	15	0.14

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,339)	1:A:9:VAL:HG21	1:A:13:GLY:H	15	0.14
(2,339)	1:A:9:VAL:HG22	1:A:13:GLY:H	15	0.14
(2,339)	1:A:9:VAL:HG23	1:A:13:GLY:H	15	0.14
(2,331)	1:A:2:THR:H	1:A:99:SER:H	9	0.14
(2,331)	1:A:3:CYS:H	1:A:99:SER:H	9	0.14
(2,331)	1:A:80:CYS:H	1:A:99:SER:H	9	0.14
(2,331)	1:A:81:GLY:H	1:A:99:SER:H	9	0.14
(2,331)	1:A:101:ASN:H	1:A:99:SER:H	9	0.14
(2,327)	1:A:64:ARG:HG2	1:A:71:CYS:H	19	0.14
(2,327)	1:A:64:ARG:HG3	1:A:71:CYS:H	19	0.14
(2,327)	1:A:68:GLU:HG2	1:A:71:CYS:H	19	0.14
(2,327)	1:A:68:GLU:HG3	1:A:71:CYS:H	19	0.14
(2,323)	1:A:64:ARG:HG2	1:A:68:GLU:H	12	0.14
(2,323)	1:A:64:ARG:HG3	1:A:68:GLU:H	12	0.14
(2,323)	1:A:68:GLU:HG3	1:A:68:GLU:H	12	0.14
(2,305)	1:A:72:ASP:HB2	1:A:72:ASP:H	19	0.14
(2,305)	1:A:72:ASP:HB3	1:A:72:ASP:H	19	0.14
(2,305)	1:A:72:ASP:HB3	1:A:72:ASP:H	19	0.14
(2,305)	1:A:76:ASP:HB2	1:A:72:ASP:H	19	0.14
(2,305)	1:A:76:ASP:HB2	1:A:72:ASP:H	19	0.14
(2,305)	1:A:76:ASP:HB3	1:A:72:ASP:H	19	0.14
(2,3)	1:A:49:ILE:HD11	1:A:49:ILE:H	14	0.14
(2,3)	1:A:49:ILE:HD12	1:A:49:ILE:H	14	0.14
(2,3)	1:A:49:ILE:HD13	1:A:49:ILE:H	14	0.14
(2,3)	1:A:49:ILE:HG12	1:A:49:ILE:H	14	0.14
(2,3)	1:A:49:ILE:HG13	1:A:49:ILE:H	14	0.14
(2,3)	1:A:49:ILE:HG21	1:A:49:ILE:H	14	0.14
(2,3)	1:A:49:ILE:HG22	1:A:49:ILE:H	14	0.14
(2,3)	1:A:49:ILE:HG23	1:A:49:ILE:H	14	0.14
(2,3)	1:A:59:ILE:HD11	1:A:49:ILE:H	14	0.14
(2,3)	1:A:59:ILE:HD12	1:A:49:ILE:H	14	0.14
(2,3)	1:A:59:ILE:HD13	1:A:49:ILE:H	14	0.14
(2,3)	1:A:59:ILE:HG21	1:A:49:ILE:H	14	0.14
(2,3)	1:A:59:ILE:HG22	1:A:49:ILE:H	14	0.14
(2,3)	1:A:59:ILE:HG23	1:A:49:ILE:H	14	0.14
(2,3)	1:A:61:VAL:HG11	1:A:49:ILE:H	14	0.14
(2,3)	1:A:61:VAL:HG12	1:A:49:ILE:H	14	0.14
(2,3)	1:A:61:VAL:HG13	1:A:49:ILE:H	14	0.14
(2,3)	1:A:61:VAL:HG21	1:A:49:ILE:H	14	0.14
(2,3)	1:A:61:VAL:HG21	1:A:49:ILE:H	14	0.14
(2,3)	1:A:61:VAL:HG22	1:A:49:ILE:H	14	0.14
(2,3)	1:A:61:VAL:HG22	1:A:49:ILE:H	14	0.14

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,3)	1:A:61:VAL:HG23	1:A:49:ILE:H	14	0.14
(2,3)	1:A:61:VAL:HG23	1:A:49:ILE:H	14	0.14
(2,296)	1:A:113:GLY:HA2	1:A:117:LEU:H	12	0.14
(2,296)	1:A:113:GLY:HA3	1:A:117:LEU:H	12	0.14
(2,296)	1:A:114:SER:HB2	1:A:117:LEU:H	12	0.14
(2,296)	1:A:114:SER:HB3	1:A:117:LEU:H	12	0.14
(2,296)	1:A:113:GLY:HA2	1:A:117:LEU:H	17	0.14
(2,296)	1:A:113:GLY:HA3	1:A:117:LEU:H	17	0.14
(2,296)	1:A:114:SER:HB2	1:A:117:LEU:H	17	0.14
(2,296)	1:A:114:SER:HB3	1:A:117:LEU:H	17	0.14
(2,296)	1:A:113:GLY:HA2	1:A:117:LEU:H	19	0.14
(2,296)	1:A:113:GLY:HA3	1:A:117:LEU:H	19	0.14
(2,296)	1:A:114:SER:HB2	1:A:117:LEU:H	19	0.14
(2,296)	1:A:114:SER:HB3	1:A:117:LEU:H	19	0.14
(2,295)	1:A:10:CYS:HA	1:A:38:GLN:HE21	7	0.14
(2,295)	1:A:38:GLN:HA	1:A:38:GLN:HE21	7	0.14
(2,295)	1:A:10:CYS:HA	1:A:38:GLN:HE21	17	0.14
(2,295)	1:A:38:GLN:HA	1:A:38:GLN:HE21	17	0.14
(2,295)	1:A:10:CYS:HA	1:A:38:GLN:HE21	20	0.14
(2,295)	1:A:38:GLN:HA	1:A:38:GLN:HE21	20	0.14
(2,293)	1:A:18:SER:HA	1:A:8:PHE:H	4	0.14
(2,293)	1:A:18:SER:HB2	1:A:8:PHE:H	4	0.14
(2,293)	1:A:18:SER:HB3	1:A:8:PHE:H	4	0.14
(2,293)	1:A:18:SER:HA	1:A:8:PHE:H	11	0.14
(2,293)	1:A:18:SER:HB2	1:A:8:PHE:H	11	0.14
(2,293)	1:A:18:SER:HB3	1:A:8:PHE:H	11	0.14
(2,266)	1:A:31:GLY:HA2	1:A:32:SER:H	14	0.14
(2,266)	1:A:31:GLY:HA3	1:A:32:SER:H	14	0.14
(2,266)	1:A:32:SER:HB2	1:A:32:SER:H	14	0.14
(2,266)	1:A:32:SER:HB3	1:A:32:SER:H	14	0.14
(2,261)	1:A:110:CYS:HB2	1:A:110:CYS:H	14	0.14
(2,261)	1:A:110:CYS:HB3	1:A:110:CYS:H	14	0.14
(2,261)	1:A:111:SER:HB2	1:A:110:CYS:H	14	0.14
(2,261)	1:A:113:GLY:HA2	1:A:110:CYS:H	14	0.14
(2,261)	1:A:113:GLY:HA3	1:A:110:CYS:H	14	0.14
(2,236)	1:A:19:ARG:HB2	1:A:21:LYS:H	9	0.14
(2,236)	1:A:19:ARG:HB3	1:A:21:LYS:H	9	0.14
(2,236)	1:A:21:LYS:HB2	1:A:21:LYS:H	9	0.14
(2,236)	1:A:21:LYS:HB3	1:A:21:LYS:H	9	0.14
(2,236)	1:A:19:ARG:HB2	1:A:21:LYS:H	10	0.14
(2,236)	1:A:19:ARG:HB3	1:A:21:LYS:H	10	0.14
(2,236)	1:A:21:LYS:HB2	1:A:21:LYS:H	10	0.14

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,236)	1:A:21:LYS:HB3	1:A:21:LYS:H	10	0.14
(2,233)	1:A:14:GLN:HB2	1:A:14:GLN:HE22	1	0.14
(2,233)	1:A:14:GLN:HB3	1:A:14:GLN:HE22	1	0.14
(2,233)	1:A:14:GLN:HB2	1:A:14:GLN:HE22	15	0.14
(2,233)	1:A:14:GLN:HB3	1:A:14:GLN:HE22	15	0.14
(2,233)	1:A:14:GLN:HB2	1:A:14:GLN:HE22	19	0.14
(2,233)	1:A:14:GLN:HB3	1:A:14:GLN:HE22	19	0.14
(2,22)	1:A:75:GLU:HA	1:A:78:GLU:H	12	0.14
(2,22)	1:A:87:PRO:HD2	1:A:78:GLU:H	12	0.14
(2,209)	1:A:28:CYS:HB2	1:A:31:GLY:H	11	0.14
(2,209)	1:A:28:CYS:HB3	1:A:31:GLY:H	11	0.14
(2,209)	1:A:29:GLU:HA	1:A:31:GLY:H	11	0.14
(2,209)	1:A:32:SER:HA	1:A:31:GLY:H	11	0.14
(2,209)	1:A:32:SER:HB2	1:A:31:GLY:H	11	0.14
(2,209)	1:A:32:SER:HB3	1:A:31:GLY:H	11	0.14
(2,209)	1:A:28:CYS:HB2	1:A:31:GLY:H	20	0.14
(2,209)	1:A:28:CYS:HB3	1:A:31:GLY:H	20	0.14
(2,209)	1:A:29:GLU:HA	1:A:31:GLY:H	20	0.14
(2,209)	1:A:32:SER:HA	1:A:31:GLY:H	20	0.14
(2,209)	1:A:32:SER:HB2	1:A:31:GLY:H	20	0.14
(2,209)	1:A:32:SER:HB3	1:A:31:GLY:H	20	0.14
(2,195)	1:A:3:CYS:HB2	1:A:18:SER:H	16	0.14
(2,195)	1:A:3:CYS:HB3	1:A:18:SER:H	16	0.14
(2,195)	1:A:7:ASP:HB2	1:A:18:SER:H	16	0.14
(2,195)	1:A:7:ASP:HB3	1:A:18:SER:H	16	0.14
(2,188)	1:A:16:VAL:HG11	1:A:19:ARG:H	18	0.14
(2,188)	1:A:16:VAL:HG12	1:A:19:ARG:H	18	0.14
(2,188)	1:A:16:VAL:HG13	1:A:19:ARG:H	18	0.14
(2,188)	1:A:16:VAL:HG21	1:A:19:ARG:H	18	0.14
(2,188)	1:A:16:VAL:HG22	1:A:19:ARG:H	18	0.14
(2,188)	1:A:16:VAL:HG23	1:A:19:ARG:H	18	0.14
(2,179)	1:A:9:VAL:HG11	1:A:10:CYS:H	18	0.14
(2,179)	1:A:9:VAL:HG12	1:A:10:CYS:H	18	0.14
(2,179)	1:A:9:VAL:HG13	1:A:10:CYS:H	18	0.14
(2,179)	1:A:9:VAL:HG21	1:A:10:CYS:H	18	0.14
(2,179)	1:A:9:VAL:HG22	1:A:10:CYS:H	18	0.14
(2,179)	1:A:9:VAL:HG23	1:A:10:CYS:H	18	0.14
(2,176)	1:A:99:SER:HG	1:A:101:ASN:HD21	5	0.14
(2,176)	1:A:102:PHE:HA	1:A:101:ASN:HD21	5	0.14
(2,164)	1:A:14:GLN:HB2	1:A:14:GLN:H	11	0.14
(2,164)	1:A:14:GLN:HB3	1:A:14:GLN:H	11	0.14
(2,160)	1:A:43:THR:HG1	1:A:43:THR:H	18	0.14

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,160)	1:A:43:THR:HG1	1:A:43:THR:H	18	0.14
(2,160)	1:A:43:THR:HG21	1:A:43:THR:H	18	0.14
(2,160)	1:A:43:THR:HG21	1:A:43:THR:H	18	0.14
(2,160)	1:A:43:THR:HG22	1:A:43:THR:H	18	0.14
(2,160)	1:A:43:THR:HG22	1:A:43:THR:H	18	0.14
(2,160)	1:A:43:THR:HG23	1:A:43:THR:H	18	0.14
(2,160)	1:A:43:THR:HG23	1:A:43:THR:H	18	0.14
(2,160)	1:A:56:THR:HG1	1:A:43:THR:H	18	0.14
(2,160)	1:A:56:THR:HG21	1:A:43:THR:H	18	0.14
(2,160)	1:A:56:THR:HG22	1:A:43:THR:H	18	0.14
(2,160)	1:A:56:THR:HG23	1:A:43:THR:H	18	0.14
(2,149)	1:A:49:ILE:HG21	1:A:59:ILE:H	19	0.14
(2,149)	1:A:49:ILE:HG22	1:A:59:ILE:H	19	0.14
(2,149)	1:A:49:ILE:HG23	1:A:59:ILE:H	19	0.14
(2,149)	1:A:59:ILE:HD11	1:A:59:ILE:H	19	0.14
(2,149)	1:A:59:ILE:HD12	1:A:59:ILE:H	19	0.14
(2,149)	1:A:59:ILE:HD13	1:A:59:ILE:H	19	0.14
(2,149)	1:A:59:ILE:HG21	1:A:59:ILE:H	19	0.14
(2,149)	1:A:59:ILE:HG22	1:A:59:ILE:H	19	0.14
(2,149)	1:A:59:ILE:HG23	1:A:59:ILE:H	19	0.14
(2,135)	1:A:79:ASN:HB2	1:A:79:ASN:HD21	8	0.14
(2,135)	1:A:97:CYS:HB2	1:A:79:ASN:HD21	8	0.14
(2,133)	1:A:78:GLU:HG2	1:A:79:ASN:HD22	10	0.14
(2,133)	1:A:78:GLU:HG3	1:A:79:ASN:HD22	10	0.14
(2,133)	1:A:89:GLU:HB2	1:A:79:ASN:HD22	10	0.14
(2,133)	1:A:89:GLU:HB3	1:A:79:ASN:HD22	10	0.14
(2,13)	1:A:110:CYS:HB2	1:A:113:GLY:H	5	0.14
(2,13)	1:A:110:CYS:HB3	1:A:113:GLY:H	5	0.14
(2,13)	1:A:111:SER:HB2	1:A:113:GLY:H	5	0.14
(2,13)	1:A:111:SER:HB3	1:A:113:GLY:H	5	0.14
(2,13)	1:A:113:GLY:HA2	1:A:113:GLY:H	5	0.14
(2,13)	1:A:113:GLY:HA3	1:A:113:GLY:H	5	0.14
(2,121)	1:A:93:SER:HB2	1:A:93:SER:H	6	0.14
(2,121)	1:A:93:SER:HB3	1:A:93:SER:H	6	0.14
(2,121)	1:A:94:SER:HB3	1:A:93:SER:H	6	0.14
(2,110)	1:A:17:PRO:HB2	1:A:19:ARG:H	2	0.14
(2,110)	1:A:17:PRO:HB3	1:A:19:ARG:H	2	0.14
(2,110)	1:A:19:ARG:HB2	1:A:19:ARG:H	2	0.14
(2,110)	1:A:19:ARG:HB3	1:A:19:ARG:H	2	0.14
(2,110)	1:A:17:PRO:HB2	1:A:19:ARG:H	6	0.14
(2,110)	1:A:17:PRO:HB3	1:A:19:ARG:H	6	0.14
(2,110)	1:A:19:ARG:HB2	1:A:19:ARG:H	6	0.14

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,110)	1:A:19:ARG:HB3	1:A:19:ARG:H	6	0.14
(2,110)	1:A:17:PRO:HB2	1:A:19:ARG:H	11	0.14
(2,110)	1:A:17:PRO:HB3	1:A:19:ARG:H	11	0.14
(2,110)	1:A:19:ARG:HB2	1:A:19:ARG:H	11	0.14
(2,110)	1:A:19:ARG:HB3	1:A:19:ARG:H	11	0.14
(1,96)	1:A:100:ARG:H	1:A:89:GLU:HA	1	0.14
(1,94)	1:A:120:ALA:H	1:A:119:CYS:HB2	8	0.14
(1,94)	1:A:120:ALA:H	1:A:119:CYS:HB3	8	0.14
(1,931)	1:A:99:SER:HB2	1:A:102:PHE:HD1	9	0.14
(1,931)	1:A:99:SER:HB2	1:A:102:PHE:HD2	9	0.14
(1,931)	1:A:99:SER:HB3	1:A:102:PHE:HD1	9	0.14
(1,931)	1:A:99:SER:HB3	1:A:102:PHE:HD2	9	0.14
(1,930)	1:A:102:PHE:HE2	1:A:107:GLN:HG2	10	0.14
(1,926)	1:A:16:VAL:HG11	1:A:20:TRP:HZ3	16	0.14
(1,926)	1:A:16:VAL:HG12	1:A:20:TRP:HZ3	16	0.14
(1,926)	1:A:16:VAL:HG13	1:A:20:TRP:HZ3	16	0.14
(1,924)	1:A:8:PHE:HB2	1:A:16:VAL:HG11	19	0.14
(1,924)	1:A:8:PHE:HB2	1:A:16:VAL:HG12	19	0.14
(1,924)	1:A:8:PHE:HB2	1:A:16:VAL:HG13	19	0.14
(1,924)	1:A:8:PHE:HB2	1:A:16:VAL:HG21	19	0.14
(1,924)	1:A:8:PHE:HB2	1:A:16:VAL:HG22	19	0.14
(1,924)	1:A:8:PHE:HB2	1:A:16:VAL:HG23	19	0.14
(1,907)	1:A:39:CYS:H	1:A:41:MET:H	10	0.14
(1,902)	1:A:94:SER:HB2	1:A:82:ASN:HD21	19	0.14
(1,902)	1:A:94:SER:HB3	1:A:82:ASN:HD21	19	0.14
(1,897)	1:A:77:GLU:HB2	1:A:69:ASN:HD22	14	0.14
(1,897)	1:A:77:GLU:HB3	1:A:69:ASN:HD22	14	0.14
(1,895)	1:A:77:GLU:HG2	1:A:66:ASP:H	12	0.14
(1,895)	1:A:77:GLU:HG3	1:A:66:ASP:H	12	0.14
(1,894)	1:A:66:ASP:H	1:A:77:GLU:HG2	12	0.14
(1,894)	1:A:66:ASP:H	1:A:77:GLU:HG3	12	0.14
(1,891)	1:A:64:ARG:H	1:A:80:CYS:HB2	14	0.14
(1,891)	1:A:64:ARG:H	1:A:80:CYS:HB3	14	0.14
(1,886)	1:A:51:CYS:H	1:A:58:CYS:H	3	0.14
(1,884)	1:A:50:SER:H	1:A:59:ILE:H	4	0.14
(1,882)	1:A:58:CYS:HA	1:A:50:SER:H	19	0.14
(1,876)	1:A:39:CYS:HB2	1:A:43:THR:H	19	0.14
(1,876)	1:A:39:CYS:HB3	1:A:43:THR:H	19	0.14
(1,872)	1:A:32:SER:H	1:A:33:ASP:HB2	11	0.14
(1,872)	1:A:32:SER:H	1:A:33:ASP:HB3	11	0.14
(1,869)	1:A:14:GLN:HE22	1:A:28:CYS:H	5	0.14
(1,869)	1:A:14:GLN:HE22	1:A:28:CYS:H	9	0.14

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,869)	1:A:14:GLN:HE22	1:A:28:CYS:H	15	0.14
(1,863)	1:A:17:PRO:HD2	1:A:20:TRP:HE1	2	0.14
(1,863)	1:A:17:PRO:HD3	1:A:20:TRP:HE1	2	0.14
(1,844)	1:A:79:ASN:HB2	1:A:92:CYS:H	3	0.14
(1,844)	1:A:79:ASN:HB3	1:A:92:CYS:H	3	0.14
(1,842)	1:A:80:CYS:HA	1:A:84:THR:H	7	0.14
(1,842)	1:A:80:CYS:HA	1:A:84:THR:H	12	0.14
(1,84)	1:A:14:GLN:HG2	1:A:29:GLU:H	13	0.14
(1,84)	1:A:14:GLN:HG3	1:A:29:GLU:H	13	0.14
(1,838)	1:A:58:CYS:HA	1:A:52:GLY:H	2	0.14
(1,832)	1:A:35:SER:H	1:A:38:GLN:H	8	0.14
(1,832)	1:A:35:SER:H	1:A:38:GLN:H	12	0.14
(1,832)	1:A:35:SER:H	1:A:38:GLN:H	20	0.14
(1,828)	1:A:85:CYS:HA	1:A:86:SER:H	20	0.14
(1,826)	1:A:114:SER:H	1:A:117:LEU:H	5	0.14
(1,810)	1:A:101:ASN:HD21	1:A:105:ASN:HD22	3	0.14
(1,809)	1:A:106:GLY:H	1:A:104:CYS:H	13	0.14
(1,803)	1:A:101:ASN:HD21	1:A:99:SER:H	9	0.14
(1,803)	1:A:101:ASN:HD21	1:A:99:SER:H	18	0.14
(1,800)	1:A:85:CYS:HB2	1:A:98:ILE:H	13	0.14
(1,800)	1:A:85:CYS:HB3	1:A:98:ILE:H	13	0.14
(1,799)	1:A:85:CYS:HA	1:A:97:CYS:H	12	0.14
(1,796)	1:A:96:ARG:H	1:A:83:ILE:HG21	8	0.14
(1,796)	1:A:96:ARG:H	1:A:83:ILE:HG22	8	0.14
(1,796)	1:A:96:ARG:H	1:A:83:ILE:HG23	8	0.14
(1,786)	1:A:71:CYS:H	1:A:76:ASP:H	18	0.14
(1,781)	1:A:73:SER:H	1:A:71:CYS:HB2	9	0.14
(1,781)	1:A:73:SER:H	1:A:71:CYS:HB3	9	0.14
(1,781)	1:A:73:SER:H	1:A:71:CYS:HB2	19	0.14
(1,781)	1:A:73:SER:H	1:A:71:CYS:HB3	19	0.14
(1,780)	1:A:72:ASP:H	1:A:57:GLN:HE22	20	0.14
(1,753)	1:A:51:CYS:H	1:A:57:GLN:H	10	0.14
(1,749)	1:A:51:CYS:H	1:A:57:GLN:H	10	0.14
(1,745)	1:A:48:GLU:HB2	1:A:49:ILE:H	18	0.14
(1,745)	1:A:48:GLU:HB3	1:A:49:ILE:H	18	0.14
(1,734)	1:A:32:SER:H	1:A:11:ASN:H	10	0.14
(1,712)	1:A:32:SER:H	1:A:11:ASN:H	10	0.14
(1,7)	1:A:22:CYS:H	1:A:23:ASP:H	4	0.14
(1,7)	1:A:22:CYS:H	1:A:23:ASP:H	18	0.14
(1,698)	1:A:64:ARG:H	1:A:64:ARG:HG2	6	0.14
(1,698)	1:A:64:ARG:H	1:A:64:ARG:HG3	6	0.14
(1,698)	1:A:64:ARG:H	1:A:64:ARG:HG2	20	0.14

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,698)	1:A:64:ARG:H	1:A:64:ARG:HG3	20	0.14
(1,682)	1:A:79:ASN:HD22	1:A:87:PRO:HD2	4	0.14
(1,682)	1:A:79:ASN:HD22	1:A:87:PRO:HD3	4	0.14
(1,680)	1:A:79:ASN:HD22	1:A:79:ASN:HB2	12	0.14
(1,680)	1:A:79:ASN:HD22	1:A:79:ASN:HB3	12	0.14
(1,679)	1:A:78:GLU:HG2	1:A:79:ASN:HD22	3	0.14
(1,679)	1:A:78:GLU:HG3	1:A:79:ASN:HD22	3	0.14
(1,679)	1:A:78:GLU:HG2	1:A:79:ASN:HD22	18	0.14
(1,679)	1:A:78:GLU:HG3	1:A:79:ASN:HD22	18	0.14
(1,674)	1:A:17:PRO:HG2	1:A:20:TRP:HE1	12	0.14
(1,674)	1:A:17:PRO:HG3	1:A:20:TRP:HE1	12	0.14
(1,674)	1:A:17:PRO:HG2	1:A:20:TRP:HE1	15	0.14
(1,674)	1:A:17:PRO:HG3	1:A:20:TRP:HE1	15	0.14
(1,674)	1:A:17:PRO:HG2	1:A:20:TRP:HE1	20	0.14
(1,674)	1:A:17:PRO:HG3	1:A:20:TRP:HE1	20	0.14
(1,673)	1:A:17:PRO:HB2	1:A:20:TRP:HE1	15	0.14
(1,673)	1:A:17:PRO:HB3	1:A:20:TRP:HE1	15	0.14
(1,625)	1:A:72:ASP:H	1:A:57:GLN:HE22	20	0.14
(1,623)	1:A:30:ASP:HB2	1:A:12:ASN:HD22	10	0.14
(1,623)	1:A:30:ASP:HB3	1:A:12:ASN:HD22	10	0.14
(1,623)	1:A:30:ASP:HB2	1:A:12:ASN:HD22	14	0.14
(1,623)	1:A:30:ASP:HB3	1:A:12:ASN:HD22	14	0.14
(1,612)	1:A:15:CYS:H	1:A:14:GLN:HE22	4	0.14
(1,607)	1:A:11:ASN:HB2	1:A:11:ASN:HD21	1	0.14
(1,607)	1:A:11:ASN:HB3	1:A:11:ASN:HD21	1	0.14
(1,607)	1:A:11:ASN:HB2	1:A:11:ASN:HD21	2	0.14
(1,607)	1:A:11:ASN:HB3	1:A:11:ASN:HD21	2	0.14
(1,603)	1:A:32:SER:HB2	1:A:11:ASN:HD22	10	0.14
(1,603)	1:A:32:SER:HB3	1:A:11:ASN:HD22	10	0.14
(1,598)	1:A:74:GLY:HA2	1:A:69:ASN:HD22	12	0.14
(1,598)	1:A:74:GLY:HA3	1:A:69:ASN:HD22	12	0.14
(1,597)	1:A:74:GLY:HA2	1:A:69:ASN:HD22	12	0.14
(1,597)	1:A:74:GLY:HA3	1:A:69:ASN:HD22	12	0.14
(1,596)	1:A:74:GLY:HA2	1:A:69:ASN:HD21	7	0.14
(1,596)	1:A:74:GLY:HA3	1:A:69:ASN:HD21	7	0.14
(1,592)	1:A:74:GLY:HA2	1:A:69:ASN:HD21	3	0.14
(1,592)	1:A:74:GLY:HA3	1:A:69:ASN:HD21	3	0.14
(1,591)	1:A:69:ASN:HB2	1:A:69:ASN:HD21	5	0.14
(1,591)	1:A:69:ASN:HB3	1:A:69:ASN:HD21	5	0.14
(1,591)	1:A:69:ASN:HB2	1:A:69:ASN:HD21	6	0.14
(1,591)	1:A:69:ASN:HB3	1:A:69:ASN:HD21	6	0.14
(1,591)	1:A:69:ASN:HB2	1:A:69:ASN:HD21	20	0.14

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,591)	1:A:69:ASN:HB3	1:A:69:ASN:HD21	20	0.14
(1,59)	1:A:65:CYS:H	1:A:66:ASP:H	9	0.14
(1,575)	1:A:57:GLN:H	1:A:56:THR:H	10	0.14
(1,574)	1:A:64:ARG:H	1:A:65:CYS:H	5	0.14
(1,57)	1:A:66:ASP:H	1:A:67:GLY:H	4	0.14
(1,57)	1:A:66:ASP:H	1:A:67:GLY:H	18	0.14
(1,562)	1:A:102:PHE:HB2	1:A:99:SER:H	15	0.14
(1,562)	1:A:102:PHE:HB3	1:A:99:SER:H	15	0.14
(1,560)	1:A:90:PHE:H	1:A:99:SER:H	9	0.14
(1,560)	1:A:90:PHE:H	1:A:99:SER:H	18	0.14
(1,55)	1:A:71:CYS:H	1:A:70:ASP:H	19	0.14
(1,549)	1:A:115:ASP:HA	1:A:104:CYS:H	11	0.14
(1,518)	1:A:49:ILE:H	1:A:61:VAL:H	11	0.14
(1,518)	1:A:49:ILE:H	1:A:61:VAL:H	12	0.14
(1,516)	1:A:49:ILE:H	1:A:59:ILE:H	5	0.14
(1,516)	1:A:49:ILE:H	1:A:59:ILE:H	14	0.14
(1,513)	1:A:61:VAL:HA	1:A:49:ILE:H	12	0.14
(1,512)	1:A:59:ILE:H	1:A:49:ILE:H	6	0.14
(1,512)	1:A:59:ILE:H	1:A:49:ILE:H	18	0.14
(1,496)	1:A:31:GLY:HA2	1:A:31:GLY:H	3	0.14
(1,496)	1:A:31:GLY:HA3	1:A:31:GLY:H	3	0.14
(1,496)	1:A:31:GLY:HA2	1:A:31:GLY:H	14	0.14
(1,496)	1:A:31:GLY:HA3	1:A:31:GLY:H	14	0.14
(1,496)	1:A:31:GLY:HA2	1:A:31:GLY:H	18	0.14
(1,496)	1:A:31:GLY:HA3	1:A:31:GLY:H	18	0.14
(1,478)	1:A:9:VAL:HB	1:A:9:VAL:H	3	0.14
(1,478)	1:A:9:VAL:HB	1:A:9:VAL:H	8	0.14
(1,475)	1:A:75:GLU:H	1:A:76:ASP:H	4	0.14
(1,473)	1:A:85:CYS:H	1:A:86:SER:H	3	0.14
(1,473)	1:A:85:CYS:H	1:A:86:SER:H	5	0.14
(1,473)	1:A:85:CYS:H	1:A:86:SER:H	10	0.14
(1,473)	1:A:85:CYS:H	1:A:86:SER:H	13	0.14
(1,473)	1:A:85:CYS:H	1:A:86:SER:H	14	0.14
(1,473)	1:A:85:CYS:H	1:A:86:SER:H	17	0.14
(1,468)	1:A:78:GLU:HG2	1:A:79:ASN:H	5	0.14
(1,468)	1:A:78:GLU:HG3	1:A:79:ASN:H	5	0.14
(1,462)	1:A:79:ASN:H	1:A:78:GLU:H	1	0.14
(1,462)	1:A:79:ASN:H	1:A:78:GLU:H	9	0.14
(1,462)	1:A:79:ASN:H	1:A:78:GLU:H	11	0.14
(1,462)	1:A:79:ASN:H	1:A:78:GLU:H	17	0.14
(1,454)	1:A:78:GLU:HG2	1:A:76:ASP:H	8	0.14
(1,454)	1:A:78:GLU:HG3	1:A:76:ASP:H	8	0.14

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,451)	1:A:75:GLU:H	1:A:76:ASP:H	4	0.14
(1,439)	1:A:75:GLU:H	1:A:73:SER:H	12	0.14
(1,439)	1:A:75:GLU:H	1:A:73:SER:H	14	0.14
(1,439)	1:A:75:GLU:H	1:A:73:SER:H	15	0.14
(1,432)	1:A:70:ASP:HB2	1:A:70:ASP:H	11	0.14
(1,432)	1:A:70:ASP:HB3	1:A:70:ASP:H	11	0.14
(1,419)	1:A:65:CYS:HB2	1:A:66:ASP:H	1	0.14
(1,419)	1:A:65:CYS:HB3	1:A:66:ASP:H	1	0.14
(1,419)	1:A:65:CYS:HB2	1:A:66:ASP:H	6	0.14
(1,419)	1:A:65:CYS:HB3	1:A:66:ASP:H	6	0.14
(1,418)	1:A:64:ARG:HA	1:A:66:ASP:H	2	0.14
(1,415)	1:A:64:ARG:HA	1:A:65:CYS:H	19	0.14
(1,414)	1:A:63:TRP:H	1:A:63:TRP:HB2	6	0.14
(1,414)	1:A:63:TRP:H	1:A:63:TRP:HB3	6	0.14
(1,414)	1:A:63:TRP:H	1:A:63:TRP:HB2	18	0.14
(1,414)	1:A:63:TRP:H	1:A:63:TRP:HB3	18	0.14
(1,409)	1:A:60:PRO:HA	1:A:61:VAL:H	6	0.14
(1,409)	1:A:60:PRO:HA	1:A:61:VAL:H	14	0.14
(1,409)	1:A:60:PRO:HA	1:A:61:VAL:H	19	0.14
(1,392)	1:A:52:GLY:HA2	1:A:53:ALA:H	13	0.14
(1,392)	1:A:52:GLY:HA3	1:A:53:ALA:H	13	0.14
(1,390)	1:A:51:CYS:HB2	1:A:52:GLY:H	10	0.14
(1,390)	1:A:51:CYS:HB3	1:A:52:GLY:H	10	0.14
(1,386)	1:A:51:CYS:HB2	1:A:51:CYS:H	15	0.14
(1,386)	1:A:51:CYS:HB3	1:A:51:CYS:H	15	0.14
(1,383)	1:A:51:CYS:H	1:A:50:SER:HA	6	0.14
(1,383)	1:A:51:CYS:H	1:A:50:SER:HA	14	0.14
(1,375)	1:A:48:GLU:HA	1:A:49:ILE:H	19	0.14
(1,374)	1:A:61:VAL:H	1:A:49:ILE:H	20	0.14
(1,369)	1:A:43:THR:HB	1:A:44:CYS:H	13	0.14
(1,359)	1:A:40:HIS:H	1:A:40:HIS:HB2	6	0.14
(1,359)	1:A:40:HIS:H	1:A:40:HIS:HB3	6	0.14
(1,359)	1:A:40:HIS:H	1:A:40:HIS:HB2	7	0.14
(1,359)	1:A:40:HIS:H	1:A:40:HIS:HB3	7	0.14
(1,357)	1:A:40:HIS:H	1:A:39:CYS:HA	9	0.14
(1,329)	1:A:25:ASP:H	1:A:23:ASP:H	13	0.14
(1,320)	1:A:7:ASP:HA	1:A:18:SER:H	12	0.14
(1,319)	1:A:16:VAL:H	1:A:9:VAL:HA	6	0.14
(1,313)	1:A:14:GLN:HG2	1:A:14:GLN:H	13	0.14
(1,313)	1:A:14:GLN:HG3	1:A:14:GLN:H	13	0.14
(1,299)	1:A:11:ASN:H	1:A:12:ASN:H	19	0.14
(1,296)	1:A:10:CYS:HB2	1:A:10:CYS:H	4	0.14

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,296)	1:A:10:CYS:HB3	1:A:10:CYS:H	4	0.14
(1,295)	1:A:15:CYS:HA	1:A:10:CYS:H	14	0.14
(1,295)	1:A:15:CYS:HA	1:A:10:CYS:H	16	0.14
(1,290)	1:A:8:PHE:HA	1:A:9:VAL:H	13	0.14
(1,286)	1:A:7:ASP:HB2	1:A:7:ASP:H	16	0.14
(1,286)	1:A:7:ASP:HB3	1:A:7:ASP:H	16	0.14
(1,28)	1:A:118:ASP:H	1:A:117:LEU:H	15	0.14
(1,279)	1:A:6:SER:HB2	1:A:6:SER:H	11	0.14
(1,279)	1:A:6:SER:HB3	1:A:6:SER:H	11	0.14
(1,277)	1:A:6:SER:HB2	1:A:6:SER:H	11	0.14
(1,277)	1:A:6:SER:HB3	1:A:6:SER:H	11	0.14
(1,273)	1:A:7:ASP:HB2	1:A:4:ALA:H	1	0.14
(1,273)	1:A:7:ASP:HB3	1:A:4:ALA:H	1	0.14
(1,273)	1:A:7:ASP:HB2	1:A:4:ALA:H	5	0.14
(1,273)	1:A:7:ASP:HB3	1:A:4:ALA:H	5	0.14
(1,248)	1:A:83:ILE:HB	1:A:84:THR:H	8	0.14
(1,247)	1:A:83:ILE:HA	1:A:84:THR:H	8	0.14
(1,241)	1:A:86:SER:H	1:A:89:GLU:H	4	0.14
(1,241)	1:A:86:SER:H	1:A:89:GLU:H	11	0.14
(1,215)	1:A:96:ARG:H	1:A:92:CYS:HB2	16	0.14
(1,215)	1:A:96:ARG:H	1:A:92:CYS:HB3	16	0.14
(1,204)	1:A:98:ILE:HG12	1:A:98:ILE:H	5	0.14
(1,204)	1:A:98:ILE:HG13	1:A:98:ILE:H	5	0.14
(1,204)	1:A:98:ILE:HG12	1:A:98:ILE:H	18	0.14
(1,204)	1:A:98:ILE:HG13	1:A:98:ILE:H	18	0.14
(1,196)	1:A:98:ILE:HA	1:A:99:SER:H	7	0.14
(1,190)	1:A:101:ASN:HB2	1:A:101:ASN:H	1	0.14
(1,190)	1:A:101:ASN:HB3	1:A:101:ASN:H	1	0.14
(1,190)	1:A:101:ASN:HB2	1:A:101:ASN:H	17	0.14
(1,190)	1:A:101:ASN:HB3	1:A:101:ASN:H	17	0.14
(1,187)	1:A:103:VAL:HG11	1:A:102:PHE:H	2	0.14
(1,187)	1:A:103:VAL:HG12	1:A:102:PHE:H	2	0.14
(1,187)	1:A:103:VAL:HG13	1:A:102:PHE:H	2	0.14
(1,187)	1:A:103:VAL:HG21	1:A:102:PHE:H	2	0.14
(1,187)	1:A:103:VAL:HG22	1:A:102:PHE:H	2	0.14
(1,187)	1:A:103:VAL:HG23	1:A:102:PHE:H	2	0.14
(1,184)	1:A:103:VAL:HB	1:A:102:PHE:H	11	0.14
(1,180)	1:A:99:SER:HB2	1:A:102:PHE:H	13	0.14
(1,180)	1:A:99:SER:HB3	1:A:102:PHE:H	13	0.14
(1,18)	1:A:81:GLY:H	1:A:82:ASN:H	15	0.14
(1,143)	1:A:106:GLY:H	1:A:107:GLN:H	1	0.14
(1,139)	1:A:109:ASP:H	1:A:109:ASP:HB2	8	0.14

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,139)	1:A:109:ASP:H	1:A:109:ASP:HB3	8	0.14
(1,130)	1:A:115:ASP:HB2	1:A:113:GLY:H	15	0.14
(1,130)	1:A:115:ASP:HB3	1:A:113:GLY:H	15	0.14
(1,129)	1:A:114:SER:H	1:A:114:SER:HG	10	0.14
(1,128)	1:A:114:SER:HA	1:A:114:SER:H	15	0.14
(1,127)	1:A:114:SER:H	1:A:114:SER:HB2	15	0.14
(1,127)	1:A:114:SER:H	1:A:114:SER:HB3	15	0.14
(1,126)	1:A:117:LEU:HD11	1:A:114:SER:H	3	0.14
(1,126)	1:A:117:LEU:HD12	1:A:114:SER:H	3	0.14
(1,126)	1:A:117:LEU:HD13	1:A:114:SER:H	3	0.14
(1,126)	1:A:117:LEU:HD21	1:A:114:SER:H	3	0.14
(1,126)	1:A:117:LEU:HD22	1:A:114:SER:H	3	0.14
(1,126)	1:A:117:LEU:HD23	1:A:114:SER:H	3	0.14
(1,126)	1:A:117:LEU:HD11	1:A:114:SER:H	7	0.14
(1,126)	1:A:117:LEU:HD12	1:A:114:SER:H	7	0.14
(1,126)	1:A:117:LEU:HD13	1:A:114:SER:H	7	0.14
(1,126)	1:A:117:LEU:HD21	1:A:114:SER:H	7	0.14
(1,126)	1:A:117:LEU:HD22	1:A:114:SER:H	7	0.14
(1,126)	1:A:117:LEU:HD23	1:A:114:SER:H	7	0.14
(1,125)	1:A:114:SER:H	1:A:113:GLY:HA2	15	0.14
(1,125)	1:A:114:SER:H	1:A:113:GLY:HA3	15	0.14
(1,123)	1:A:115:ASP:HB2	1:A:115:ASP:H	6	0.14
(1,123)	1:A:115:ASP:HB3	1:A:115:ASP:H	6	0.14
(1,122)	1:A:115:ASP:HB2	1:A:115:ASP:H	5	0.14
(1,122)	1:A:115:ASP:HB3	1:A:115:ASP:H	5	0.14
(1,121)	1:A:114:SER:HA	1:A:115:ASP:H	14	0.14
(1,12)	1:A:34:GLU:H	1:A:33:ASP:H	18	0.14
(1,1)	1:A:112:ASP:H	1:A:113:GLY:H	19	0.14
(4,2)	1:A:90:PHE:O	1:A:98:ILE:H	19	0.13
(3,10)	2:A:202:CA:CA	1:A:70:ASP:OD2	17	0.13
(2,91)	1:A:83:ILE:HD11	1:A:84:THR:H	19	0.13
(2,91)	1:A:83:ILE:HD12	1:A:84:THR:H	19	0.13
(2,91)	1:A:83:ILE:HD13	1:A:84:THR:H	19	0.13
(2,91)	1:A:83:ILE:HG21	1:A:84:THR:H	19	0.13
(2,91)	1:A:83:ILE:HG22	1:A:84:THR:H	19	0.13
(2,91)	1:A:83:ILE:HG23	1:A:84:THR:H	19	0.13
(2,88)	1:A:78:GLU:HG2	1:A:79:ASN:HD21	19	0.13
(2,88)	1:A:78:GLU:HG3	1:A:79:ASN:HD21	19	0.13
(2,88)	1:A:89:GLU:HB2	1:A:79:ASN:HD21	19	0.13
(2,88)	1:A:89:GLU:HB3	1:A:79:ASN:HD21	19	0.13
(2,61)	1:A:4:ALA:HA	1:A:5:GLU:H	6	0.13
(2,61)	1:A:6:SER:HA	1:A:5:GLU:H	6	0.13

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,56)	1:A:114:SER:HA	1:A:117:LEU:H	14	0.13
(2,46)	1:A:114:SER:HG	1:A:115:ASP:H	7	0.13
(2,46)	1:A:116:GLU:HA	1:A:115:ASP:H	7	0.13
(2,46)	1:A:119:CYS:HA	1:A:115:ASP:H	7	0.13
(2,388)	1:A:64:ARG:HD2	1:A:68:GLU:H	4	0.13
(2,388)	1:A:64:ARG:HD3	1:A:68:GLU:H	4	0.13
(2,388)	1:A:66:ASP:HB2	1:A:68:GLU:H	4	0.13
(2,388)	1:A:66:ASP:HB3	1:A:68:GLU:H	4	0.13
(2,383)	1:A:99:SER:HB2	1:A:102:PHE:H	2	0.13
(2,383)	1:A:99:SER:HB3	1:A:102:PHE:H	2	0.13
(2,383)	1:A:102:PHE:HB2	1:A:102:PHE:H	2	0.13
(2,383)	1:A:102:PHE:HB3	1:A:102:PHE:H	2	0.13
(2,38)	1:A:96:ARG:HB2	1:A:97:CYS:H	20	0.13
(2,38)	1:A:96:ARG:HB3	1:A:97:CYS:H	20	0.13
(2,38)	1:A:96:ARG:HG2	1:A:97:CYS:H	20	0.13
(2,38)	1:A:96:ARG:HG3	1:A:97:CYS:H	20	0.13
(2,371)	1:A:83:ILE:HD11	1:A:83:ILE:H	14	0.13
(2,371)	1:A:83:ILE:HD12	1:A:83:ILE:H	14	0.13
(2,371)	1:A:83:ILE:HD13	1:A:83:ILE:H	14	0.13
(2,371)	1:A:83:ILE:HG21	1:A:83:ILE:H	14	0.13
(2,371)	1:A:83:ILE:HG22	1:A:83:ILE:H	14	0.13
(2,371)	1:A:83:ILE:HG23	1:A:83:ILE:H	14	0.13
(2,367)	1:A:35:SER:HB2	1:A:37:GLU:H	8	0.13
(2,367)	1:A:35:SER:HB3	1:A:37:GLU:H	8	0.13
(2,367)	1:A:36:PRO:HA	1:A:37:GLU:H	8	0.13
(2,365)	1:A:69:ASN:HA	1:A:70:ASP:H	1	0.13
(2,365)	1:A:70:ASP:HA	1:A:70:ASP:H	1	0.13
(2,365)	1:A:69:ASN:HA	1:A:70:ASP:H	2	0.13
(2,365)	1:A:70:ASP:HA	1:A:70:ASP:H	2	0.13
(2,365)	1:A:69:ASN:HA	1:A:70:ASP:H	16	0.13
(2,365)	1:A:70:ASP:HA	1:A:70:ASP:H	16	0.13
(2,365)	1:A:69:ASN:HA	1:A:70:ASP:H	20	0.13
(2,365)	1:A:70:ASP:HA	1:A:70:ASP:H	20	0.13
(2,362)	1:A:14:GLN:HB2	1:A:10:CYS:H	1	0.13
(2,362)	1:A:14:GLN:HB3	1:A:10:CYS:H	1	0.13
(2,35)	1:A:110:CYS:HB2	1:A:112:ASP:H	10	0.13
(2,35)	1:A:110:CYS:HB3	1:A:112:ASP:H	10	0.13
(2,35)	1:A:111:SER:HB2	1:A:112:ASP:H	10	0.13
(2,35)	1:A:111:SER:HB3	1:A:112:ASP:H	10	0.13
(2,35)	1:A:113:GLY:HA2	1:A:112:ASP:H	10	0.13
(2,35)	1:A:113:GLY:HA3	1:A:112:ASP:H	10	0.13
(2,348)	1:A:35:SER:HB2	1:A:35:SER:H	2	0.13

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,348)	1:A:35:SER:HB3	1:A:35:SER:H	2	0.13
(2,348)	1:A:36:PRO:HA	1:A:35:SER:H	2	0.13
(2,345)	1:A:84:THR:HG1	1:A:85:CYS:H	4	0.13
(2,345)	1:A:84:THR:HG21	1:A:85:CYS:H	4	0.13
(2,345)	1:A:84:THR:HG22	1:A:85:CYS:H	4	0.13
(2,345)	1:A:84:THR:HG23	1:A:85:CYS:H	4	0.13
(2,345)	1:A:91:THR:HG21	1:A:85:CYS:H	4	0.13
(2,345)	1:A:91:THR:HG22	1:A:85:CYS:H	4	0.13
(2,345)	1:A:91:THR:HG23	1:A:85:CYS:H	4	0.13
(2,339)	1:A:9:VAL:HG11	1:A:13:GLY:H	4	0.13
(2,339)	1:A:9:VAL:HG12	1:A:13:GLY:H	4	0.13
(2,339)	1:A:9:VAL:HG13	1:A:13:GLY:H	4	0.13
(2,339)	1:A:9:VAL:HG21	1:A:13:GLY:H	4	0.13
(2,339)	1:A:9:VAL:HG22	1:A:13:GLY:H	4	0.13
(2,339)	1:A:9:VAL:HG23	1:A:13:GLY:H	4	0.13
(2,33)	1:A:63:TRP:HB2	1:A:80:CYS:H	17	0.13
(2,33)	1:A:63:TRP:HB3	1:A:80:CYS:H	17	0.13
(2,33)	1:A:81:GLY:HA2	1:A:80:CYS:H	17	0.13
(2,33)	1:A:81:GLY:HA3	1:A:80:CYS:H	17	0.13
(2,328)	1:A:49:ILE:HG21	1:A:62:SER:H	3	0.13
(2,328)	1:A:49:ILE:HG22	1:A:62:SER:H	3	0.13
(2,328)	1:A:49:ILE:HG23	1:A:62:SER:H	3	0.13
(2,328)	1:A:59:ILE:HD11	1:A:62:SER:H	3	0.13
(2,328)	1:A:59:ILE:HD12	1:A:62:SER:H	3	0.13
(2,328)	1:A:59:ILE:HD13	1:A:62:SER:H	3	0.13
(2,328)	1:A:60:PRO:HB2	1:A:62:SER:H	3	0.13
(2,328)	1:A:60:PRO:HB3	1:A:62:SER:H	3	0.13
(2,328)	1:A:61:VAL:HG11	1:A:62:SER:H	3	0.13
(2,328)	1:A:61:VAL:HG12	1:A:62:SER:H	3	0.13
(2,328)	1:A:61:VAL:HG13	1:A:62:SER:H	3	0.13
(2,328)	1:A:61:VAL:HG21	1:A:62:SER:H	3	0.13
(2,328)	1:A:61:VAL:HG21	1:A:62:SER:H	3	0.13
(2,328)	1:A:61:VAL:HG22	1:A:62:SER:H	3	0.13
(2,328)	1:A:61:VAL:HG22	1:A:62:SER:H	3	0.13
(2,328)	1:A:61:VAL:HG23	1:A:62:SER:H	3	0.13
(2,328)	1:A:61:VAL:HG23	1:A:62:SER:H	3	0.13
(2,323)	1:A:64:ARG:HG2	1:A:68:GLU:H	8	0.13
(2,323)	1:A:64:ARG:HG3	1:A:68:GLU:H	8	0.13
(2,323)	1:A:68:GLU:HG3	1:A:68:GLU:H	8	0.13
(2,316)	1:A:90:PHE:HB2	1:A:98:ILE:H	19	0.13
(2,316)	1:A:90:PHE:HB3	1:A:98:ILE:H	19	0.13
(2,316)	1:A:97:CYS:HB2	1:A:98:ILE:H	19	0.13

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,316)	1:A:97:CYS:HB3	1:A:98:ILE:H	19	0.13
(2,3)	1:A:49:ILE:HD11	1:A:49:ILE:H	2	0.13
(2,3)	1:A:49:ILE:HD12	1:A:49:ILE:H	2	0.13
(2,3)	1:A:49:ILE:HD13	1:A:49:ILE:H	2	0.13
(2,3)	1:A:49:ILE:HG12	1:A:49:ILE:H	2	0.13
(2,3)	1:A:49:ILE:HG13	1:A:49:ILE:H	2	0.13
(2,3)	1:A:49:ILE:HG21	1:A:49:ILE:H	2	0.13
(2,3)	1:A:49:ILE:HG22	1:A:49:ILE:H	2	0.13
(2,3)	1:A:49:ILE:HG23	1:A:49:ILE:H	2	0.13
(2,3)	1:A:59:ILE:HD11	1:A:49:ILE:H	2	0.13
(2,3)	1:A:59:ILE:HD12	1:A:49:ILE:H	2	0.13
(2,3)	1:A:59:ILE:HD13	1:A:49:ILE:H	2	0.13
(2,3)	1:A:59:ILE:HG21	1:A:49:ILE:H	2	0.13
(2,3)	1:A:59:ILE:HG22	1:A:49:ILE:H	2	0.13
(2,3)	1:A:59:ILE:HG23	1:A:49:ILE:H	2	0.13
(2,3)	1:A:61:VAL:HG11	1:A:49:ILE:H	2	0.13
(2,3)	1:A:61:VAL:HG12	1:A:49:ILE:H	2	0.13
(2,3)	1:A:61:VAL:HG13	1:A:49:ILE:H	2	0.13
(2,3)	1:A:61:VAL:HG21	1:A:49:ILE:H	2	0.13
(2,3)	1:A:61:VAL:HG21	1:A:49:ILE:H	2	0.13
(2,3)	1:A:61:VAL:HG22	1:A:49:ILE:H	2	0.13
(2,3)	1:A:61:VAL:HG22	1:A:49:ILE:H	2	0.13
(2,3)	1:A:61:VAL:HG23	1:A:49:ILE:H	2	0.13
(2,3)	1:A:61:VAL:HG23	1:A:49:ILE:H	2	0.13
(2,277)	1:A:19:ARG:HG2	1:A:19:ARG:H	15	0.13
(2,277)	1:A:19:ARG:HG2	1:A:19:ARG:H	15	0.13
(2,277)	1:A:19:ARG:HG3	1:A:19:ARG:H	15	0.13
(2,277)	1:A:19:ARG:HG3	1:A:19:ARG:H	15	0.13
(2,277)	1:A:21:LYS:HD2	1:A:19:ARG:H	15	0.13
(2,272)	1:A:19:ARG:HD2	1:A:19:ARG:H	15	0.13
(2,272)	1:A:19:ARG:HD3	1:A:19:ARG:H	15	0.13
(2,272)	1:A:20:TRP:HB2	1:A:19:ARG:H	15	0.13
(2,272)	1:A:20:TRP:HB3	1:A:19:ARG:H	15	0.13
(2,266)	1:A:31:GLY:HA2	1:A:32:SER:H	15	0.13
(2,266)	1:A:31:GLY:HA3	1:A:32:SER:H	15	0.13
(2,266)	1:A:32:SER:HB2	1:A:32:SER:H	15	0.13
(2,266)	1:A:32:SER:HB3	1:A:32:SER:H	15	0.13
(2,262)	1:A:51:CYS:HB2	1:A:74:GLY:H	8	0.13
(2,262)	1:A:51:CYS:HB3	1:A:74:GLY:H	8	0.13
(2,262)	1:A:71:CYS:HB2	1:A:74:GLY:H	8	0.13
(2,262)	1:A:71:CYS:HB3	1:A:74:GLY:H	8	0.13
(2,262)	1:A:51:CYS:HB2	1:A:74:GLY:H	17	0.13

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,262)	1:A:51:CYS:HB3	1:A:74:GLY:H	17	0.13
(2,262)	1:A:71:CYS:HB2	1:A:74:GLY:H	17	0.13
(2,262)	1:A:71:CYS:HB3	1:A:74:GLY:H	17	0.13
(2,261)	1:A:110:CYS:HB2	1:A:110:CYS:H	2	0.13
(2,261)	1:A:110:CYS:HB3	1:A:110:CYS:H	2	0.13
(2,261)	1:A:111:SER:HB2	1:A:110:CYS:H	2	0.13
(2,261)	1:A:113:GLY:HA2	1:A:110:CYS:H	2	0.13
(2,261)	1:A:113:GLY:HA3	1:A:110:CYS:H	2	0.13
(2,261)	1:A:110:CYS:HB2	1:A:110:CYS:H	6	0.13
(2,261)	1:A:110:CYS:HB3	1:A:110:CYS:H	6	0.13
(2,261)	1:A:111:SER:HB2	1:A:110:CYS:H	6	0.13
(2,261)	1:A:113:GLY:HA2	1:A:110:CYS:H	6	0.13
(2,261)	1:A:113:GLY:HA3	1:A:110:CYS:H	6	0.13
(2,259)	1:A:69:ASN:HB2	1:A:69:ASN:HD21	9	0.13
(2,259)	1:A:69:ASN:HB3	1:A:69:ASN:HD21	9	0.13
(2,259)	1:A:70:ASP:HB2	1:A:69:ASN:HD21	9	0.13
(2,259)	1:A:70:ASP:HB3	1:A:69:ASN:HD21	9	0.13
(2,259)	1:A:69:ASN:HB2	1:A:69:ASN:HD21	13	0.13
(2,259)	1:A:69:ASN:HB3	1:A:69:ASN:HD21	13	0.13
(2,259)	1:A:70:ASP:HB2	1:A:69:ASN:HD21	13	0.13
(2,259)	1:A:70:ASP:HB3	1:A:69:ASN:HD21	13	0.13
(2,236)	1:A:19:ARG:HB2	1:A:21:LYS:H	20	0.13
(2,236)	1:A:19:ARG:HB3	1:A:21:LYS:H	20	0.13
(2,236)	1:A:21:LYS:HB2	1:A:21:LYS:H	20	0.13
(2,236)	1:A:21:LYS:HB3	1:A:21:LYS:H	20	0.13
(2,233)	1:A:14:GLN:HB2	1:A:14:GLN:HE22	2	0.13
(2,233)	1:A:14:GLN:HB3	1:A:14:GLN:HE22	2	0.13
(2,233)	1:A:14:GLN:HB2	1:A:14:GLN:HE22	4	0.13
(2,233)	1:A:14:GLN:HB3	1:A:14:GLN:HE22	4	0.13
(2,233)	1:A:14:GLN:HB2	1:A:14:GLN:HE22	5	0.13
(2,233)	1:A:14:GLN:HB3	1:A:14:GLN:HE22	5	0.13
(2,233)	1:A:14:GLN:HB2	1:A:14:GLN:HE22	10	0.13
(2,233)	1:A:14:GLN:HB3	1:A:14:GLN:HE22	10	0.13
(2,233)	1:A:14:GLN:HB2	1:A:14:GLN:HE22	11	0.13
(2,233)	1:A:14:GLN:HB3	1:A:14:GLN:HE22	11	0.13
(2,233)	1:A:14:GLN:HB2	1:A:14:GLN:HE22	14	0.13
(2,233)	1:A:14:GLN:HB3	1:A:14:GLN:HE22	14	0.13
(2,22)	1:A:75:GLU:HA	1:A:78:GLU:H	13	0.13
(2,22)	1:A:87:PRO:HD2	1:A:78:GLU:H	13	0.13
(2,21)	1:A:40:HIS:HA	1:A:56:THR:H	10	0.13
(2,21)	1:A:55:SER:HA	1:A:56:THR:H	10	0.13
(2,21)	1:A:56:THR:HA	1:A:56:THR:H	10	0.13

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,193)	1:A:98:ILE:HD11	1:A:109:ASP:H	3	0.13
(2,193)	1:A:98:ILE:HD12	1:A:109:ASP:H	3	0.13
(2,193)	1:A:98:ILE:HD13	1:A:109:ASP:H	3	0.13
(2,193)	1:A:117:LEU:HD11	1:A:109:ASP:H	3	0.13
(2,193)	1:A:117:LEU:HD12	1:A:109:ASP:H	3	0.13
(2,193)	1:A:117:LEU:HD13	1:A:109:ASP:H	3	0.13
(2,193)	1:A:117:LEU:HD21	1:A:109:ASP:H	3	0.13
(2,193)	1:A:117:LEU:HD22	1:A:109:ASP:H	3	0.13
(2,193)	1:A:117:LEU:HD23	1:A:109:ASP:H	3	0.13
(2,191)	1:A:53:ALA:H	1:A:55:SER:H	18	0.13
(2,191)	1:A:54:HIS:H	1:A:55:SER:H	18	0.13
(2,191)	1:A:56:THR:H	1:A:55:SER:H	18	0.13
(2,188)	1:A:16:VAL:HG11	1:A:19:ARG:H	6	0.13
(2,188)	1:A:16:VAL:HG12	1:A:19:ARG:H	6	0.13
(2,188)	1:A:16:VAL:HG13	1:A:19:ARG:H	6	0.13
(2,188)	1:A:16:VAL:HG21	1:A:19:ARG:H	6	0.13
(2,188)	1:A:16:VAL:HG22	1:A:19:ARG:H	6	0.13
(2,188)	1:A:16:VAL:HG23	1:A:19:ARG:H	6	0.13
(2,185)	1:A:3:CYS:HB2	1:A:15:CYS:H	11	0.13
(2,185)	1:A:3:CYS:HB3	1:A:15:CYS:H	11	0.13
(2,185)	1:A:15:CYS:HB2	1:A:15:CYS:H	11	0.13
(2,185)	1:A:15:CYS:HB3	1:A:15:CYS:H	11	0.13
(2,18)	1:A:111:SER:HA	1:A:113:GLY:H	10	0.13
(2,18)	1:A:113:GLY:HA2	1:A:113:GLY:H	10	0.13
(2,18)	1:A:113:GLY:HA3	1:A:113:GLY:H	10	0.13
(2,18)	1:A:111:SER:HA	1:A:113:GLY:H	17	0.13
(2,18)	1:A:113:GLY:HA2	1:A:113:GLY:H	17	0.13
(2,18)	1:A:113:GLY:HA3	1:A:113:GLY:H	17	0.13
(2,179)	1:A:9:VAL:HG11	1:A:10:CYS:H	15	0.13
(2,179)	1:A:9:VAL:HG12	1:A:10:CYS:H	15	0.13
(2,179)	1:A:9:VAL:HG13	1:A:10:CYS:H	15	0.13
(2,179)	1:A:9:VAL:HG21	1:A:10:CYS:H	15	0.13
(2,179)	1:A:9:VAL:HG22	1:A:10:CYS:H	15	0.13
(2,179)	1:A:9:VAL:HG23	1:A:10:CYS:H	15	0.13
(2,164)	1:A:14:GLN:HB2	1:A:14:GLN:H	12	0.13
(2,164)	1:A:14:GLN:HB3	1:A:14:GLN:H	12	0.13
(2,156)	1:A:51:CYS:HB2	1:A:71:CYS:H	2	0.13
(2,156)	1:A:51:CYS:HB3	1:A:71:CYS:H	2	0.13
(2,156)	1:A:71:CYS:HB2	1:A:71:CYS:H	2	0.13
(2,156)	1:A:71:CYS:HB3	1:A:71:CYS:H	2	0.13
(2,154)	1:A:107:GLN:HG2	1:A:109:ASP:H	14	0.13
(2,154)	1:A:107:GLN:HG3	1:A:109:ASP:H	14	0.13

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,154)	1:A:116:GLU:HG2	1:A:109:ASP:H	14	0.13
(2,154)	1:A:116:GLU:HG3	1:A:109:ASP:H	14	0.13
(2,134)	1:A:79:ASN:HB2	1:A:85:CYS:H	16	0.13
(2,134)	1:A:79:ASN:HB3	1:A:85:CYS:H	16	0.13
(2,134)	1:A:97:CYS:HB2	1:A:85:CYS:H	16	0.13
(2,134)	1:A:97:CYS:HB3	1:A:85:CYS:H	16	0.13
(2,13)	1:A:110:CYS:HB2	1:A:113:GLY:H	2	0.13
(2,13)	1:A:110:CYS:HB3	1:A:113:GLY:H	2	0.13
(2,13)	1:A:111:SER:HB2	1:A:113:GLY:H	2	0.13
(2,13)	1:A:111:SER:HB3	1:A:113:GLY:H	2	0.13
(2,13)	1:A:113:GLY:HA2	1:A:113:GLY:H	2	0.13
(2,13)	1:A:113:GLY:HA3	1:A:113:GLY:H	2	0.13
(2,123)	1:A:16:VAL:HG11	1:A:33:ASP:H	11	0.13
(2,123)	1:A:16:VAL:HG12	1:A:33:ASP:H	11	0.13
(2,123)	1:A:16:VAL:HG13	1:A:33:ASP:H	11	0.13
(2,123)	1:A:16:VAL:HG21	1:A:33:ASP:H	11	0.13
(2,123)	1:A:16:VAL:HG22	1:A:33:ASP:H	11	0.13
(2,123)	1:A:16:VAL:HG23	1:A:33:ASP:H	11	0.13
(2,122)	1:A:7:ASP:HA	1:A:16:VAL:H	12	0.13
(2,122)	1:A:16:VAL:HA	1:A:16:VAL:H	12	0.13
(2,121)	1:A:93:SER:HB2	1:A:93:SER:H	1	0.13
(2,121)	1:A:93:SER:HB3	1:A:93:SER:H	1	0.13
(2,121)	1:A:94:SER:HB3	1:A:93:SER:H	1	0.13
(2,121)	1:A:93:SER:HB2	1:A:93:SER:H	7	0.13
(2,121)	1:A:93:SER:HB3	1:A:93:SER:H	7	0.13
(2,121)	1:A:94:SER:HB3	1:A:93:SER:H	7	0.13
(2,117)	1:A:14:GLN:HB2	1:A:12:ASN:HD21	7	0.13
(2,117)	1:A:14:GLN:HB3	1:A:12:ASN:HD21	7	0.13
(2,117)	1:A:14:GLN:HB2	1:A:12:ASN:HD21	17	0.13
(2,117)	1:A:14:GLN:HB3	1:A:12:ASN:HD21	17	0.13
(2,115)	1:A:80:CYS:H	1:A:81:GLY:H	12	0.13
(2,115)	1:A:85:CYS:H	1:A:81:GLY:H	12	0.13
(2,112)	1:A:83:ILE:HG12	1:A:84:THR:H	11	0.13
(2,112)	1:A:83:ILE:HG13	1:A:84:THR:H	11	0.13
(2,112)	1:A:84:THR:HG1	1:A:84:THR:H	11	0.13
(2,112)	1:A:84:THR:HG21	1:A:84:THR:H	11	0.13
(2,112)	1:A:84:THR:HG22	1:A:84:THR:H	11	0.13
(2,112)	1:A:84:THR:HG23	1:A:84:THR:H	11	0.13
(2,111)	1:A:72:ASP:H	1:A:71:CYS:H	18	0.13
(2,111)	1:A:76:ASP:H	1:A:71:CYS:H	18	0.13
(2,108)	1:A:92:CYS:H	1:A:95:GLY:H	6	0.13
(2,108)	1:A:93:SER:H	1:A:95:GLY:H	6	0.13

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,104)	1:A:63:TRP:HB2	1:A:80:CYS:H	12	0.13
(2,104)	1:A:63:TRP:HB3	1:A:80:CYS:H	12	0.13
(2,104)	1:A:80:CYS:HB3	1:A:80:CYS:H	12	0.13
(2,101)	1:A:37:GLU:HB2	1:A:38:GLN:HE21	9	0.13
(2,101)	1:A:37:GLU:HB3	1:A:38:GLN:HE21	9	0.13
(2,101)	1:A:38:GLN:HB2	1:A:38:GLN:HE21	9	0.13
(2,101)	1:A:38:GLN:HB3	1:A:38:GLN:HE21	9	0.13
(1,96)	1:A:100:ARG:H	1:A:89:GLU:HA	3	0.13
(1,94)	1:A:120:ALA:H	1:A:119:CYS:HB2	10	0.13
(1,94)	1:A:120:ALA:H	1:A:119:CYS:HB3	10	0.13
(1,94)	1:A:120:ALA:H	1:A:119:CYS:HB2	13	0.13
(1,94)	1:A:120:ALA:H	1:A:119:CYS:HB3	13	0.13
(1,928)	1:A:102:PHE:HA	1:A:103:VAL:HG11	9	0.13
(1,928)	1:A:102:PHE:HA	1:A:103:VAL:HG12	9	0.13
(1,928)	1:A:102:PHE:HA	1:A:103:VAL:HG13	9	0.13
(1,921)	1:A:8:PHE:HA	1:A:16:VAL:HG21	7	0.13
(1,921)	1:A:8:PHE:HA	1:A:16:VAL:HG22	7	0.13
(1,921)	1:A:8:PHE:HA	1:A:16:VAL:HG23	7	0.13
(1,906)	1:A:13:GLY:HA2	1:A:12:ASN:HD22	6	0.13
(1,906)	1:A:13:GLY:HA3	1:A:12:ASN:HD22	6	0.13
(1,9)	1:A:12:ASN:H	1:A:11:ASN:H	11	0.13
(1,890)	1:A:81:GLY:HA2	1:A:63:TRP:HE1	17	0.13
(1,890)	1:A:81:GLY:HA2	1:A:63:TRP:HE1	17	0.13
(1,890)	1:A:81:GLY:HA3	1:A:63:TRP:HE1	17	0.13
(1,890)	1:A:81:GLY:HA3	1:A:63:TRP:HE1	17	0.13
(1,882)	1:A:58:CYS:HA	1:A:50:SER:H	8	0.13
(1,882)	1:A:58:CYS:HA	1:A:50:SER:H	17	0.13
(1,876)	1:A:39:CYS:HB2	1:A:43:THR:H	14	0.13
(1,876)	1:A:39:CYS:HB3	1:A:43:THR:H	14	0.13
(1,875)	1:A:38:GLN:HE22	1:A:38:GLN:H	8	0.13
(1,869)	1:A:14:GLN:HE22	1:A:28:CYS:H	19	0.13
(1,867)	1:A:34:GLU:HG2	1:A:24:GLY:H	4	0.13
(1,867)	1:A:34:GLU:HG3	1:A:24:GLY:H	4	0.13
(1,867)	1:A:34:GLU:HG2	1:A:24:GLY:H	11	0.13
(1,867)	1:A:34:GLU:HG3	1:A:24:GLY:H	11	0.13
(1,867)	1:A:34:GLU:HG2	1:A:24:GLY:H	16	0.13
(1,867)	1:A:34:GLU:HG3	1:A:24:GLY:H	16	0.13
(1,862)	1:A:21:LYS:HE2	1:A:19:ARG:H	10	0.13
(1,862)	1:A:21:LYS:HE3	1:A:19:ARG:H	10	0.13
(1,861)	1:A:17:PRO:HD2	1:A:19:ARG:H	8	0.13
(1,861)	1:A:17:PRO:HD3	1:A:19:ARG:H	8	0.13
(1,851)	1:A:32:SER:H	1:A:11:ASN:HD22	19	0.13

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,842)	1:A:80:CYS:HA	1:A:84:THR:H	1	0.13
(1,842)	1:A:80:CYS:HA	1:A:84:THR:H	16	0.13
(1,840)	1:A:71:CYS:HB2	1:A:77:GLU:H	1	0.13
(1,840)	1:A:71:CYS:HB3	1:A:77:GLU:H	1	0.13
(1,840)	1:A:71:CYS:HB2	1:A:77:GLU:H	16	0.13
(1,840)	1:A:71:CYS:HB3	1:A:77:GLU:H	16	0.13
(1,83)	1:A:28:CYS:HB2	1:A:29:GLU:H	9	0.13
(1,83)	1:A:28:CYS:HB3	1:A:29:GLU:H	9	0.13
(1,828)	1:A:85:CYS:HA	1:A:86:SER:H	3	0.13
(1,828)	1:A:85:CYS:HA	1:A:86:SER:H	10	0.13
(1,828)	1:A:85:CYS:HA	1:A:86:SER:H	19	0.13
(1,813)	1:A:107:GLN:HE21	1:A:108:ASP:HA	11	0.13
(1,811)	1:A:107:GLN:H	1:A:105:ASN:HD21	12	0.13
(1,810)	1:A:101:ASN:HD21	1:A:105:ASN:HD22	12	0.13
(1,809)	1:A:106:GLY:H	1:A:104:CYS:H	19	0.13
(1,808)	1:A:116:GLU:HB2	1:A:104:CYS:H	14	0.13
(1,808)	1:A:116:GLU:HB3	1:A:104:CYS:H	14	0.13
(1,806)	1:A:101:ASN:HD21	1:A:102:PHE:H	12	0.13
(1,806)	1:A:101:ASN:HD21	1:A:102:PHE:H	13	0.13
(1,800)	1:A:85:CYS:HB2	1:A:98:ILE:H	8	0.13
(1,800)	1:A:85:CYS:HB3	1:A:98:ILE:H	8	0.13
(1,799)	1:A:85:CYS:HA	1:A:97:CYS:H	11	0.13
(1,798)	1:A:85:CYS:HB2	1:A:97:CYS:H	18	0.13
(1,798)	1:A:85:CYS:HB3	1:A:97:CYS:H	18	0.13
(1,792)	1:A:97:CYS:HB2	1:A:91:THR:H	1	0.13
(1,792)	1:A:97:CYS:HB3	1:A:91:THR:H	1	0.13
(1,788)	1:A:80:CYS:H	1:A:78:GLU:H	9	0.13
(1,788)	1:A:80:CYS:H	1:A:78:GLU:H	11	0.13
(1,784)	1:A:71:CYS:HB2	1:A:76:ASP:H	18	0.13
(1,784)	1:A:71:CYS:HB3	1:A:76:ASP:H	18	0.13
(1,777)	1:A:77:GLU:HB2	1:A:70:ASP:H	11	0.13
(1,777)	1:A:77:GLU:HB3	1:A:70:ASP:H	11	0.13
(1,776)	1:A:77:GLU:HG2	1:A:70:ASP:H	1	0.13
(1,776)	1:A:77:GLU:HG3	1:A:70:ASP:H	1	0.13
(1,761)	1:A:72:ASP:H	1:A:57:GLN:HE21	4	0.13
(1,745)	1:A:48:GLU:HB2	1:A:49:ILE:H	1	0.13
(1,745)	1:A:48:GLU:HB3	1:A:49:ILE:H	1	0.13
(1,745)	1:A:48:GLU:HB2	1:A:49:ILE:H	17	0.13
(1,745)	1:A:48:GLU:HB3	1:A:49:ILE:H	17	0.13
(1,744)	1:A:48:GLU:H	1:A:47:HIS:H	8	0.13
(1,74)	1:A:65:CYS:H	1:A:65:CYS:HB2	3	0.13
(1,74)	1:A:65:CYS:H	1:A:65:CYS:HB3	3	0.13

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,734)	1:A:32:SER:H	1:A:11:ASN:H	4	0.13
(1,726)	1:A:34:GLU:HG2	1:A:27:ASP:H	11	0.13
(1,726)	1:A:34:GLU:HG3	1:A:27:ASP:H	11	0.13
(1,724)	1:A:34:GLU:HB2	1:A:25:ASP:H	5	0.13
(1,724)	1:A:34:GLU:HB3	1:A:25:ASP:H	5	0.13
(1,718)	1:A:16:VAL:HB	1:A:20:TRP:HE1	1	0.13
(1,718)	1:A:16:VAL:HB	1:A:20:TRP:HE1	9	0.13
(1,717)	1:A:20:TRP:HE1	1:A:20:TRP:H	4	0.13
(1,717)	1:A:20:TRP:HE1	1:A:20:TRP:H	14	0.13
(1,717)	1:A:20:TRP:HE1	1:A:20:TRP:H	18	0.13
(1,716)	1:A:28:CYS:HB2	1:A:14:GLN:HE22	4	0.13
(1,716)	1:A:28:CYS:HB3	1:A:14:GLN:HE22	4	0.13
(1,712)	1:A:32:SER:H	1:A:11:ASN:H	4	0.13
(1,709)	1:A:45:ARG:HD2	1:A:45:ARG:H	16	0.13
(1,709)	1:A:45:ARG:HD3	1:A:45:ARG:H	16	0.13
(1,707)	1:A:45:ARG:HD2	1:A:45:ARG:H	16	0.13
(1,707)	1:A:45:ARG:HD3	1:A:45:ARG:H	16	0.13
(1,705)	1:A:100:ARG:H	1:A:100:ARG:HD2	12	0.13
(1,705)	1:A:100:ARG:H	1:A:100:ARG:HD3	12	0.13
(1,705)	1:A:100:ARG:H	1:A:100:ARG:HD2	18	0.13
(1,705)	1:A:100:ARG:H	1:A:100:ARG:HD3	18	0.13
(1,7)	1:A:22:CYS:H	1:A:23:ASP:H	3	0.13
(1,7)	1:A:22:CYS:H	1:A:23:ASP:H	6	0.13
(1,7)	1:A:22:CYS:H	1:A:23:ASP:H	7	0.13
(1,7)	1:A:22:CYS:H	1:A:23:ASP:H	19	0.13
(1,699)	1:A:64:ARG:HD2	1:A:64:ARG:H	18	0.13
(1,699)	1:A:64:ARG:HD3	1:A:64:ARG:H	18	0.13
(1,698)	1:A:64:ARG:H	1:A:64:ARG:HG2	4	0.13
(1,698)	1:A:64:ARG:H	1:A:64:ARG:HG3	4	0.13
(1,694)	1:A:21:LYS:HE2	1:A:21:LYS:H	8	0.13
(1,694)	1:A:21:LYS:HE3	1:A:21:LYS:H	8	0.13
(1,69)	1:A:78:GLU:HG2	1:A:78:GLU:H	13	0.13
(1,69)	1:A:78:GLU:HG3	1:A:78:GLU:H	13	0.13
(1,679)	1:A:78:GLU:HG2	1:A:79:ASN:HD22	13	0.13
(1,679)	1:A:78:GLU:HG3	1:A:79:ASN:HD22	13	0.13
(1,67)	1:A:19:ARG:H	1:A:18:SER:H	19	0.13
(1,658)	1:A:102:PHE:HA	1:A:105:ASN:HD22	20	0.13
(1,639)	1:A:82:ASN:H	1:A:82:ASN:HD21	16	0.13
(1,631)	1:A:79:ASN:HD22	1:A:79:ASN:H	20	0.13
(1,63)	1:A:39:CYS:H	1:A:40:HIS:H	10	0.13
(1,63)	1:A:39:CYS:H	1:A:40:HIS:H	14	0.13
(1,627)	1:A:72:ASP:HA	1:A:57:GLN:HE22	18	0.13

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,612)	1:A:15:CYS:H	1:A:14:GLN:HE22	7	0.13
(1,610)	1:A:14:GLN:HE22	1:A:29:GLU:H	12	0.13
(1,603)	1:A:32:SER:HB2	1:A:11:ASN:HD22	1	0.13
(1,603)	1:A:32:SER:HB3	1:A:11:ASN:HD22	1	0.13
(1,603)	1:A:32:SER:HB2	1:A:11:ASN:HD22	20	0.13
(1,603)	1:A:32:SER:HB3	1:A:11:ASN:HD22	20	0.13
(1,601)	1:A:11:ASN:H	1:A:11:ASN:HD22	1	0.13
(1,6)	1:A:23:ASP:H	1:A:24:GLY:H	17	0.13
(1,596)	1:A:74:GLY:HA2	1:A:69:ASN:HD21	2	0.13
(1,596)	1:A:74:GLY:HA3	1:A:69:ASN:HD21	2	0.13
(1,59)	1:A:65:CYS:H	1:A:66:ASP:H	10	0.13
(1,59)	1:A:65:CYS:H	1:A:66:ASP:H	14	0.13
(1,585)	1:A:28:CYS:H	1:A:27:ASP:H	6	0.13
(1,585)	1:A:28:CYS:H	1:A:27:ASP:H	8	0.13
(1,585)	1:A:28:CYS:H	1:A:27:ASP:H	9	0.13
(1,580)	1:A:48:GLU:HG2	1:A:49:ILE:H	3	0.13
(1,580)	1:A:48:GLU:HG3	1:A:49:ILE:H	3	0.13
(1,580)	1:A:48:GLU:HG2	1:A:49:ILE:H	11	0.13
(1,580)	1:A:48:GLU:HG3	1:A:49:ILE:H	11	0.13
(1,57)	1:A:66:ASP:H	1:A:67:GLY:H	14	0.13
(1,562)	1:A:102:PHE:HB2	1:A:99:SER:H	3	0.13
(1,562)	1:A:102:PHE:HB3	1:A:99:SER:H	3	0.13
(1,560)	1:A:90:PHE:H	1:A:99:SER:H	3	0.13
(1,560)	1:A:90:PHE:H	1:A:99:SER:H	20	0.13
(1,56)	1:A:70:ASP:H	1:A:71:CYS:H	9	0.13
(1,551)	1:A:104:CYS:HB2	1:A:104:CYS:H	1	0.13
(1,551)	1:A:104:CYS:HB3	1:A:104:CYS:H	1	0.13
(1,551)	1:A:104:CYS:HB2	1:A:104:CYS:H	3	0.13
(1,551)	1:A:104:CYS:HB3	1:A:104:CYS:H	3	0.13
(1,550)	1:A:104:CYS:HB2	1:A:104:CYS:H	1	0.13
(1,550)	1:A:104:CYS:HB3	1:A:104:CYS:H	1	0.13
(1,550)	1:A:104:CYS:HB2	1:A:104:CYS:H	3	0.13
(1,550)	1:A:104:CYS:HB3	1:A:104:CYS:H	3	0.13
(1,547)	1:A:104:CYS:HB2	1:A:105:ASN:H	2	0.13
(1,547)	1:A:104:CYS:HB3	1:A:105:ASN:H	2	0.13
(1,547)	1:A:104:CYS:HB2	1:A:105:ASN:H	9	0.13
(1,547)	1:A:104:CYS:HB3	1:A:105:ASN:H	9	0.13
(1,547)	1:A:104:CYS:HB2	1:A:105:ASN:H	16	0.13
(1,547)	1:A:104:CYS:HB3	1:A:105:ASN:H	16	0.13
(1,541)	1:A:115:ASP:HB2	1:A:116:GLU:H	16	0.13
(1,541)	1:A:115:ASP:HB3	1:A:116:GLU:H	16	0.13
(1,516)	1:A:49:ILE:H	1:A:59:ILE:H	4	0.13

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,509)	1:A:46:ILE:HA	1:A:46:ILE:H	14	0.13
(1,501)	1:A:34:GLU:HB2	1:A:34:GLU:H	15	0.13
(1,501)	1:A:34:GLU:HB3	1:A:34:GLU:H	15	0.13
(1,496)	1:A:31:GLY:HA2	1:A:31:GLY:H	4	0.13
(1,496)	1:A:31:GLY:HA3	1:A:31:GLY:H	4	0.13
(1,496)	1:A:31:GLY:HA2	1:A:31:GLY:H	10	0.13
(1,496)	1:A:31:GLY:HA3	1:A:31:GLY:H	10	0.13
(1,496)	1:A:31:GLY:HA2	1:A:31:GLY:H	15	0.13
(1,496)	1:A:31:GLY:HA3	1:A:31:GLY:H	15	0.13
(1,496)	1:A:31:GLY:HA2	1:A:31:GLY:H	17	0.13
(1,496)	1:A:31:GLY:HA3	1:A:31:GLY:H	17	0.13
(1,495)	1:A:31:GLY:H	1:A:29:GLU:H	11	0.13
(1,49)	1:A:94:SER:H	1:A:93:SER:H	4	0.13
(1,49)	1:A:94:SER:H	1:A:93:SER:H	10	0.13
(1,482)	1:A:11:ASN:HD21	1:A:11:ASN:H	12	0.13
(1,479)	1:A:9:VAL:HG11	1:A:9:VAL:H	18	0.13
(1,479)	1:A:9:VAL:HG12	1:A:9:VAL:H	18	0.13
(1,479)	1:A:9:VAL:HG13	1:A:9:VAL:H	18	0.13
(1,479)	1:A:9:VAL:HG21	1:A:9:VAL:H	18	0.13
(1,479)	1:A:9:VAL:HG22	1:A:9:VAL:H	18	0.13
(1,479)	1:A:9:VAL:HG23	1:A:9:VAL:H	18	0.13
(1,478)	1:A:9:VAL:HB	1:A:9:VAL:H	18	0.13
(1,475)	1:A:75:GLU:H	1:A:76:ASP:H	3	0.13
(1,475)	1:A:75:GLU:H	1:A:76:ASP:H	13	0.13
(1,473)	1:A:85:CYS:H	1:A:86:SER:H	8	0.13
(1,473)	1:A:85:CYS:H	1:A:86:SER:H	11	0.13
(1,473)	1:A:85:CYS:H	1:A:86:SER:H	12	0.13
(1,466)	1:A:80:CYS:HA	1:A:79:ASN:H	11	0.13
(1,462)	1:A:79:ASN:H	1:A:78:GLU:H	2	0.13
(1,462)	1:A:79:ASN:H	1:A:78:GLU:H	3	0.13
(1,462)	1:A:79:ASN:H	1:A:78:GLU:H	6	0.13
(1,462)	1:A:79:ASN:H	1:A:78:GLU:H	10	0.13
(1,462)	1:A:79:ASN:H	1:A:78:GLU:H	16	0.13
(1,462)	1:A:79:ASN:H	1:A:78:GLU:H	20	0.13
(1,451)	1:A:75:GLU:H	1:A:76:ASP:H	3	0.13
(1,451)	1:A:75:GLU:H	1:A:76:ASP:H	13	0.13
(1,444)	1:A:76:ASP:H	1:A:74:GLY:H	4	0.13
(1,443)	1:A:73:SER:H	1:A:71:CYS:HB2	4	0.13
(1,443)	1:A:73:SER:H	1:A:71:CYS:HB3	4	0.13
(1,443)	1:A:73:SER:H	1:A:71:CYS:HB2	7	0.13
(1,443)	1:A:73:SER:H	1:A:71:CYS:HB3	7	0.13
(1,437)	1:A:72:ASP:H	1:A:71:CYS:H	2	0.13

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,437)	1:A:72:ASP:H	1:A:71:CYS:H	19	0.13
(1,435)	1:A:72:ASP:HA	1:A:72:ASP:H	3	0.13
(1,435)	1:A:72:ASP:HA	1:A:72:ASP:H	13	0.13
(1,435)	1:A:72:ASP:HA	1:A:72:ASP:H	19	0.13
(1,432)	1:A:70:ASP:HB2	1:A:70:ASP:H	20	0.13
(1,432)	1:A:70:ASP:HB3	1:A:70:ASP:H	20	0.13
(1,419)	1:A:65:CYS:HB2	1:A:66:ASP:H	14	0.13
(1,419)	1:A:65:CYS:HB3	1:A:66:ASP:H	14	0.13
(1,418)	1:A:64:ARG:HA	1:A:66:ASP:H	13	0.13
(1,409)	1:A:60:PRO:HA	1:A:61:VAL:H	3	0.13
(1,399)	1:A:54:HIS:H	1:A:53:ALA:HB1	13	0.13
(1,399)	1:A:54:HIS:H	1:A:53:ALA:HB2	13	0.13
(1,399)	1:A:54:HIS:H	1:A:53:ALA:HB3	13	0.13
(1,392)	1:A:52:GLY:HA2	1:A:53:ALA:H	2	0.13
(1,392)	1:A:52:GLY:HA3	1:A:53:ALA:H	2	0.13
(1,392)	1:A:52:GLY:HA2	1:A:53:ALA:H	6	0.13
(1,392)	1:A:52:GLY:HA3	1:A:53:ALA:H	6	0.13
(1,392)	1:A:52:GLY:HA2	1:A:53:ALA:H	7	0.13
(1,392)	1:A:52:GLY:HA3	1:A:53:ALA:H	7	0.13
(1,392)	1:A:52:GLY:HA2	1:A:53:ALA:H	17	0.13
(1,392)	1:A:52:GLY:HA3	1:A:53:ALA:H	17	0.13
(1,390)	1:A:51:CYS:HB2	1:A:52:GLY:H	18	0.13
(1,390)	1:A:51:CYS:HB3	1:A:52:GLY:H	18	0.13
(1,387)	1:A:51:CYS:H	1:A:51:CYS:HB2	8	0.13
(1,387)	1:A:51:CYS:H	1:A:51:CYS:HB3	8	0.13
(1,383)	1:A:51:CYS:H	1:A:50:SER:HA	9	0.13
(1,383)	1:A:51:CYS:H	1:A:50:SER:HA	19	0.13
(1,378)	1:A:48:GLU:HG2	1:A:49:ILE:H	3	0.13
(1,378)	1:A:48:GLU:HG3	1:A:49:ILE:H	3	0.13
(1,378)	1:A:48:GLU:HG2	1:A:49:ILE:H	11	0.13
(1,378)	1:A:48:GLU:HG3	1:A:49:ILE:H	11	0.13
(1,377)	1:A:60:PRO:HA	1:A:49:ILE:H	6	0.13
(1,372)	1:A:48:GLU:H	1:A:48:GLU:HA	14	0.13
(1,372)	1:A:48:GLU:H	1:A:48:GLU:HA	18	0.13
(1,369)	1:A:43:THR:HB	1:A:44:CYS:H	8	0.13
(1,367)	1:A:42:ARG:HG2	1:A:43:THR:H	19	0.13
(1,367)	1:A:42:ARG:HG2	1:A:43:THR:H	19	0.13
(1,367)	1:A:42:ARG:HG3	1:A:43:THR:H	19	0.13
(1,367)	1:A:42:ARG:HG3	1:A:43:THR:H	19	0.13
(1,359)	1:A:40:HIS:H	1:A:40:HIS:HB2	11	0.13
(1,359)	1:A:40:HIS:H	1:A:40:HIS:HB3	11	0.13
(1,357)	1:A:40:HIS:H	1:A:39:CYS:HA	12	0.13

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,357)	1:A:40:HIS:H	1:A:39:CYS:HA	16	0.13
(1,350)	1:A:31:GLY:H	1:A:32:SER:H	11	0.13
(1,335)	1:A:45:ARG:HD2	1:A:24:GLY:H	13	0.13
(1,335)	1:A:45:ARG:HD3	1:A:24:GLY:H	13	0.13
(1,329)	1:A:25:ASP:H	1:A:23:ASP:H	12	0.13
(1,320)	1:A:7:ASP:HA	1:A:18:SER:H	4	0.13
(1,312)	1:A:14:GLN:HG2	1:A:14:GLN:H	2	0.13
(1,312)	1:A:14:GLN:HG3	1:A:14:GLN:H	2	0.13
(1,308)	1:A:13:GLY:H	1:A:14:GLN:H	16	0.13
(1,302)	1:A:14:GLN:H	1:A:12:ASN:H	4	0.13
(1,302)	1:A:14:GLN:H	1:A:12:ASN:H	6	0.13
(1,295)	1:A:15:CYS:HA	1:A:10:CYS:H	2	0.13
(1,295)	1:A:15:CYS:HA	1:A:10:CYS:H	9	0.13
(1,290)	1:A:8:PHE:HA	1:A:9:VAL:H	3	0.13
(1,290)	1:A:8:PHE:HA	1:A:9:VAL:H	18	0.13
(1,290)	1:A:8:PHE:HA	1:A:9:VAL:H	19	0.13
(1,287)	1:A:7:ASP:H	1:A:4:ALA:HB1	17	0.13
(1,287)	1:A:7:ASP:H	1:A:4:ALA:HB2	17	0.13
(1,287)	1:A:7:ASP:H	1:A:4:ALA:HB3	17	0.13
(1,280)	1:A:5:GLU:HG2	1:A:6:SER:H	2	0.13
(1,280)	1:A:5:GLU:HG2	1:A:6:SER:H	2	0.13
(1,280)	1:A:5:GLU:HG3	1:A:6:SER:H	2	0.13
(1,280)	1:A:5:GLU:HG3	1:A:6:SER:H	2	0.13
(1,279)	1:A:6:SER:HB2	1:A:6:SER:H	18	0.13
(1,279)	1:A:6:SER:HB3	1:A:6:SER:H	18	0.13
(1,279)	1:A:6:SER:HB2	1:A:6:SER:H	19	0.13
(1,279)	1:A:6:SER:HB3	1:A:6:SER:H	19	0.13
(1,277)	1:A:6:SER:HB2	1:A:6:SER:H	18	0.13
(1,277)	1:A:6:SER:HB3	1:A:6:SER:H	18	0.13
(1,277)	1:A:6:SER:HB2	1:A:6:SER:H	19	0.13
(1,277)	1:A:6:SER:HB3	1:A:6:SER:H	19	0.13
(1,257)	1:A:82:ASN:HB2	1:A:82:ASN:H	9	0.13
(1,257)	1:A:82:ASN:HB2	1:A:82:ASN:H	9	0.13
(1,257)	1:A:82:ASN:HB3	1:A:82:ASN:H	9	0.13
(1,257)	1:A:82:ASN:HB3	1:A:82:ASN:H	9	0.13
(1,257)	1:A:82:ASN:HB2	1:A:82:ASN:H	20	0.13
(1,257)	1:A:82:ASN:HB2	1:A:82:ASN:H	20	0.13
(1,257)	1:A:82:ASN:HB3	1:A:82:ASN:H	20	0.13
(1,257)	1:A:82:ASN:HB3	1:A:82:ASN:H	20	0.13
(1,248)	1:A:83:ILE:HB	1:A:84:THR:H	4	0.13
(1,247)	1:A:83:ILE:HA	1:A:84:THR:H	19	0.13
(1,241)	1:A:86:SER:H	1:A:89:GLU:H	12	0.13

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,241)	1:A:86:SER:H	1:A:89:GLU:H	16	0.13
(1,240)	1:A:90:PHE:H	1:A:98:ILE:HD11	6	0.13
(1,240)	1:A:90:PHE:H	1:A:98:ILE:HD12	6	0.13
(1,240)	1:A:90:PHE:H	1:A:98:ILE:HD13	6	0.13
(1,240)	1:A:90:PHE:H	1:A:98:ILE:HD11	15	0.13
(1,240)	1:A:90:PHE:H	1:A:98:ILE:HD12	15	0.13
(1,240)	1:A:90:PHE:H	1:A:98:ILE:HD13	15	0.13
(1,226)	1:A:92:CYS:HB2	1:A:94:SER:H	3	0.13
(1,226)	1:A:92:CYS:HB3	1:A:94:SER:H	3	0.13
(1,226)	1:A:92:CYS:HB2	1:A:94:SER:H	14	0.13
(1,226)	1:A:92:CYS:HB3	1:A:94:SER:H	14	0.13
(1,222)	1:A:92:CYS:HB2	1:A:95:GLY:H	10	0.13
(1,222)	1:A:92:CYS:HB3	1:A:95:GLY:H	10	0.13
(1,22)	1:A:91:THR:H	1:A:92:CYS:H	1	0.13
(1,196)	1:A:98:ILE:HA	1:A:99:SER:H	4	0.13
(1,196)	1:A:98:ILE:HA	1:A:99:SER:H	6	0.13
(1,190)	1:A:101:ASN:HB2	1:A:101:ASN:H	4	0.13
(1,190)	1:A:101:ASN:HB3	1:A:101:ASN:H	4	0.13
(1,180)	1:A:99:SER:HB2	1:A:102:PHE:H	18	0.13
(1,180)	1:A:99:SER:HB3	1:A:102:PHE:H	18	0.13
(1,15)	1:A:109:ASP:H	1:A:110:CYS:H	14	0.13
(1,143)	1:A:106:GLY:H	1:A:107:GLN:H	8	0.13
(1,128)	1:A:114:SER:HA	1:A:114:SER:H	13	0.13
(1,128)	1:A:114:SER:HA	1:A:114:SER:H	20	0.13
(1,127)	1:A:114:SER:H	1:A:114:SER:HB2	12	0.13
(1,127)	1:A:114:SER:H	1:A:114:SER:HB3	12	0.13
(1,126)	1:A:117:LEU:HD11	1:A:114:SER:H	4	0.13
(1,126)	1:A:117:LEU:HD12	1:A:114:SER:H	4	0.13
(1,126)	1:A:117:LEU:HD13	1:A:114:SER:H	4	0.13
(1,126)	1:A:117:LEU:HD21	1:A:114:SER:H	4	0.13
(1,126)	1:A:117:LEU:HD22	1:A:114:SER:H	4	0.13
(1,126)	1:A:117:LEU:HD23	1:A:114:SER:H	4	0.13
(1,116)	1:A:116:GLU:HG2	1:A:116:GLU:H	17	0.13
(1,116)	1:A:116:GLU:HG3	1:A:116:GLU:H	17	0.13
(1,1)	1:A:112:ASP:H	1:A:113:GLY:H	17	0.13
(4,7)	1:A:8:PHE:H	1:A:16:VAL:O	19	0.12
(4,2)	1:A:90:PHE:O	1:A:98:ILE:H	5	0.12
(3,9)	2:A:202:CA:CA	1:A:68:GLU:O	6	0.12
(3,7)	2:A:202:CA:CA	1:A:63:TRP:O	4	0.12
(2,9)	1:A:51:CYS:HB2	1:A:72:ASP:H	5	0.12
(2,9)	1:A:51:CYS:HB3	1:A:72:ASP:H	5	0.12
(2,9)	1:A:71:CYS:HB3	1:A:72:ASP:H	5	0.12

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,8)	1:A:24:GLY:HA2	1:A:46:ILE:H	12	0.12
(2,8)	1:A:24:GLY:HA3	1:A:46:ILE:H	12	0.12
(2,8)	1:A:45:ARG:HA	1:A:46:ILE:H	12	0.12
(2,61)	1:A:4:ALA:HA	1:A:5:GLU:H	20	0.12
(2,61)	1:A:6:SER:HA	1:A:5:GLU:H	20	0.12
(2,54)	1:A:17:PRO:HB2	1:A:18:SER:H	9	0.12
(2,54)	1:A:17:PRO:HB3	1:A:18:SER:H	9	0.12
(2,54)	1:A:17:PRO:HG2	1:A:18:SER:H	9	0.12
(2,54)	1:A:17:PRO:HG3	1:A:18:SER:H	9	0.12
(2,46)	1:A:114:SER:HG	1:A:115:ASP:H	1	0.12
(2,46)	1:A:116:GLU:HA	1:A:115:ASP:H	1	0.12
(2,46)	1:A:119:CYS:HA	1:A:115:ASP:H	1	0.12
(2,44)	1:A:83:ILE:HD11	1:A:97:CYS:H	13	0.12
(2,44)	1:A:83:ILE:HD12	1:A:97:CYS:H	13	0.12
(2,44)	1:A:83:ILE:HD13	1:A:97:CYS:H	13	0.12
(2,44)	1:A:83:ILE:HG21	1:A:97:CYS:H	13	0.12
(2,44)	1:A:83:ILE:HG22	1:A:97:CYS:H	13	0.12
(2,44)	1:A:83:ILE:HG23	1:A:97:CYS:H	13	0.12
(2,44)	1:A:83:ILE:HD11	1:A:97:CYS:H	17	0.12
(2,44)	1:A:83:ILE:HD12	1:A:97:CYS:H	17	0.12
(2,44)	1:A:83:ILE:HD13	1:A:97:CYS:H	17	0.12
(2,44)	1:A:83:ILE:HG21	1:A:97:CYS:H	17	0.12
(2,44)	1:A:83:ILE:HG22	1:A:97:CYS:H	17	0.12
(2,44)	1:A:83:ILE:HG23	1:A:97:CYS:H	17	0.12
(2,42)	1:A:49:ILE:HG21	1:A:61:VAL:H	15	0.12
(2,42)	1:A:49:ILE:HG22	1:A:61:VAL:H	15	0.12
(2,42)	1:A:49:ILE:HG23	1:A:61:VAL:H	15	0.12
(2,42)	1:A:59:ILE:HD11	1:A:61:VAL:H	15	0.12
(2,42)	1:A:59:ILE:HD12	1:A:61:VAL:H	15	0.12
(2,42)	1:A:59:ILE:HD13	1:A:61:VAL:H	15	0.12
(2,42)	1:A:60:PRO:HB2	1:A:61:VAL:H	15	0.12
(2,42)	1:A:60:PRO:HB3	1:A:61:VAL:H	15	0.12
(2,42)	1:A:61:VAL:HG11	1:A:61:VAL:H	15	0.12
(2,42)	1:A:61:VAL:HG12	1:A:61:VAL:H	15	0.12
(2,42)	1:A:61:VAL:HG13	1:A:61:VAL:H	15	0.12
(2,42)	1:A:61:VAL:HG21	1:A:61:VAL:H	15	0.12
(2,42)	1:A:61:VAL:HG22	1:A:61:VAL:H	15	0.12
(2,42)	1:A:61:VAL:HG23	1:A:61:VAL:H	15	0.12
(2,382)	1:A:72:ASP:HB2	1:A:73:SER:H	15	0.12
(2,382)	1:A:72:ASP:HB3	1:A:73:SER:H	15	0.12
(2,376)	1:A:61:VAL:HB	1:A:88:ASP:H	5	0.12
(2,376)	1:A:62:SER:H	1:A:88:ASP:H	5	0.12

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,376)	1:A:87:PRO:HB2	1:A:88:ASP:H	5	0.12
(2,376)	1:A:87:PRO:HB3	1:A:88:ASP:H	5	0.12
(2,374)	1:A:20:TRP:HA	1:A:23:ASP:H	16	0.12
(2,374)	1:A:25:ASP:HA	1:A:23:ASP:H	16	0.12
(2,367)	1:A:35:SER:HB2	1:A:37:GLU:H	16	0.12
(2,367)	1:A:35:SER:HB3	1:A:37:GLU:H	16	0.12
(2,367)	1:A:36:PRO:HA	1:A:37:GLU:H	16	0.12
(2,365)	1:A:69:ASN:HA	1:A:70:ASP:H	5	0.12
(2,365)	1:A:70:ASP:HA	1:A:70:ASP:H	5	0.12
(2,365)	1:A:69:ASN:HA	1:A:70:ASP:H	7	0.12
(2,365)	1:A:70:ASP:HA	1:A:70:ASP:H	7	0.12
(2,35)	1:A:110:CYS:HB2	1:A:112:ASP:H	20	0.12
(2,35)	1:A:110:CYS:HB3	1:A:112:ASP:H	20	0.12
(2,35)	1:A:111:SER:HB2	1:A:112:ASP:H	20	0.12
(2,35)	1:A:111:SER:HB3	1:A:112:ASP:H	20	0.12
(2,35)	1:A:113:GLY:HA2	1:A:112:ASP:H	20	0.12
(2,35)	1:A:113:GLY:HA3	1:A:112:ASP:H	20	0.12
(2,348)	1:A:35:SER:HB2	1:A:35:SER:H	15	0.12
(2,348)	1:A:35:SER:HB3	1:A:35:SER:H	15	0.12
(2,348)	1:A:36:PRO:HA	1:A:35:SER:H	15	0.12
(2,348)	1:A:35:SER:HB2	1:A:35:SER:H	16	0.12
(2,348)	1:A:35:SER:HB3	1:A:35:SER:H	16	0.12
(2,348)	1:A:36:PRO:HA	1:A:35:SER:H	16	0.12
(2,345)	1:A:84:THR:HG1	1:A:85:CYS:H	1	0.12
(2,345)	1:A:84:THR:HG21	1:A:85:CYS:H	1	0.12
(2,345)	1:A:84:THR:HG22	1:A:85:CYS:H	1	0.12
(2,345)	1:A:84:THR:HG23	1:A:85:CYS:H	1	0.12
(2,345)	1:A:91:THR:HG21	1:A:85:CYS:H	1	0.12
(2,345)	1:A:91:THR:HG22	1:A:85:CYS:H	1	0.12
(2,345)	1:A:91:THR:HG23	1:A:85:CYS:H	1	0.12
(2,341)	1:A:78:GLU:HG2	1:A:78:GLU:H	3	0.12
(2,341)	1:A:78:GLU:HG3	1:A:78:GLU:H	3	0.12
(2,341)	1:A:87:PRO:HB2	1:A:78:GLU:H	3	0.12
(2,341)	1:A:87:PRO:HB3	1:A:78:GLU:H	3	0.12
(2,331)	1:A:2:THR:H	1:A:99:SER:H	6	0.12
(2,331)	1:A:3:CYS:H	1:A:99:SER:H	6	0.12
(2,331)	1:A:80:CYS:H	1:A:99:SER:H	6	0.12
(2,331)	1:A:81:GLY:H	1:A:99:SER:H	6	0.12
(2,331)	1:A:101:ASN:H	1:A:99:SER:H	6	0.12
(2,328)	1:A:49:ILE:HG21	1:A:62:SER:H	7	0.12
(2,328)	1:A:49:ILE:HG22	1:A:62:SER:H	7	0.12
(2,328)	1:A:49:ILE:HG23	1:A:62:SER:H	7	0.12

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,328)	1:A:59:ILE:HD11	1:A:62:SER:H	7	0.12
(2,328)	1:A:59:ILE:HD12	1:A:62:SER:H	7	0.12
(2,328)	1:A:59:ILE:HD13	1:A:62:SER:H	7	0.12
(2,328)	1:A:60:PRO:HB2	1:A:62:SER:H	7	0.12
(2,328)	1:A:60:PRO:HB3	1:A:62:SER:H	7	0.12
(2,328)	1:A:61:VAL:HG11	1:A:62:SER:H	7	0.12
(2,328)	1:A:61:VAL:HG12	1:A:62:SER:H	7	0.12
(2,328)	1:A:61:VAL:HG13	1:A:62:SER:H	7	0.12
(2,328)	1:A:61:VAL:HG21	1:A:62:SER:H	7	0.12
(2,328)	1:A:61:VAL:HG21	1:A:62:SER:H	7	0.12
(2,328)	1:A:61:VAL:HG22	1:A:62:SER:H	7	0.12
(2,328)	1:A:61:VAL:HG22	1:A:62:SER:H	7	0.12
(2,328)	1:A:61:VAL:HG23	1:A:62:SER:H	7	0.12
(2,328)	1:A:61:VAL:HG23	1:A:62:SER:H	7	0.12
(2,318)	1:A:99:SER:HB2	1:A:100:ARG:H	4	0.12
(2,318)	1:A:99:SER:HB3	1:A:100:ARG:H	4	0.12
(2,318)	1:A:100:ARG:HD2	1:A:100:ARG:H	4	0.12
(2,318)	1:A:100:ARG:HD3	1:A:100:ARG:H	4	0.12
(2,312)	1:A:73:SER:HB2	1:A:73:SER:H	19	0.12
(2,312)	1:A:73:SER:HB3	1:A:73:SER:H	19	0.12
(2,312)	1:A:74:GLY:HA2	1:A:73:SER:H	19	0.12
(2,312)	1:A:74:GLY:HA3	1:A:73:SER:H	19	0.12
(2,305)	1:A:72:ASP:HB2	1:A:72:ASP:H	12	0.12
(2,305)	1:A:72:ASP:HB3	1:A:72:ASP:H	12	0.12
(2,305)	1:A:72:ASP:HB3	1:A:72:ASP:H	12	0.12
(2,305)	1:A:76:ASP:HB2	1:A:72:ASP:H	12	0.12
(2,305)	1:A:76:ASP:HB2	1:A:72:ASP:H	12	0.12
(2,305)	1:A:76:ASP:HB3	1:A:72:ASP:H	12	0.12
(2,28)	1:A:89:GLU:HA	1:A:99:SER:H	4	0.12
(2,28)	1:A:99:SER:HG	1:A:99:SER:H	4	0.12
(2,28)	1:A:102:PHE:HA	1:A:99:SER:H	4	0.12
(2,272)	1:A:19:ARG:HD2	1:A:19:ARG:H	19	0.12
(2,272)	1:A:19:ARG:HD3	1:A:19:ARG:H	19	0.12
(2,272)	1:A:20:TRP:HB2	1:A:19:ARG:H	19	0.12
(2,272)	1:A:20:TRP:HB3	1:A:19:ARG:H	19	0.12
(2,257)	1:A:32:SER:HB2	1:A:38:GLN:HE22	6	0.12
(2,257)	1:A:32:SER:HB3	1:A:38:GLN:HE22	6	0.12
(2,257)	1:A:33:ASP:HA	1:A:38:GLN:HE22	6	0.12
(2,257)	1:A:35:SER:HB2	1:A:38:GLN:HE22	6	0.12
(2,257)	1:A:35:SER:HB3	1:A:38:GLN:HE22	6	0.12
(2,257)	1:A:32:SER:HB2	1:A:38:GLN:HE22	12	0.12
(2,257)	1:A:32:SER:HB3	1:A:38:GLN:HE22	12	0.12

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,257)	1:A:33:ASP:HA	1:A:38:GLN:HE22	12	0.12
(2,257)	1:A:35:SER:HB2	1:A:38:GLN:HE22	12	0.12
(2,257)	1:A:35:SER:HB3	1:A:38:GLN:HE22	12	0.12
(2,24)	1:A:11:ASN:HB2	1:A:11:ASN:H	13	0.12
(2,24)	1:A:11:ASN:HB3	1:A:11:ASN:H	13	0.12
(2,24)	1:A:12:ASN:HB2	1:A:11:ASN:H	13	0.12
(2,238)	1:A:10:CYS:HB2	1:A:11:ASN:H	6	0.12
(2,238)	1:A:10:CYS:HB3	1:A:11:ASN:H	6	0.12
(2,238)	1:A:11:ASN:HB2	1:A:11:ASN:H	6	0.12
(2,238)	1:A:11:ASN:HB3	1:A:11:ASN:H	6	0.12
(2,238)	1:A:28:CYS:HB2	1:A:11:ASN:H	6	0.12
(2,238)	1:A:28:CYS:HB3	1:A:11:ASN:H	6	0.12
(2,236)	1:A:19:ARG:HB2	1:A:21:LYS:H	3	0.12
(2,236)	1:A:19:ARG:HB3	1:A:21:LYS:H	3	0.12
(2,236)	1:A:21:LYS:HB2	1:A:21:LYS:H	3	0.12
(2,236)	1:A:21:LYS:HB3	1:A:21:LYS:H	3	0.12
(2,236)	1:A:19:ARG:HB2	1:A:21:LYS:H	7	0.12
(2,236)	1:A:19:ARG:HB3	1:A:21:LYS:H	7	0.12
(2,236)	1:A:21:LYS:HB2	1:A:21:LYS:H	7	0.12
(2,236)	1:A:21:LYS:HB3	1:A:21:LYS:H	7	0.12
(2,236)	1:A:19:ARG:HB2	1:A:21:LYS:H	16	0.12
(2,236)	1:A:19:ARG:HB3	1:A:21:LYS:H	16	0.12
(2,236)	1:A:21:LYS:HB2	1:A:21:LYS:H	16	0.12
(2,236)	1:A:21:LYS:HB3	1:A:21:LYS:H	16	0.12
(2,236)	1:A:19:ARG:HB2	1:A:21:LYS:H	17	0.12
(2,236)	1:A:19:ARG:HB3	1:A:21:LYS:H	17	0.12
(2,236)	1:A:21:LYS:HB2	1:A:21:LYS:H	17	0.12
(2,236)	1:A:21:LYS:HB3	1:A:21:LYS:H	17	0.12
(2,236)	1:A:19:ARG:HB2	1:A:21:LYS:H	18	0.12
(2,236)	1:A:19:ARG:HB3	1:A:21:LYS:H	18	0.12
(2,236)	1:A:21:LYS:HB2	1:A:21:LYS:H	18	0.12
(2,236)	1:A:21:LYS:HB3	1:A:21:LYS:H	18	0.12
(2,236)	1:A:19:ARG:HB2	1:A:21:LYS:H	19	0.12
(2,236)	1:A:19:ARG:HB3	1:A:21:LYS:H	19	0.12
(2,236)	1:A:21:LYS:HB2	1:A:21:LYS:H	19	0.12
(2,236)	1:A:21:LYS:HB3	1:A:21:LYS:H	19	0.12
(2,234)	1:A:64:ARG:HB2	1:A:66:ASP:H	10	0.12
(2,234)	1:A:64:ARG:HB3	1:A:66:ASP:H	10	0.12
(2,234)	1:A:64:ARG:HG2	1:A:66:ASP:H	10	0.12
(2,234)	1:A:64:ARG:HG3	1:A:66:ASP:H	10	0.12
(2,233)	1:A:14:GLN:HB2	1:A:14:GLN:HE22	3	0.12
(2,233)	1:A:14:GLN:HB3	1:A:14:GLN:HE22	3	0.12

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,233)	1:A:14:GLN:HB2	1:A:14:GLN:HE22	6	0.12
(2,233)	1:A:14:GLN:HB3	1:A:14:GLN:HE22	6	0.12
(2,233)	1:A:14:GLN:HB2	1:A:14:GLN:HE22	9	0.12
(2,233)	1:A:14:GLN:HB3	1:A:14:GLN:HE22	9	0.12
(2,233)	1:A:14:GLN:HB2	1:A:14:GLN:HE22	13	0.12
(2,233)	1:A:14:GLN:HB3	1:A:14:GLN:HE22	13	0.12
(2,233)	1:A:14:GLN:HB2	1:A:14:GLN:HE22	18	0.12
(2,233)	1:A:14:GLN:HB3	1:A:14:GLN:HE22	18	0.12
(2,233)	1:A:14:GLN:HB2	1:A:14:GLN:HE22	20	0.12
(2,233)	1:A:14:GLN:HB3	1:A:14:GLN:HE22	20	0.12
(2,209)	1:A:28:CYS:HB2	1:A:31:GLY:H	9	0.12
(2,209)	1:A:28:CYS:HB3	1:A:31:GLY:H	9	0.12
(2,209)	1:A:29:GLU:HA	1:A:31:GLY:H	9	0.12
(2,209)	1:A:32:SER:HA	1:A:31:GLY:H	9	0.12
(2,209)	1:A:32:SER:HB2	1:A:31:GLY:H	9	0.12
(2,209)	1:A:32:SER:HB3	1:A:31:GLY:H	9	0.12
(2,209)	1:A:28:CYS:HB2	1:A:31:GLY:H	12	0.12
(2,209)	1:A:28:CYS:HB3	1:A:31:GLY:H	12	0.12
(2,209)	1:A:29:GLU:HA	1:A:31:GLY:H	12	0.12
(2,209)	1:A:32:SER:HA	1:A:31:GLY:H	12	0.12
(2,209)	1:A:32:SER:HB2	1:A:31:GLY:H	12	0.12
(2,209)	1:A:32:SER:HB3	1:A:31:GLY:H	12	0.12
(2,198)	1:A:91:THR:HB	1:A:92:CYS:H	10	0.12
(2,198)	1:A:92:CYS:HB2	1:A:92:CYS:H	10	0.12
(2,198)	1:A:92:CYS:HB3	1:A:92:CYS:H	10	0.12
(2,188)	1:A:16:VAL:HG11	1:A:19:ARG:H	8	0.12
(2,188)	1:A:16:VAL:HG12	1:A:19:ARG:H	8	0.12
(2,188)	1:A:16:VAL:HG13	1:A:19:ARG:H	8	0.12
(2,188)	1:A:16:VAL:HG21	1:A:19:ARG:H	8	0.12
(2,188)	1:A:16:VAL:HG22	1:A:19:ARG:H	8	0.12
(2,188)	1:A:16:VAL:HG23	1:A:19:ARG:H	8	0.12
(2,188)	1:A:16:VAL:HG11	1:A:19:ARG:H	15	0.12
(2,188)	1:A:16:VAL:HG12	1:A:19:ARG:H	15	0.12
(2,188)	1:A:16:VAL:HG13	1:A:19:ARG:H	15	0.12
(2,188)	1:A:16:VAL:HG21	1:A:19:ARG:H	15	0.12
(2,188)	1:A:16:VAL:HG22	1:A:19:ARG:H	15	0.12
(2,188)	1:A:16:VAL:HG23	1:A:19:ARG:H	15	0.12
(2,18)	1:A:111:SER:HA	1:A:113:GLY:H	1	0.12
(2,18)	1:A:113:GLY:HA2	1:A:113:GLY:H	1	0.12
(2,18)	1:A:113:GLY:HA3	1:A:113:GLY:H	1	0.12
(2,18)	1:A:111:SER:HA	1:A:113:GLY:H	5	0.12
(2,18)	1:A:113:GLY:HA2	1:A:113:GLY:H	5	0.12

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,18)	1:A:113:GLY:HA3	1:A:113:GLY:H	5	0.12
(2,176)	1:A:99:SER:HG	1:A:101:ASN:HD21	17	0.12
(2,176)	1:A:102:PHE:HA	1:A:101:ASN:HD21	17	0.12
(2,174)	1:A:117:LEU:HB2	1:A:116:GLU:H	16	0.12
(2,174)	1:A:117:LEU:HB3	1:A:116:GLU:H	16	0.12
(2,174)	1:A:117:LEU:HG	1:A:116:GLU:H	16	0.12
(2,166)	1:A:80:CYS:HA	1:A:79:ASN:HD21	20	0.12
(2,166)	1:A:86:SER:HA	1:A:79:ASN:HD21	20	0.12
(2,160)	1:A:43:THR:HG1	1:A:43:THR:H	17	0.12
(2,160)	1:A:43:THR:HG1	1:A:43:THR:H	17	0.12
(2,160)	1:A:43:THR:HG21	1:A:43:THR:H	17	0.12
(2,160)	1:A:43:THR:HG21	1:A:43:THR:H	17	0.12
(2,160)	1:A:43:THR:HG22	1:A:43:THR:H	17	0.12
(2,160)	1:A:43:THR:HG22	1:A:43:THR:H	17	0.12
(2,160)	1:A:43:THR:HG23	1:A:43:THR:H	17	0.12
(2,160)	1:A:43:THR:HG23	1:A:43:THR:H	17	0.12
(2,160)	1:A:56:THR:HG1	1:A:43:THR:H	17	0.12
(2,160)	1:A:56:THR:HG21	1:A:43:THR:H	17	0.12
(2,160)	1:A:56:THR:HG22	1:A:43:THR:H	17	0.12
(2,160)	1:A:56:THR:HG23	1:A:43:THR:H	17	0.12
(2,156)	1:A:51:CYS:HB2	1:A:71:CYS:H	6	0.12
(2,156)	1:A:51:CYS:HB3	1:A:71:CYS:H	6	0.12
(2,156)	1:A:71:CYS:HB2	1:A:71:CYS:H	6	0.12
(2,156)	1:A:71:CYS:HB3	1:A:71:CYS:H	6	0.12
(2,156)	1:A:51:CYS:HB2	1:A:71:CYS:H	7	0.12
(2,156)	1:A:51:CYS:HB3	1:A:71:CYS:H	7	0.12
(2,156)	1:A:71:CYS:HB2	1:A:71:CYS:H	7	0.12
(2,156)	1:A:71:CYS:HB3	1:A:71:CYS:H	7	0.12
(2,150)	1:A:11:ASN:HB2	1:A:31:GLY:H	13	0.12
(2,150)	1:A:11:ASN:HB3	1:A:31:GLY:H	13	0.12
(2,150)	1:A:28:CYS:HB2	1:A:31:GLY:H	13	0.12
(2,150)	1:A:28:CYS:HB3	1:A:31:GLY:H	13	0.12
(2,150)	1:A:11:ASN:HB2	1:A:31:GLY:H	16	0.12
(2,150)	1:A:11:ASN:HB3	1:A:31:GLY:H	16	0.12
(2,150)	1:A:28:CYS:HB2	1:A:31:GLY:H	16	0.12
(2,150)	1:A:28:CYS:HB3	1:A:31:GLY:H	16	0.12
(2,137)	1:A:116:GLU:HB2	1:A:117:LEU:H	20	0.12
(2,137)	1:A:116:GLU:HB3	1:A:117:LEU:H	20	0.12
(2,137)	1:A:117:LEU:HB2	1:A:117:LEU:H	20	0.12
(2,137)	1:A:117:LEU:HB3	1:A:117:LEU:H	20	0.12
(2,134)	1:A:79:ASN:HB2	1:A:85:CYS:H	8	0.12
(2,134)	1:A:79:ASN:HB3	1:A:85:CYS:H	8	0.12

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,134)	1:A:97:CYS:HB2	1:A:85:CYS:H	8	0.12
(2,134)	1:A:97:CYS:HB3	1:A:85:CYS:H	8	0.12
(2,132)	1:A:45:ARG:HB2	1:A:45:ARG:H	2	0.12
(2,132)	1:A:45:ARG:HB3	1:A:45:ARG:H	2	0.12
(2,132)	1:A:46:ILE:HG12	1:A:45:ARG:H	2	0.12
(2,132)	1:A:46:ILE:HG13	1:A:45:ARG:H	2	0.12
(2,132)	1:A:45:ARG:HB2	1:A:45:ARG:H	7	0.12
(2,132)	1:A:45:ARG:HB3	1:A:45:ARG:H	7	0.12
(2,132)	1:A:46:ILE:HG12	1:A:45:ARG:H	7	0.12
(2,132)	1:A:46:ILE:HG13	1:A:45:ARG:H	7	0.12
(2,132)	1:A:45:ARG:HB2	1:A:45:ARG:H	8	0.12
(2,132)	1:A:45:ARG:HB3	1:A:45:ARG:H	8	0.12
(2,132)	1:A:46:ILE:HG12	1:A:45:ARG:H	8	0.12
(2,132)	1:A:46:ILE:HG13	1:A:45:ARG:H	8	0.12
(2,132)	1:A:45:ARG:HB2	1:A:45:ARG:H	17	0.12
(2,132)	1:A:45:ARG:HB3	1:A:45:ARG:H	17	0.12
(2,132)	1:A:46:ILE:HG12	1:A:45:ARG:H	17	0.12
(2,132)	1:A:46:ILE:HG13	1:A:45:ARG:H	17	0.12
(2,122)	1:A:7:ASP:HA	1:A:16:VAL:H	4	0.12
(2,122)	1:A:16:VAL:HA	1:A:16:VAL:H	4	0.12
(2,122)	1:A:7:ASP:HA	1:A:16:VAL:H	9	0.12
(2,122)	1:A:16:VAL:HA	1:A:16:VAL:H	9	0.12
(2,122)	1:A:7:ASP:HA	1:A:16:VAL:H	20	0.12
(2,122)	1:A:16:VAL:HA	1:A:16:VAL:H	20	0.12
(2,121)	1:A:93:SER:HB2	1:A:93:SER:H	5	0.12
(2,121)	1:A:93:SER:HB3	1:A:93:SER:H	5	0.12
(2,121)	1:A:94:SER:HB3	1:A:93:SER:H	5	0.12
(2,117)	1:A:14:GLN:HB2	1:A:12:ASN:HD21	9	0.12
(2,117)	1:A:14:GLN:HB3	1:A:12:ASN:HD21	9	0.12
(2,115)	1:A:80:CYS:H	1:A:81:GLY:H	7	0.12
(2,115)	1:A:85:CYS:H	1:A:81:GLY:H	7	0.12
(2,112)	1:A:83:ILE:HG12	1:A:84:THR:H	3	0.12
(2,112)	1:A:83:ILE:HG13	1:A:84:THR:H	3	0.12
(2,112)	1:A:84:THR:HG1	1:A:84:THR:H	3	0.12
(2,112)	1:A:84:THR:HG21	1:A:84:THR:H	3	0.12
(2,112)	1:A:84:THR:HG22	1:A:84:THR:H	3	0.12
(2,112)	1:A:84:THR:HG23	1:A:84:THR:H	3	0.12
(2,111)	1:A:72:ASP:H	1:A:71:CYS:H	14	0.12
(2,111)	1:A:76:ASP:H	1:A:71:CYS:H	14	0.12
(2,110)	1:A:17:PRO:HB2	1:A:19:ARG:H	8	0.12
(2,110)	1:A:17:PRO:HB3	1:A:19:ARG:H	8	0.12
(2,110)	1:A:19:ARG:HB2	1:A:19:ARG:H	8	0.12

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,110)	1:A:19:ARG:HB3	1:A:19:ARG:H	8	0.12
(2,110)	1:A:17:PRO:HB2	1:A:19:ARG:H	10	0.12
(2,110)	1:A:17:PRO:HB3	1:A:19:ARG:H	10	0.12
(2,110)	1:A:19:ARG:HB2	1:A:19:ARG:H	10	0.12
(2,110)	1:A:19:ARG:HB3	1:A:19:ARG:H	10	0.12
(2,108)	1:A:92:CYS:H	1:A:95:GLY:H	10	0.12
(2,108)	1:A:93:SER:H	1:A:95:GLY:H	10	0.12
(2,101)	1:A:37:GLU:HB2	1:A:38:GLN:HE21	13	0.12
(2,101)	1:A:37:GLU:HB3	1:A:38:GLN:HE21	13	0.12
(2,101)	1:A:38:GLN:HB2	1:A:38:GLN:HE21	13	0.12
(2,101)	1:A:38:GLN:HB3	1:A:38:GLN:HE21	13	0.12
(2,10)	1:A:14:GLN:HB2	1:A:15:CYS:H	1	0.12
(2,10)	1:A:14:GLN:HB3	1:A:15:CYS:H	1	0.12
(1,96)	1:A:100:ARG:H	1:A:89:GLU:HA	2	0.12
(1,94)	1:A:120:ALA:H	1:A:119:CYS:HB2	1	0.12
(1,94)	1:A:120:ALA:H	1:A:119:CYS:HB3	1	0.12
(1,930)	1:A:102:PHE:HE2	1:A:107:GLN:HG2	8	0.12
(1,925)	1:A:8:PHE:HB3	1:A:16:VAL:HG21	14	0.12
(1,925)	1:A:8:PHE:HB3	1:A:16:VAL:HG22	14	0.12
(1,925)	1:A:8:PHE:HB3	1:A:16:VAL:HG23	14	0.12
(1,925)	1:A:8:PHE:HB3	1:A:16:VAL:HG21	17	0.12
(1,925)	1:A:8:PHE:HB3	1:A:16:VAL:HG22	17	0.12
(1,925)	1:A:8:PHE:HB3	1:A:16:VAL:HG23	17	0.12
(1,924)	1:A:8:PHE:HB2	1:A:16:VAL:HG11	11	0.12
(1,924)	1:A:8:PHE:HB2	1:A:16:VAL:HG12	11	0.12
(1,924)	1:A:8:PHE:HB2	1:A:16:VAL:HG13	11	0.12
(1,924)	1:A:8:PHE:HB2	1:A:16:VAL:HG21	11	0.12
(1,924)	1:A:8:PHE:HB2	1:A:16:VAL:HG22	11	0.12
(1,924)	1:A:8:PHE:HB2	1:A:16:VAL:HG23	11	0.12
(1,920)	1:A:16:VAL:HG11	1:A:20:TRP:HE3	11	0.12
(1,920)	1:A:16:VAL:HG12	1:A:20:TRP:HE3	11	0.12
(1,920)	1:A:16:VAL:HG13	1:A:20:TRP:HE3	11	0.12
(1,920)	1:A:16:VAL:HG21	1:A:20:TRP:HE3	11	0.12
(1,920)	1:A:16:VAL:HG22	1:A:20:TRP:HE3	11	0.12
(1,920)	1:A:16:VAL:HG23	1:A:20:TRP:HE3	11	0.12
(1,917)	1:A:28:CYS:H	1:A:14:GLN:HG2	14	0.12
(1,916)	1:A:77:GLU:HB2	1:A:77:GLU:H	1	0.12
(1,916)	1:A:77:GLU:HB3	1:A:77:GLU:H	1	0.12
(1,909)	1:A:43:THR:HG1	1:A:46:ILE:H	10	0.12
(1,909)	1:A:43:THR:HG21	1:A:46:ILE:H	10	0.12
(1,909)	1:A:43:THR:HG22	1:A:46:ILE:H	10	0.12
(1,909)	1:A:43:THR:HG23	1:A:46:ILE:H	10	0.12

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,909)	1:A:43:THR:HG1	1:A:46:ILE:H	11	0.12
(1,909)	1:A:43:THR:HG21	1:A:46:ILE:H	11	0.12
(1,909)	1:A:43:THR:HG22	1:A:46:ILE:H	11	0.12
(1,909)	1:A:43:THR:HG23	1:A:46:ILE:H	11	0.12
(1,906)	1:A:13:GLY:HA2	1:A:12:ASN:HD22	5	0.12
(1,906)	1:A:13:GLY:HA3	1:A:12:ASN:HD22	5	0.12
(1,906)	1:A:13:GLY:HA2	1:A:12:ASN:HD22	11	0.12
(1,906)	1:A:13:GLY:HA3	1:A:12:ASN:HD22	11	0.12
(1,905)	1:A:101:ASN:HD21	1:A:105:ASN:HD21	19	0.12
(1,900)	1:A:83:ILE:HG12	1:A:82:ASN:H	5	0.12
(1,900)	1:A:83:ILE:HG13	1:A:82:ASN:H	5	0.12
(1,9)	1:A:12:ASN:H	1:A:11:ASN:H	16	0.12
(1,9)	1:A:12:ASN:H	1:A:11:ASN:H	20	0.12
(1,882)	1:A:58:CYS:HA	1:A:50:SER:H	9	0.12
(1,882)	1:A:58:CYS:HA	1:A:50:SER:H	16	0.12
(1,876)	1:A:39:CYS:HB2	1:A:43:THR:H	13	0.12
(1,876)	1:A:39:CYS:HB3	1:A:43:THR:H	13	0.12
(1,875)	1:A:38:GLN:HE22	1:A:38:GLN:H	6	0.12
(1,873)	1:A:34:GLU:HB2	1:A:33:ASP:H	5	0.12
(1,873)	1:A:34:GLU:HB3	1:A:33:ASP:H	5	0.12
(1,872)	1:A:32:SER:H	1:A:33:ASP:HB2	19	0.12
(1,872)	1:A:32:SER:H	1:A:33:ASP:HB3	19	0.12
(1,869)	1:A:14:GLN:HE22	1:A:28:CYS:H	1	0.12
(1,867)	1:A:34:GLU:HG2	1:A:24:GLY:H	6	0.12
(1,867)	1:A:34:GLU:HG3	1:A:24:GLY:H	6	0.12
(1,843)	1:A:4:ALA:H	1:A:17:PRO:HB2	18	0.12
(1,843)	1:A:4:ALA:H	1:A:17:PRO:HB3	18	0.12
(1,838)	1:A:58:CYS:HA	1:A:52:GLY:H	14	0.12
(1,829)	1:A:85:CYS:HB2	1:A:86:SER:H	19	0.12
(1,829)	1:A:85:CYS:HB3	1:A:86:SER:H	19	0.12
(1,828)	1:A:85:CYS:HA	1:A:86:SER:H	5	0.12
(1,828)	1:A:85:CYS:HA	1:A:86:SER:H	13	0.12
(1,820)	1:A:110:CYS:H	1:A:115:ASP:H	4	0.12
(1,820)	1:A:110:CYS:H	1:A:115:ASP:H	7	0.12
(1,813)	1:A:107:GLN:HE21	1:A:108:ASP:HA	12	0.12
(1,813)	1:A:107:GLN:HE21	1:A:108:ASP:HA	18	0.12
(1,811)	1:A:107:GLN:H	1:A:105:ASN:HD21	20	0.12
(1,809)	1:A:106:GLY:H	1:A:104:CYS:H	17	0.12
(1,807)	1:A:98:ILE:HG12	1:A:103:VAL:H	2	0.12
(1,807)	1:A:98:ILE:HG13	1:A:103:VAL:H	2	0.12
(1,796)	1:A:96:ARG:H	1:A:83:ILE:HG21	6	0.12
(1,796)	1:A:96:ARG:H	1:A:83:ILE:HG22	6	0.12

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,796)	1:A:96:ARG:H	1:A:83:ILE:HG23	6	0.12
(1,794)	1:A:82:ASN:HD22	1:A:94:SER:H	18	0.12
(1,792)	1:A:97:CYS:HB2	1:A:91:THR:H	6	0.12
(1,792)	1:A:97:CYS:HB3	1:A:91:THR:H	6	0.12
(1,792)	1:A:97:CYS:HB2	1:A:91:THR:H	11	0.12
(1,792)	1:A:97:CYS:HB3	1:A:91:THR:H	11	0.12
(1,766)	1:A:48:GLU:HB2	1:A:58:CYS:H	19	0.12
(1,766)	1:A:48:GLU:HB3	1:A:58:CYS:H	19	0.12
(1,759)	1:A:57:GLN:HE21	1:A:71:CYS:HA	5	0.12
(1,751)	1:A:52:GLY:H	1:A:57:GLN:HG2	9	0.12
(1,751)	1:A:52:GLY:H	1:A:57:GLN:HG3	9	0.12
(1,751)	1:A:52:GLY:H	1:A:57:GLN:HG2	20	0.12
(1,751)	1:A:52:GLY:H	1:A:57:GLN:HG3	20	0.12
(1,745)	1:A:48:GLU:HB2	1:A:49:ILE:H	4	0.12
(1,745)	1:A:48:GLU:HB3	1:A:49:ILE:H	4	0.12
(1,745)	1:A:48:GLU:HB2	1:A:49:ILE:H	12	0.12
(1,745)	1:A:48:GLU:HB3	1:A:49:ILE:H	12	0.12
(1,744)	1:A:48:GLU:H	1:A:47:HIS:H	5	0.12
(1,744)	1:A:48:GLU:H	1:A:47:HIS:H	10	0.12
(1,741)	1:A:9:VAL:HG11	1:A:38:GLN:HE21	20	0.12
(1,741)	1:A:9:VAL:HG12	1:A:38:GLN:HE21	20	0.12
(1,741)	1:A:9:VAL:HG13	1:A:38:GLN:HE21	20	0.12
(1,741)	1:A:9:VAL:HG21	1:A:38:GLN:HE21	20	0.12
(1,741)	1:A:9:VAL:HG22	1:A:38:GLN:HE21	20	0.12
(1,741)	1:A:9:VAL:HG23	1:A:38:GLN:HE21	20	0.12
(1,739)	1:A:34:GLU:HB2	1:A:35:SER:H	6	0.12
(1,739)	1:A:34:GLU:HB3	1:A:35:SER:H	6	0.12
(1,734)	1:A:32:SER:H	1:A:11:ASN:H	8	0.12
(1,718)	1:A:16:VAL:HB	1:A:20:TRP:HE1	5	0.12
(1,712)	1:A:32:SER:H	1:A:11:ASN:H	8	0.12
(1,709)	1:A:45:ARG:HD2	1:A:45:ARG:H	6	0.12
(1,709)	1:A:45:ARG:HD3	1:A:45:ARG:H	6	0.12
(1,707)	1:A:45:ARG:HD2	1:A:45:ARG:H	6	0.12
(1,707)	1:A:45:ARG:HD3	1:A:45:ARG:H	6	0.12
(1,7)	1:A:22:CYS:H	1:A:23:ASP:H	8	0.12
(1,7)	1:A:22:CYS:H	1:A:23:ASP:H	11	0.12
(1,7)	1:A:22:CYS:H	1:A:23:ASP:H	12	0.12
(1,7)	1:A:22:CYS:H	1:A:23:ASP:H	13	0.12
(1,698)	1:A:64:ARG:H	1:A:64:ARG:HG2	1	0.12
(1,698)	1:A:64:ARG:H	1:A:64:ARG:HG3	1	0.12
(1,698)	1:A:64:ARG:H	1:A:64:ARG:HG2	16	0.12
(1,698)	1:A:64:ARG:H	1:A:64:ARG:HG3	16	0.12

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,69)	1:A:78:GLU:HG2	1:A:78:GLU:H	4	0.12
(1,69)	1:A:78:GLU:HG3	1:A:78:GLU:H	4	0.12
(1,69)	1:A:78:GLU:HG2	1:A:78:GLU:H	7	0.12
(1,69)	1:A:78:GLU:HG3	1:A:78:GLU:H	7	0.12
(1,680)	1:A:79:ASN:HD22	1:A:79:ASN:HB2	18	0.12
(1,680)	1:A:79:ASN:HD22	1:A:79:ASN:HB3	18	0.12
(1,679)	1:A:78:GLU:HG2	1:A:79:ASN:HD22	11	0.12
(1,679)	1:A:78:GLU:HG3	1:A:79:ASN:HD22	11	0.12
(1,678)	1:A:63:TRP:HE1	1:A:63:TRP:HA	10	0.12
(1,670)	1:A:107:GLN:HB2	1:A:105:ASN:HD22	12	0.12
(1,670)	1:A:107:GLN:HB2	1:A:105:ASN:HD22	12	0.12
(1,670)	1:A:107:GLN:HB3	1:A:105:ASN:HD22	12	0.12
(1,670)	1:A:107:GLN:HB3	1:A:105:ASN:HD22	12	0.12
(1,67)	1:A:19:ARG:H	1:A:18:SER:H	12	0.12
(1,662)	1:A:102:PHE:HB2	1:A:105:ASN:HD21	11	0.12
(1,662)	1:A:102:PHE:HB3	1:A:105:ASN:HD21	11	0.12
(1,662)	1:A:102:PHE:HB2	1:A:105:ASN:HD21	17	0.12
(1,662)	1:A:102:PHE:HB3	1:A:105:ASN:HD21	17	0.12
(1,658)	1:A:102:PHE:HA	1:A:105:ASN:HD22	10	0.12
(1,645)	1:A:101:ASN:HD22	1:A:101:ASN:H	12	0.12
(1,627)	1:A:72:ASP:HA	1:A:57:GLN:HE22	4	0.12
(1,627)	1:A:72:ASP:HA	1:A:57:GLN:HE22	10	0.12
(1,613)	1:A:28:CYS:HA	1:A:14:GLN:HE22	1	0.12
(1,607)	1:A:11:ASN:HB2	1:A:11:ASN:HD21	18	0.12
(1,607)	1:A:11:ASN:HB3	1:A:11:ASN:HD21	18	0.12
(1,602)	1:A:32:SER:HB2	1:A:11:ASN:HD21	5	0.12
(1,602)	1:A:32:SER:HB3	1:A:11:ASN:HD21	5	0.12
(1,601)	1:A:11:ASN:H	1:A:11:ASN:HD22	2	0.12
(1,596)	1:A:74:GLY:HA2	1:A:69:ASN:HD21	19	0.12
(1,596)	1:A:74:GLY:HA3	1:A:69:ASN:HD21	19	0.12
(1,591)	1:A:69:ASN:HB2	1:A:69:ASN:HD21	9	0.12
(1,591)	1:A:69:ASN:HB3	1:A:69:ASN:HD21	9	0.12
(1,591)	1:A:69:ASN:HB2	1:A:69:ASN:HD21	13	0.12
(1,591)	1:A:69:ASN:HB3	1:A:69:ASN:HD21	13	0.12
(1,588)	1:A:12:ASN:HA	1:A:13:GLY:H	17	0.12
(1,574)	1:A:64:ARG:H	1:A:65:CYS:H	1	0.12
(1,574)	1:A:64:ARG:H	1:A:65:CYS:H	11	0.12
(1,574)	1:A:64:ARG:H	1:A:65:CYS:H	16	0.12
(1,560)	1:A:90:PHE:H	1:A:99:SER:H	4	0.12
(1,553)	1:A:115:ASP:HB2	1:A:104:CYS:H	19	0.12
(1,553)	1:A:115:ASP:HB3	1:A:104:CYS:H	19	0.12
(1,551)	1:A:104:CYS:HB2	1:A:104:CYS:H	4	0.12

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,551)	1:A:104:CYS:HB3	1:A:104:CYS:H	4	0.12
(1,551)	1:A:104:CYS:HB2	1:A:104:CYS:H	7	0.12
(1,551)	1:A:104:CYS:HB3	1:A:104:CYS:H	7	0.12
(1,551)	1:A:104:CYS:HB2	1:A:104:CYS:H	8	0.12
(1,551)	1:A:104:CYS:HB3	1:A:104:CYS:H	8	0.12
(1,551)	1:A:104:CYS:HB2	1:A:104:CYS:H	12	0.12
(1,551)	1:A:104:CYS:HB3	1:A:104:CYS:H	12	0.12
(1,551)	1:A:104:CYS:HB2	1:A:104:CYS:H	14	0.12
(1,551)	1:A:104:CYS:HB3	1:A:104:CYS:H	14	0.12
(1,551)	1:A:104:CYS:HB2	1:A:104:CYS:H	16	0.12
(1,551)	1:A:104:CYS:HB3	1:A:104:CYS:H	16	0.12
(1,551)	1:A:104:CYS:HB2	1:A:104:CYS:H	20	0.12
(1,551)	1:A:104:CYS:HB3	1:A:104:CYS:H	20	0.12
(1,550)	1:A:104:CYS:HB2	1:A:104:CYS:H	4	0.12
(1,550)	1:A:104:CYS:HB3	1:A:104:CYS:H	4	0.12
(1,550)	1:A:104:CYS:HB2	1:A:104:CYS:H	7	0.12
(1,550)	1:A:104:CYS:HB3	1:A:104:CYS:H	7	0.12
(1,550)	1:A:104:CYS:HB2	1:A:104:CYS:H	8	0.12
(1,550)	1:A:104:CYS:HB3	1:A:104:CYS:H	8	0.12
(1,550)	1:A:104:CYS:HB2	1:A:104:CYS:H	12	0.12
(1,550)	1:A:104:CYS:HB3	1:A:104:CYS:H	12	0.12
(1,550)	1:A:104:CYS:HB2	1:A:104:CYS:H	14	0.12
(1,550)	1:A:104:CYS:HB3	1:A:104:CYS:H	14	0.12
(1,550)	1:A:104:CYS:HB2	1:A:104:CYS:H	16	0.12
(1,550)	1:A:104:CYS:HB3	1:A:104:CYS:H	16	0.12
(1,550)	1:A:104:CYS:HB2	1:A:104:CYS:H	20	0.12
(1,550)	1:A:104:CYS:HB3	1:A:104:CYS:H	20	0.12
(1,542)	1:A:112:ASP:H	1:A:114:SER:H	10	0.12
(1,536)	1:A:89:GLU:HB2	1:A:86:SER:H	3	0.12
(1,536)	1:A:89:GLU:HB3	1:A:86:SER:H	3	0.12
(1,536)	1:A:89:GLU:HB2	1:A:86:SER:H	19	0.12
(1,536)	1:A:89:GLU:HB3	1:A:86:SER:H	19	0.12
(1,527)	1:A:67:GLY:HA2	1:A:67:GLY:H	6	0.12
(1,527)	1:A:67:GLY:HA3	1:A:67:GLY:H	6	0.12
(1,518)	1:A:49:ILE:H	1:A:61:VAL:H	18	0.12
(1,510)	1:A:48:GLU:HB2	1:A:48:GLU:H	17	0.12
(1,510)	1:A:48:GLU:HB3	1:A:48:GLU:H	17	0.12
(1,496)	1:A:31:GLY:HA2	1:A:31:GLY:H	1	0.12
(1,496)	1:A:31:GLY:HA3	1:A:31:GLY:H	1	0.12
(1,496)	1:A:31:GLY:HA2	1:A:31:GLY:H	2	0.12
(1,496)	1:A:31:GLY:HA3	1:A:31:GLY:H	2	0.12
(1,496)	1:A:31:GLY:HA2	1:A:31:GLY:H	9	0.12

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,496)	1:A:31:GLY:HA3	1:A:31:GLY:H	9	0.12
(1,483)	1:A:10:CYS:HB2	1:A:14:GLN:H	12	0.12
(1,483)	1:A:10:CYS:HB3	1:A:14:GLN:H	12	0.12
(1,482)	1:A:11:ASN:HD21	1:A:11:ASN:H	2	0.12
(1,482)	1:A:11:ASN:HD21	1:A:11:ASN:H	4	0.12
(1,477)	1:A:9:VAL:HA	1:A:9:VAL:H	8	0.12
(1,477)	1:A:9:VAL:HA	1:A:9:VAL:H	14	0.12
(1,476)	1:A:7:ASP:H	1:A:3:CYS:HB2	7	0.12
(1,476)	1:A:7:ASP:H	1:A:3:CYS:HB3	7	0.12
(1,475)	1:A:75:GLU:H	1:A:76:ASP:H	17	0.12
(1,473)	1:A:85:CYS:H	1:A:86:SER:H	4	0.12
(1,473)	1:A:85:CYS:H	1:A:86:SER:H	16	0.12
(1,470)	1:A:79:ASN:HB2	1:A:79:ASN:H	14	0.12
(1,470)	1:A:79:ASN:HB3	1:A:79:ASN:H	14	0.12
(1,466)	1:A:80:CYS:HA	1:A:79:ASN:H	20	0.12
(1,463)	1:A:71:CYS:HB2	1:A:78:GLU:H	7	0.12
(1,463)	1:A:71:CYS:HB3	1:A:78:GLU:H	7	0.12
(1,454)	1:A:78:GLU:HG2	1:A:76:ASP:H	18	0.12
(1,454)	1:A:78:GLU:HG3	1:A:76:ASP:H	18	0.12
(1,451)	1:A:75:GLU:H	1:A:76:ASP:H	17	0.12
(1,444)	1:A:76:ASP:H	1:A:74:GLY:H	1	0.12
(1,444)	1:A:76:ASP:H	1:A:74:GLY:H	9	0.12
(1,444)	1:A:76:ASP:H	1:A:74:GLY:H	14	0.12
(1,444)	1:A:76:ASP:H	1:A:74:GLY:H	18	0.12
(1,443)	1:A:73:SER:H	1:A:71:CYS:HB2	18	0.12
(1,443)	1:A:73:SER:H	1:A:71:CYS:HB3	18	0.12
(1,437)	1:A:72:ASP:H	1:A:71:CYS:H	3	0.12
(1,435)	1:A:72:ASP:HA	1:A:72:ASP:H	2	0.12
(1,433)	1:A:74:GLY:HA2	1:A:71:CYS:H	8	0.12
(1,433)	1:A:74:GLY:HA3	1:A:71:CYS:H	8	0.12
(1,432)	1:A:70:ASP:HB2	1:A:70:ASP:H	3	0.12
(1,432)	1:A:70:ASP:HB3	1:A:70:ASP:H	3	0.12
(1,432)	1:A:70:ASP:HB2	1:A:70:ASP:H	9	0.12
(1,432)	1:A:70:ASP:HB3	1:A:70:ASP:H	9	0.12
(1,431)	1:A:72:ASP:H	1:A:70:ASP:H	7	0.12
(1,424)	1:A:68:GLU:HA	1:A:67:GLY:H	6	0.12
(1,42)	1:A:96:ARG:H	1:A:97:CYS:H	11	0.12
(1,419)	1:A:65:CYS:HB2	1:A:66:ASP:H	12	0.12
(1,419)	1:A:65:CYS:HB3	1:A:66:ASP:H	12	0.12
(1,418)	1:A:64:ARG:HA	1:A:66:ASP:H	18	0.12
(1,414)	1:A:63:TRP:H	1:A:63:TRP:HB2	8	0.12
(1,414)	1:A:63:TRP:H	1:A:63:TRP:HB3	8	0.12

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,414)	1:A:63:TRP:H	1:A:63:TRP:HB2	17	0.12
(1,414)	1:A:63:TRP:H	1:A:63:TRP:HB3	17	0.12
(1,41)	1:A:96:ARG:H	1:A:97:CYS:H	11	0.12
(1,409)	1:A:60:PRO:HA	1:A:61:VAL:H	4	0.12
(1,392)	1:A:52:GLY:HA2	1:A:53:ALA:H	8	0.12
(1,392)	1:A:52:GLY:HA3	1:A:53:ALA:H	8	0.12
(1,387)	1:A:51:CYS:H	1:A:51:CYS:HB2	10	0.12
(1,387)	1:A:51:CYS:H	1:A:51:CYS:HB3	10	0.12
(1,383)	1:A:51:CYS:H	1:A:50:SER:HA	5	0.12
(1,383)	1:A:51:CYS:H	1:A:50:SER:HA	11	0.12
(1,383)	1:A:51:CYS:H	1:A:50:SER:HA	16	0.12
(1,374)	1:A:61:VAL:H	1:A:49:ILE:H	1	0.12
(1,372)	1:A:48:GLU:H	1:A:48:GLU:HA	3	0.12
(1,372)	1:A:48:GLU:H	1:A:48:GLU:HA	16	0.12
(1,369)	1:A:43:THR:HB	1:A:44:CYS:H	4	0.12
(1,369)	1:A:43:THR:HB	1:A:44:CYS:H	12	0.12
(1,359)	1:A:40:HIS:H	1:A:40:HIS:HB2	20	0.12
(1,359)	1:A:40:HIS:H	1:A:40:HIS:HB3	20	0.12
(1,357)	1:A:40:HIS:H	1:A:39:CYS:HA	1	0.12
(1,357)	1:A:40:HIS:H	1:A:39:CYS:HA	3	0.12
(1,357)	1:A:40:HIS:H	1:A:39:CYS:HA	5	0.12
(1,357)	1:A:40:HIS:H	1:A:39:CYS:HA	17	0.12
(1,357)	1:A:40:HIS:H	1:A:39:CYS:HA	18	0.12
(1,350)	1:A:31:GLY:H	1:A:32:SER:H	13	0.12
(1,350)	1:A:31:GLY:H	1:A:32:SER:H	16	0.12
(1,350)	1:A:31:GLY:H	1:A:32:SER:H	20	0.12
(1,347)	1:A:31:GLY:H	1:A:28:CYS:H	12	0.12
(1,335)	1:A:45:ARG:HD2	1:A:24:GLY:H	4	0.12
(1,335)	1:A:45:ARG:HD3	1:A:24:GLY:H	4	0.12
(1,315)	1:A:15:CYS:H	1:A:15:CYS:HB2	11	0.12
(1,315)	1:A:15:CYS:H	1:A:15:CYS:HB3	11	0.12
(1,313)	1:A:14:GLN:HG2	1:A:14:GLN:H	9	0.12
(1,313)	1:A:14:GLN:HG3	1:A:14:GLN:H	9	0.12
(1,313)	1:A:14:GLN:HG2	1:A:14:GLN:H	19	0.12
(1,313)	1:A:14:GLN:HG3	1:A:14:GLN:H	19	0.12
(1,312)	1:A:14:GLN:HG2	1:A:14:GLN:H	1	0.12
(1,312)	1:A:14:GLN:HG3	1:A:14:GLN:H	1	0.12
(1,308)	1:A:13:GLY:H	1:A:14:GLN:H	12	0.12
(1,308)	1:A:13:GLY:H	1:A:14:GLN:H	19	0.12
(1,308)	1:A:13:GLY:H	1:A:14:GLN:H	20	0.12
(1,302)	1:A:14:GLN:H	1:A:12:ASN:H	5	0.12
(1,302)	1:A:14:GLN:H	1:A:12:ASN:H	8	0.12

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,302)	1:A:14:GLN:H	1:A:12:ASN:H	12	0.12
(1,299)	1:A:11:ASN:H	1:A:12:ASN:H	5	0.12
(1,295)	1:A:15:CYS:HA	1:A:10:CYS:H	19	0.12
(1,279)	1:A:6:SER:HB2	1:A:6:SER:H	1	0.12
(1,279)	1:A:6:SER:HB3	1:A:6:SER:H	1	0.12
(1,279)	1:A:6:SER:HB2	1:A:6:SER:H	2	0.12
(1,279)	1:A:6:SER:HB3	1:A:6:SER:H	2	0.12
(1,279)	1:A:6:SER:HB2	1:A:6:SER:H	3	0.12
(1,279)	1:A:6:SER:HB3	1:A:6:SER:H	3	0.12
(1,279)	1:A:6:SER:HB2	1:A:6:SER:H	4	0.12
(1,279)	1:A:6:SER:HB3	1:A:6:SER:H	4	0.12
(1,279)	1:A:6:SER:HB2	1:A:6:SER:H	9	0.12
(1,279)	1:A:6:SER:HB3	1:A:6:SER:H	9	0.12
(1,277)	1:A:6:SER:HB2	1:A:6:SER:H	1	0.12
(1,277)	1:A:6:SER:HB3	1:A:6:SER:H	1	0.12
(1,277)	1:A:6:SER:HB2	1:A:6:SER:H	2	0.12
(1,277)	1:A:6:SER:HB3	1:A:6:SER:H	2	0.12
(1,277)	1:A:6:SER:HB2	1:A:6:SER:H	3	0.12
(1,277)	1:A:6:SER:HB3	1:A:6:SER:H	3	0.12
(1,277)	1:A:6:SER:HB2	1:A:6:SER:H	4	0.12
(1,277)	1:A:6:SER:HB3	1:A:6:SER:H	4	0.12
(1,277)	1:A:6:SER:HB2	1:A:6:SER:H	9	0.12
(1,277)	1:A:6:SER:HB3	1:A:6:SER:H	9	0.12
(1,257)	1:A:82:ASN:HB2	1:A:82:ASN:H	13	0.12
(1,257)	1:A:82:ASN:HB2	1:A:82:ASN:H	13	0.12
(1,257)	1:A:82:ASN:HB3	1:A:82:ASN:H	13	0.12
(1,257)	1:A:82:ASN:HB3	1:A:82:ASN:H	13	0.12
(1,248)	1:A:83:ILE:HB	1:A:84:THR:H	19	0.12
(1,240)	1:A:90:PHE:H	1:A:98:ILE:HD11	3	0.12
(1,240)	1:A:90:PHE:H	1:A:98:ILE:HD12	3	0.12
(1,240)	1:A:90:PHE:H	1:A:98:ILE:HD13	3	0.12
(1,240)	1:A:90:PHE:H	1:A:98:ILE:HD11	13	0.12
(1,240)	1:A:90:PHE:H	1:A:98:ILE:HD12	13	0.12
(1,240)	1:A:90:PHE:H	1:A:98:ILE:HD13	13	0.12
(1,237)	1:A:89:GLU:HB2	1:A:90:PHE:H	5	0.12
(1,237)	1:A:89:GLU:HB3	1:A:90:PHE:H	5	0.12
(1,220)	1:A:92:CYS:HB2	1:A:95:GLY:H	1	0.12
(1,220)	1:A:92:CYS:HB3	1:A:95:GLY:H	1	0.12
(1,220)	1:A:92:CYS:HB2	1:A:95:GLY:H	2	0.12
(1,220)	1:A:92:CYS:HB3	1:A:95:GLY:H	2	0.12
(1,209)	1:A:97:CYS:HB2	1:A:97:CYS:H	1	0.12
(1,209)	1:A:97:CYS:HB3	1:A:97:CYS:H	1	0.12

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,204)	1:A:98:ILE:HG12	1:A:98:ILE:H	19	0.12
(1,204)	1:A:98:ILE:HG13	1:A:98:ILE:H	19	0.12
(1,203)	1:A:89:GLU:HB2	1:A:98:ILE:H	14	0.12
(1,203)	1:A:89:GLU:HB3	1:A:98:ILE:H	14	0.12
(1,202)	1:A:97:CYS:HB2	1:A:98:ILE:H	15	0.12
(1,202)	1:A:97:CYS:HB3	1:A:98:ILE:H	15	0.12
(1,196)	1:A:98:ILE:HA	1:A:99:SER:H	10	0.12
(1,190)	1:A:101:ASN:HB2	1:A:101:ASN:H	5	0.12
(1,190)	1:A:101:ASN:HB3	1:A:101:ASN:H	5	0.12
(1,187)	1:A:103:VAL:HG11	1:A:102:PHE:H	5	0.12
(1,187)	1:A:103:VAL:HG12	1:A:102:PHE:H	5	0.12
(1,187)	1:A:103:VAL:HG13	1:A:102:PHE:H	5	0.12
(1,187)	1:A:103:VAL:HG21	1:A:102:PHE:H	5	0.12
(1,187)	1:A:103:VAL:HG22	1:A:102:PHE:H	5	0.12
(1,187)	1:A:103:VAL:HG23	1:A:102:PHE:H	5	0.12
(1,184)	1:A:103:VAL:HB	1:A:102:PHE:H	5	0.12
(1,165)	1:A:104:CYS:H	1:A:116:GLU:HA	4	0.12
(1,137)	1:A:109:ASP:H	1:A:113:GLY:HA2	1	0.12
(1,137)	1:A:109:ASP:H	1:A:113:GLY:HA3	1	0.12
(1,125)	1:A:114:SER:H	1:A:113:GLY:HA2	11	0.12
(1,125)	1:A:114:SER:H	1:A:113:GLY:HA3	11	0.12
(1,125)	1:A:114:SER:H	1:A:113:GLY:HA2	13	0.12
(1,125)	1:A:114:SER:H	1:A:113:GLY:HA3	13	0.12
(1,124)	1:A:117:LEU:HB2	1:A:115:ASP:H	1	0.12
(1,124)	1:A:117:LEU:HB3	1:A:115:ASP:H	1	0.12
(1,121)	1:A:114:SER:HA	1:A:115:ASP:H	13	0.12
(1,121)	1:A:114:SER:HA	1:A:115:ASP:H	15	0.12
(1,121)	1:A:114:SER:HA	1:A:115:ASP:H	20	0.12
(1,116)	1:A:116:GLU:HG2	1:A:116:GLU:H	1	0.12
(1,116)	1:A:116:GLU:HG3	1:A:116:GLU:H	1	0.12
(1,116)	1:A:116:GLU:HG2	1:A:116:GLU:H	3	0.12
(1,116)	1:A:116:GLU:HG3	1:A:116:GLU:H	3	0.12
(1,116)	1:A:116:GLU:HG2	1:A:116:GLU:H	8	0.12
(1,116)	1:A:116:GLU:HG3	1:A:116:GLU:H	8	0.12
(1,1)	1:A:112:ASP:H	1:A:113:GLY:H	14	0.12
(4,6)	1:A:51:CYS:H	1:A:57:GLN:O	4	0.11
(4,5)	1:A:49:ILE:O	1:A:59:ILE:H	20	0.11
(3,11)	2:A:202:CA:CA	1:A:76:ASP:OD2	1	0.11
(2,9)	1:A:51:CYS:HB2	1:A:72:ASP:H	9	0.11
(2,9)	1:A:51:CYS:HB3	1:A:72:ASP:H	9	0.11
(2,9)	1:A:71:CYS:HB3	1:A:72:ASP:H	9	0.11
(2,9)	1:A:51:CYS:HB2	1:A:72:ASP:H	10	0.11

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,9)	1:A:51:CYS:HB3	1:A:72:ASP:H	10	0.11
(2,9)	1:A:71:CYS:HB3	1:A:72:ASP:H	10	0.11
(2,88)	1:A:78:GLU:HG2	1:A:79:ASN:HD21	16	0.11
(2,88)	1:A:78:GLU:HG3	1:A:79:ASN:HD21	16	0.11
(2,88)	1:A:89:GLU:HB2	1:A:79:ASN:HD21	16	0.11
(2,88)	1:A:89:GLU:HB3	1:A:79:ASN:HD21	16	0.11
(2,66)	1:A:4:ALA:H	1:A:7:ASP:H	15	0.11
(2,66)	1:A:5:GLU:H	1:A:7:ASP:H	15	0.11
(2,61)	1:A:4:ALA:HA	1:A:5:GLU:H	10	0.11
(2,61)	1:A:6:SER:HA	1:A:5:GLU:H	10	0.11
(2,42)	1:A:49:ILE:HG21	1:A:61:VAL:H	9	0.11
(2,42)	1:A:49:ILE:HG22	1:A:61:VAL:H	9	0.11
(2,42)	1:A:49:ILE:HG23	1:A:61:VAL:H	9	0.11
(2,42)	1:A:59:ILE:HD11	1:A:61:VAL:H	9	0.11
(2,42)	1:A:59:ILE:HD12	1:A:61:VAL:H	9	0.11
(2,42)	1:A:59:ILE:HD13	1:A:61:VAL:H	9	0.11
(2,42)	1:A:60:PRO:HB2	1:A:61:VAL:H	9	0.11
(2,42)	1:A:60:PRO:HB3	1:A:61:VAL:H	9	0.11
(2,42)	1:A:61:VAL:HG11	1:A:61:VAL:H	9	0.11
(2,42)	1:A:61:VAL:HG12	1:A:61:VAL:H	9	0.11
(2,42)	1:A:61:VAL:HG13	1:A:61:VAL:H	9	0.11
(2,42)	1:A:61:VAL:HG21	1:A:61:VAL:H	9	0.11
(2,42)	1:A:61:VAL:HG22	1:A:61:VAL:H	9	0.11
(2,42)	1:A:61:VAL:HG23	1:A:61:VAL:H	9	0.11
(2,39)	1:A:98:ILE:HD11	1:A:115:ASP:H	3	0.11
(2,39)	1:A:98:ILE:HD12	1:A:115:ASP:H	3	0.11
(2,39)	1:A:98:ILE:HD13	1:A:115:ASP:H	3	0.11
(2,39)	1:A:117:LEU:HD11	1:A:115:ASP:H	3	0.11
(2,39)	1:A:117:LEU:HD12	1:A:115:ASP:H	3	0.11
(2,39)	1:A:117:LEU:HD13	1:A:115:ASP:H	3	0.11
(2,39)	1:A:117:LEU:HD21	1:A:115:ASP:H	3	0.11
(2,39)	1:A:117:LEU:HD22	1:A:115:ASP:H	3	0.11
(2,39)	1:A:117:LEU:HD23	1:A:115:ASP:H	3	0.11
(2,382)	1:A:72:ASP:HB2	1:A:73:SER:H	2	0.11
(2,382)	1:A:72:ASP:HB3	1:A:73:SER:H	2	0.11
(2,376)	1:A:61:VAL:HB	1:A:88:ASP:H	2	0.11
(2,376)	1:A:62:SER:H	1:A:88:ASP:H	2	0.11
(2,376)	1:A:87:PRO:HB2	1:A:88:ASP:H	2	0.11
(2,376)	1:A:87:PRO:HB3	1:A:88:ASP:H	2	0.11
(2,375)	1:A:48:GLU:HB2	1:A:61:VAL:H	19	0.11
(2,375)	1:A:48:GLU:HB3	1:A:61:VAL:H	19	0.11
(2,375)	1:A:60:PRO:HD3	1:A:61:VAL:H	19	0.11

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,374)	1:A:20:TRP:HA	1:A:23:ASP:H	2	0.11
(2,374)	1:A:25:ASP:HA	1:A:23:ASP:H	2	0.11
(2,365)	1:A:69:ASN:HA	1:A:70:ASP:H	17	0.11
(2,365)	1:A:70:ASP:HA	1:A:70:ASP:H	17	0.11
(2,36)	1:A:83:ILE:H	1:A:82:ASN:H	8	0.11
(2,36)	1:A:95:GLY:H	1:A:82:ASN:H	8	0.11
(2,359)	1:A:83:ILE:HD11	1:A:98:ILE:H	2	0.11
(2,359)	1:A:83:ILE:HD12	1:A:98:ILE:H	2	0.11
(2,359)	1:A:83:ILE:HD13	1:A:98:ILE:H	2	0.11
(2,359)	1:A:98:ILE:HD11	1:A:98:ILE:H	2	0.11
(2,359)	1:A:98:ILE:HD12	1:A:98:ILE:H	2	0.11
(2,359)	1:A:98:ILE:HD13	1:A:98:ILE:H	2	0.11
(2,349)	1:A:99:SER:HB2	1:A:101:ASN:H	18	0.11
(2,349)	1:A:99:SER:HB3	1:A:101:ASN:H	18	0.11
(2,349)	1:A:102:PHE:HB2	1:A:101:ASN:H	18	0.11
(2,349)	1:A:102:PHE:HB3	1:A:101:ASN:H	18	0.11
(2,348)	1:A:35:SER:HB2	1:A:35:SER:H	11	0.11
(2,348)	1:A:35:SER:HB3	1:A:35:SER:H	11	0.11
(2,348)	1:A:36:PRO:HA	1:A:35:SER:H	11	0.11
(2,348)	1:A:35:SER:HB2	1:A:35:SER:H	17	0.11
(2,348)	1:A:35:SER:HB3	1:A:35:SER:H	17	0.11
(2,348)	1:A:36:PRO:HA	1:A:35:SER:H	17	0.11
(2,345)	1:A:84:THR:HG1	1:A:85:CYS:H	9	0.11
(2,345)	1:A:84:THR:HG21	1:A:85:CYS:H	9	0.11
(2,345)	1:A:84:THR:HG22	1:A:85:CYS:H	9	0.11
(2,345)	1:A:84:THR:HG23	1:A:85:CYS:H	9	0.11
(2,345)	1:A:91:THR:HG21	1:A:85:CYS:H	9	0.11
(2,345)	1:A:91:THR:HG22	1:A:85:CYS:H	9	0.11
(2,345)	1:A:91:THR:HG23	1:A:85:CYS:H	9	0.11
(2,345)	1:A:84:THR:HG1	1:A:85:CYS:H	10	0.11
(2,345)	1:A:84:THR:HG21	1:A:85:CYS:H	10	0.11
(2,345)	1:A:84:THR:HG22	1:A:85:CYS:H	10	0.11
(2,345)	1:A:84:THR:HG23	1:A:85:CYS:H	10	0.11
(2,345)	1:A:91:THR:HG21	1:A:85:CYS:H	10	0.11
(2,345)	1:A:91:THR:HG22	1:A:85:CYS:H	10	0.11
(2,345)	1:A:91:THR:HG23	1:A:85:CYS:H	10	0.11
(2,345)	1:A:84:THR:HG1	1:A:85:CYS:H	11	0.11
(2,345)	1:A:84:THR:HG21	1:A:85:CYS:H	11	0.11
(2,345)	1:A:84:THR:HG22	1:A:85:CYS:H	11	0.11
(2,345)	1:A:84:THR:HG23	1:A:85:CYS:H	11	0.11
(2,345)	1:A:91:THR:HG21	1:A:85:CYS:H	11	0.11
(2,345)	1:A:91:THR:HG22	1:A:85:CYS:H	11	0.11

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,345)	1:A:91:THR:HG23	1:A:85:CYS:H	11	0.11
(2,342)	1:A:17:PRO:HB2	1:A:20:TRP:HE1	10	0.11
(2,342)	1:A:17:PRO:HB3	1:A:20:TRP:HE1	10	0.11
(2,342)	1:A:19:ARG:HB2	1:A:20:TRP:HE1	10	0.11
(2,342)	1:A:19:ARG:HB3	1:A:20:TRP:HE1	10	0.11
(2,34)	1:A:3:CYS:HB2	1:A:16:VAL:H	6	0.11
(2,34)	1:A:3:CYS:HB3	1:A:16:VAL:H	6	0.11
(2,34)	1:A:15:CYS:HB2	1:A:16:VAL:H	6	0.11
(2,34)	1:A:15:CYS:HB3	1:A:16:VAL:H	6	0.11
(2,328)	1:A:49:ILE:HG21	1:A:62:SER:H	18	0.11
(2,328)	1:A:49:ILE:HG22	1:A:62:SER:H	18	0.11
(2,328)	1:A:49:ILE:HG23	1:A:62:SER:H	18	0.11
(2,328)	1:A:59:ILE:HD11	1:A:62:SER:H	18	0.11
(2,328)	1:A:59:ILE:HD12	1:A:62:SER:H	18	0.11
(2,328)	1:A:59:ILE:HD13	1:A:62:SER:H	18	0.11
(2,328)	1:A:60:PRO:HB2	1:A:62:SER:H	18	0.11
(2,328)	1:A:60:PRO:HB3	1:A:62:SER:H	18	0.11
(2,328)	1:A:61:VAL:HG11	1:A:62:SER:H	18	0.11
(2,328)	1:A:61:VAL:HG12	1:A:62:SER:H	18	0.11
(2,328)	1:A:61:VAL:HG13	1:A:62:SER:H	18	0.11
(2,328)	1:A:61:VAL:HG21	1:A:62:SER:H	18	0.11
(2,328)	1:A:61:VAL:HG21	1:A:62:SER:H	18	0.11
(2,328)	1:A:61:VAL:HG22	1:A:62:SER:H	18	0.11
(2,328)	1:A:61:VAL:HG22	1:A:62:SER:H	18	0.11
(2,328)	1:A:61:VAL:HG23	1:A:62:SER:H	18	0.11
(2,328)	1:A:61:VAL:HG23	1:A:62:SER:H	18	0.11
(2,323)	1:A:64:ARG:HG2	1:A:68:GLU:H	4	0.11
(2,323)	1:A:64:ARG:HG3	1:A:68:GLU:H	4	0.11
(2,323)	1:A:68:GLU:HG3	1:A:68:GLU:H	4	0.11
(2,312)	1:A:73:SER:HB2	1:A:73:SER:H	8	0.11
(2,312)	1:A:73:SER:HB3	1:A:73:SER:H	8	0.11
(2,312)	1:A:74:GLY:HA2	1:A:73:SER:H	8	0.11
(2,312)	1:A:74:GLY:HA3	1:A:73:SER:H	8	0.11
(2,305)	1:A:72:ASP:HB2	1:A:72:ASP:H	6	0.11
(2,305)	1:A:72:ASP:HB3	1:A:72:ASP:H	6	0.11
(2,305)	1:A:72:ASP:HB3	1:A:72:ASP:H	6	0.11
(2,305)	1:A:76:ASP:HB2	1:A:72:ASP:H	6	0.11
(2,305)	1:A:76:ASP:HB2	1:A:72:ASP:H	6	0.11
(2,305)	1:A:76:ASP:HB3	1:A:72:ASP:H	6	0.11
(2,305)	1:A:72:ASP:HB2	1:A:72:ASP:H	16	0.11
(2,305)	1:A:72:ASP:HB3	1:A:72:ASP:H	16	0.11
(2,305)	1:A:72:ASP:HB3	1:A:72:ASP:H	16	0.11

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,305)	1:A:76:ASP:HB2	1:A:72:ASP:H	16	0.11
(2,305)	1:A:76:ASP:HB2	1:A:72:ASP:H	16	0.11
(2,305)	1:A:76:ASP:HB3	1:A:72:ASP:H	16	0.11
(2,305)	1:A:72:ASP:HB2	1:A:72:ASP:H	20	0.11
(2,305)	1:A:72:ASP:HB3	1:A:72:ASP:H	20	0.11
(2,305)	1:A:72:ASP:HB3	1:A:72:ASP:H	20	0.11
(2,305)	1:A:76:ASP:HB2	1:A:72:ASP:H	20	0.11
(2,305)	1:A:76:ASP:HB2	1:A:72:ASP:H	20	0.11
(2,305)	1:A:76:ASP:HB3	1:A:72:ASP:H	20	0.11
(2,300)	1:A:44:CYS:HB2	1:A:48:GLU:H	8	0.11
(2,300)	1:A:44:CYS:HB3	1:A:48:GLU:H	8	0.11
(2,300)	1:A:48:GLU:HG2	1:A:48:GLU:H	8	0.11
(2,300)	1:A:48:GLU:HG3	1:A:48:GLU:H	8	0.11
(2,300)	1:A:44:CYS:HB2	1:A:48:GLU:H	17	0.11
(2,300)	1:A:44:CYS:HB3	1:A:48:GLU:H	17	0.11
(2,300)	1:A:48:GLU:HG2	1:A:48:GLU:H	17	0.11
(2,300)	1:A:48:GLU:HG3	1:A:48:GLU:H	17	0.11
(2,290)	1:A:110:CYS:HB2	1:A:112:ASP:H	7	0.11
(2,290)	1:A:110:CYS:HB3	1:A:112:ASP:H	7	0.11
(2,290)	1:A:112:ASP:HB2	1:A:112:ASP:H	7	0.11
(2,290)	1:A:112:ASP:HB3	1:A:112:ASP:H	7	0.11
(2,288)	1:A:75:GLU:HB2	1:A:75:GLU:H	11	0.11
(2,288)	1:A:75:GLU:HB3	1:A:75:GLU:H	11	0.11
(2,287)	1:A:5:GLU:HB2	1:A:5:GLU:H	3	0.11
(2,287)	1:A:5:GLU:HB3	1:A:5:GLU:H	3	0.11
(2,287)	1:A:5:GLU:HB2	1:A:5:GLU:H	19	0.11
(2,287)	1:A:5:GLU:HB3	1:A:5:GLU:H	19	0.11
(2,285)	1:A:109:ASP:HB2	1:A:112:ASP:H	9	0.11
(2,285)	1:A:109:ASP:HB3	1:A:112:ASP:H	9	0.11
(2,285)	1:A:112:ASP:HB2	1:A:112:ASP:H	9	0.11
(2,285)	1:A:112:ASP:HB3	1:A:112:ASP:H	9	0.11
(2,281)	1:A:10:CYS:HA	1:A:11:ASN:HD22	17	0.11
(2,281)	1:A:11:ASN:HA	1:A:11:ASN:HD22	17	0.11
(2,279)	1:A:10:CYS:HA	1:A:11:ASN:H	18	0.11
(2,279)	1:A:11:ASN:HA	1:A:11:ASN:H	18	0.11
(2,263)	1:A:62:SER:HB2	1:A:63:TRP:H	8	0.11
(2,263)	1:A:62:SER:HB3	1:A:63:TRP:H	8	0.11
(2,263)	1:A:63:TRP:HB2	1:A:63:TRP:H	8	0.11
(2,261)	1:A:110:CYS:HB2	1:A:110:CYS:H	1	0.11
(2,261)	1:A:110:CYS:HB3	1:A:110:CYS:H	1	0.11
(2,261)	1:A:111:SER:HB2	1:A:110:CYS:H	1	0.11
(2,261)	1:A:113:GLY:HA2	1:A:110:CYS:H	1	0.11

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,261)	1:A:113:GLY:HA3	1:A:110:CYS:H	1	0.11
(2,261)	1:A:110:CYS:HB2	1:A:110:CYS:H	3	0.11
(2,261)	1:A:110:CYS:HB3	1:A:110:CYS:H	3	0.11
(2,261)	1:A:111:SER:HB2	1:A:110:CYS:H	3	0.11
(2,261)	1:A:113:GLY:HA2	1:A:110:CYS:H	3	0.11
(2,261)	1:A:113:GLY:HA3	1:A:110:CYS:H	3	0.11
(2,238)	1:A:10:CYS:HB2	1:A:11:ASN:H	7	0.11
(2,238)	1:A:10:CYS:HB3	1:A:11:ASN:H	7	0.11
(2,238)	1:A:11:ASN:HB2	1:A:11:ASN:H	7	0.11
(2,238)	1:A:11:ASN:HB3	1:A:11:ASN:H	7	0.11
(2,238)	1:A:28:CYS:HB2	1:A:11:ASN:H	7	0.11
(2,238)	1:A:28:CYS:HB3	1:A:11:ASN:H	7	0.11
(2,238)	1:A:10:CYS:HB2	1:A:11:ASN:H	9	0.11
(2,238)	1:A:10:CYS:HB3	1:A:11:ASN:H	9	0.11
(2,238)	1:A:11:ASN:HB2	1:A:11:ASN:H	9	0.11
(2,238)	1:A:11:ASN:HB3	1:A:11:ASN:H	9	0.11
(2,238)	1:A:28:CYS:HB2	1:A:11:ASN:H	9	0.11
(2,238)	1:A:28:CYS:HB3	1:A:11:ASN:H	9	0.11
(2,233)	1:A:14:GLN:HB2	1:A:14:GLN:HE22	7	0.11
(2,233)	1:A:14:GLN:HB3	1:A:14:GLN:HE22	7	0.11
(2,233)	1:A:14:GLN:HB2	1:A:14:GLN:HE22	8	0.11
(2,233)	1:A:14:GLN:HB3	1:A:14:GLN:HE22	8	0.11
(2,233)	1:A:14:GLN:HB2	1:A:14:GLN:HE22	12	0.11
(2,233)	1:A:14:GLN:HB3	1:A:14:GLN:HE22	12	0.11
(2,233)	1:A:14:GLN:HB2	1:A:14:GLN:HE22	16	0.11
(2,233)	1:A:14:GLN:HB3	1:A:14:GLN:HE22	16	0.11
(2,228)	1:A:28:CYS:HB2	1:A:28:CYS:H	6	0.11
(2,228)	1:A:28:CYS:HB3	1:A:28:CYS:H	6	0.11
(2,228)	1:A:29:GLU:HA	1:A:28:CYS:H	6	0.11
(2,228)	1:A:32:SER:HA	1:A:28:CYS:H	6	0.11
(2,22)	1:A:75:GLU:HA	1:A:78:GLU:H	17	0.11
(2,22)	1:A:87:PRO:HD2	1:A:78:GLU:H	17	0.11
(2,213)	1:A:7:ASP:HB2	1:A:18:SER:H	16	0.11
(2,213)	1:A:7:ASP:HB3	1:A:18:SER:H	16	0.11
(2,213)	1:A:17:PRO:HD2	1:A:18:SER:H	16	0.11
(2,209)	1:A:28:CYS:HB2	1:A:31:GLY:H	2	0.11
(2,209)	1:A:28:CYS:HB3	1:A:31:GLY:H	2	0.11
(2,209)	1:A:29:GLU:HA	1:A:31:GLY:H	2	0.11
(2,209)	1:A:32:SER:HA	1:A:31:GLY:H	2	0.11
(2,209)	1:A:32:SER:HB2	1:A:31:GLY:H	2	0.11
(2,209)	1:A:32:SER:HB3	1:A:31:GLY:H	2	0.11
(2,209)	1:A:28:CYS:HB2	1:A:31:GLY:H	5	0.11

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,209)	1:A:28:CYS:HB3	1:A:31:GLY:H	5	0.11
(2,209)	1:A:29:GLU:HA	1:A:31:GLY:H	5	0.11
(2,209)	1:A:32:SER:HA	1:A:31:GLY:H	5	0.11
(2,209)	1:A:32:SER:HB2	1:A:31:GLY:H	5	0.11
(2,209)	1:A:32:SER:HB3	1:A:31:GLY:H	5	0.11
(2,206)	1:A:23:ASP:HB2	1:A:22:CYS:H	20	0.11
(2,206)	1:A:34:GLU:HB3	1:A:22:CYS:H	20	0.11
(2,206)	1:A:39:CYS:HB2	1:A:22:CYS:H	20	0.11
(2,200)	1:A:77:GLU:HG2	1:A:76:ASP:H	3	0.11
(2,200)	1:A:77:GLU:HG3	1:A:76:ASP:H	3	0.11
(2,200)	1:A:87:PRO:HG2	1:A:76:ASP:H	3	0.11
(2,200)	1:A:87:PRO:HG3	1:A:76:ASP:H	3	0.11
(2,200)	1:A:77:GLU:HG2	1:A:76:ASP:H	11	0.11
(2,200)	1:A:77:GLU:HG3	1:A:76:ASP:H	11	0.11
(2,200)	1:A:87:PRO:HG2	1:A:76:ASP:H	11	0.11
(2,200)	1:A:87:PRO:HG3	1:A:76:ASP:H	11	0.11
(2,195)	1:A:3:CYS:HB2	1:A:18:SER:H	7	0.11
(2,195)	1:A:3:CYS:HB3	1:A:18:SER:H	7	0.11
(2,195)	1:A:7:ASP:HB2	1:A:18:SER:H	7	0.11
(2,195)	1:A:7:ASP:HB3	1:A:18:SER:H	7	0.11
(2,191)	1:A:53:ALA:H	1:A:55:SER:H	5	0.11
(2,191)	1:A:54:HIS:H	1:A:55:SER:H	5	0.11
(2,191)	1:A:56:THR:H	1:A:55:SER:H	5	0.11
(2,188)	1:A:16:VAL:HG11	1:A:19:ARG:H	12	0.11
(2,188)	1:A:16:VAL:HG12	1:A:19:ARG:H	12	0.11
(2,188)	1:A:16:VAL:HG13	1:A:19:ARG:H	12	0.11
(2,188)	1:A:16:VAL:HG21	1:A:19:ARG:H	12	0.11
(2,188)	1:A:16:VAL:HG22	1:A:19:ARG:H	12	0.11
(2,188)	1:A:16:VAL:HG23	1:A:19:ARG:H	12	0.11
(2,188)	1:A:16:VAL:HG11	1:A:19:ARG:H	14	0.11
(2,188)	1:A:16:VAL:HG12	1:A:19:ARG:H	14	0.11
(2,188)	1:A:16:VAL:HG13	1:A:19:ARG:H	14	0.11
(2,188)	1:A:16:VAL:HG21	1:A:19:ARG:H	14	0.11
(2,188)	1:A:16:VAL:HG22	1:A:19:ARG:H	14	0.11
(2,188)	1:A:16:VAL:HG23	1:A:19:ARG:H	14	0.11
(2,185)	1:A:3:CYS:HB2	1:A:15:CYS:H	16	0.11
(2,185)	1:A:3:CYS:HB3	1:A:15:CYS:H	16	0.11
(2,185)	1:A:15:CYS:HB2	1:A:15:CYS:H	16	0.11
(2,185)	1:A:15:CYS:HB3	1:A:15:CYS:H	16	0.11
(2,185)	1:A:3:CYS:HB2	1:A:15:CYS:H	20	0.11
(2,185)	1:A:3:CYS:HB3	1:A:15:CYS:H	20	0.11
(2,185)	1:A:15:CYS:HB2	1:A:15:CYS:H	20	0.11

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,185)	1:A:15:CYS:HB3	1:A:15:CYS:H	20	0.11
(2,18)	1:A:111:SER:HA	1:A:113:GLY:H	19	0.11
(2,18)	1:A:113:GLY:HA2	1:A:113:GLY:H	19	0.11
(2,18)	1:A:113:GLY:HA3	1:A:113:GLY:H	19	0.11
(2,179)	1:A:9:VAL:HG11	1:A:10:CYS:H	1	0.11
(2,179)	1:A:9:VAL:HG12	1:A:10:CYS:H	1	0.11
(2,179)	1:A:9:VAL:HG13	1:A:10:CYS:H	1	0.11
(2,179)	1:A:9:VAL:HG21	1:A:10:CYS:H	1	0.11
(2,179)	1:A:9:VAL:HG22	1:A:10:CYS:H	1	0.11
(2,179)	1:A:9:VAL:HG23	1:A:10:CYS:H	1	0.11
(2,173)	1:A:69:ASN:HD21	1:A:69:ASN:H	15	0.11
(2,164)	1:A:14:GLN:HB2	1:A:14:GLN:H	18	0.11
(2,164)	1:A:14:GLN:HB3	1:A:14:GLN:H	18	0.11
(2,151)	1:A:46:ILE:HD11	1:A:46:ILE:H	12	0.11
(2,151)	1:A:46:ILE:HD12	1:A:46:ILE:H	12	0.11
(2,151)	1:A:46:ILE:HD13	1:A:46:ILE:H	12	0.11
(2,151)	1:A:46:ILE:HG21	1:A:46:ILE:H	12	0.11
(2,151)	1:A:46:ILE:HG22	1:A:46:ILE:H	12	0.11
(2,151)	1:A:46:ILE:HG23	1:A:46:ILE:H	12	0.11
(2,150)	1:A:11:ASN:HB2	1:A:31:GLY:H	20	0.11
(2,150)	1:A:11:ASN:HB3	1:A:31:GLY:H	20	0.11
(2,150)	1:A:28:CYS:HB2	1:A:31:GLY:H	20	0.11
(2,150)	1:A:28:CYS:HB3	1:A:31:GLY:H	20	0.11
(2,137)	1:A:116:GLU:HB2	1:A:117:LEU:H	11	0.11
(2,137)	1:A:116:GLU:HB3	1:A:117:LEU:H	11	0.11
(2,137)	1:A:117:LEU:HB2	1:A:117:LEU:H	11	0.11
(2,137)	1:A:117:LEU:HB3	1:A:117:LEU:H	11	0.11
(2,132)	1:A:45:ARG:HB2	1:A:45:ARG:H	13	0.11
(2,132)	1:A:45:ARG:HB3	1:A:45:ARG:H	13	0.11
(2,132)	1:A:46:ILE:HG12	1:A:45:ARG:H	13	0.11
(2,132)	1:A:46:ILE:HG13	1:A:45:ARG:H	13	0.11
(2,123)	1:A:16:VAL:HG11	1:A:33:ASP:H	17	0.11
(2,123)	1:A:16:VAL:HG12	1:A:33:ASP:H	17	0.11
(2,123)	1:A:16:VAL:HG13	1:A:33:ASP:H	17	0.11
(2,123)	1:A:16:VAL:HG21	1:A:33:ASP:H	17	0.11
(2,123)	1:A:16:VAL:HG22	1:A:33:ASP:H	17	0.11
(2,123)	1:A:16:VAL:HG23	1:A:33:ASP:H	17	0.11
(2,122)	1:A:7:ASP:HA	1:A:16:VAL:H	6	0.11
(2,122)	1:A:16:VAL:HA	1:A:16:VAL:H	6	0.11
(2,122)	1:A:7:ASP:HA	1:A:16:VAL:H	8	0.11
(2,122)	1:A:16:VAL:HA	1:A:16:VAL:H	8	0.11
(2,122)	1:A:7:ASP:HA	1:A:16:VAL:H	10	0.11

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,122)	1:A:16:VAL:HA	1:A:16:VAL:H	10	0.11
(2,122)	1:A:7:ASP:HA	1:A:16:VAL:H	13	0.11
(2,122)	1:A:16:VAL:HA	1:A:16:VAL:H	13	0.11
(2,122)	1:A:7:ASP:HA	1:A:16:VAL:H	14	0.11
(2,122)	1:A:16:VAL:HA	1:A:16:VAL:H	14	0.11
(2,117)	1:A:14:GLN:HB2	1:A:12:ASN:HD21	6	0.11
(2,117)	1:A:14:GLN:HB3	1:A:12:ASN:HD21	6	0.11
(2,112)	1:A:83:ILE:HG12	1:A:84:THR:H	6	0.11
(2,112)	1:A:83:ILE:HG13	1:A:84:THR:H	6	0.11
(2,112)	1:A:84:THR:HG1	1:A:84:THR:H	6	0.11
(2,112)	1:A:84:THR:HG21	1:A:84:THR:H	6	0.11
(2,112)	1:A:84:THR:HG22	1:A:84:THR:H	6	0.11
(2,112)	1:A:84:THR:HG23	1:A:84:THR:H	6	0.11
(2,108)	1:A:92:CYS:H	1:A:95:GLY:H	3	0.11
(2,108)	1:A:93:SER:H	1:A:95:GLY:H	3	0.11
(2,107)	1:A:34:GLU:HA	1:A:44:CYS:H	8	0.11
(2,107)	1:A:35:SER:HA	1:A:44:CYS:H	8	0.11
(2,107)	1:A:44:CYS:HA	1:A:44:CYS:H	8	0.11
(2,107)	1:A:34:GLU:HA	1:A:44:CYS:H	10	0.11
(2,107)	1:A:35:SER:HA	1:A:44:CYS:H	10	0.11
(2,107)	1:A:44:CYS:HA	1:A:44:CYS:H	10	0.11
(2,107)	1:A:34:GLU:HA	1:A:44:CYS:H	17	0.11
(2,107)	1:A:35:SER:HA	1:A:44:CYS:H	17	0.11
(2,107)	1:A:44:CYS:HA	1:A:44:CYS:H	17	0.11
(2,106)	1:A:24:GLY:HA2	1:A:24:GLY:H	10	0.11
(2,106)	1:A:24:GLY:HA3	1:A:24:GLY:H	10	0.11
(2,106)	1:A:45:ARG:HA	1:A:24:GLY:H	10	0.11
(1,99)	1:A:98:ILE:HG12	1:A:99:SER:H	19	0.11
(1,99)	1:A:98:ILE:HG13	1:A:99:SER:H	19	0.11
(1,931)	1:A:99:SER:HB2	1:A:102:PHE:HD1	16	0.11
(1,931)	1:A:99:SER:HB2	1:A:102:PHE:HD2	16	0.11
(1,931)	1:A:99:SER:HB3	1:A:102:PHE:HD1	16	0.11
(1,931)	1:A:99:SER:HB3	1:A:102:PHE:HD2	16	0.11
(1,916)	1:A:77:GLU:HB2	1:A:77:GLU:H	5	0.11
(1,916)	1:A:77:GLU:HB3	1:A:77:GLU:H	5	0.11
(1,915)	1:A:51:CYS:HA	1:A:71:CYS:H	5	0.11
(1,911)	1:A:57:GLN:HE21	1:A:71:CYS:H	12	0.11
(1,91)	1:A:14:GLN:HG2	1:A:15:CYS:H	2	0.11
(1,91)	1:A:14:GLN:HG3	1:A:15:CYS:H	2	0.11
(1,909)	1:A:43:THR:HG1	1:A:46:ILE:H	6	0.11
(1,909)	1:A:43:THR:HG21	1:A:46:ILE:H	6	0.11
(1,909)	1:A:43:THR:HG22	1:A:46:ILE:H	6	0.11

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,909)	1:A:43:THR:HG23	1:A:46:ILE:H	6	0.11
(1,906)	1:A:13:GLY:HA2	1:A:12:ASN:HD22	8	0.11
(1,906)	1:A:13:GLY:HA3	1:A:12:ASN:HD22	8	0.11
(1,906)	1:A:13:GLY:HA2	1:A:12:ASN:HD22	16	0.11
(1,906)	1:A:13:GLY:HA3	1:A:12:ASN:HD22	16	0.11
(1,905)	1:A:101:ASN:HD21	1:A:105:ASN:HD21	5	0.11
(1,905)	1:A:101:ASN:HD21	1:A:105:ASN:HD21	13	0.11
(1,9)	1:A:12:ASN:H	1:A:11:ASN:H	7	0.11
(1,897)	1:A:77:GLU:HB2	1:A:69:ASN:HD22	10	0.11
(1,897)	1:A:77:GLU:HB3	1:A:69:ASN:HD22	10	0.11
(1,895)	1:A:77:GLU:HG2	1:A:66:ASP:H	6	0.11
(1,895)	1:A:77:GLU:HG3	1:A:66:ASP:H	6	0.11
(1,894)	1:A:66:ASP:H	1:A:77:GLU:HG2	6	0.11
(1,894)	1:A:66:ASP:H	1:A:77:GLU:HG3	6	0.11
(1,891)	1:A:64:ARG:H	1:A:80:CYS:HB2	15	0.11
(1,891)	1:A:64:ARG:H	1:A:80:CYS:HB3	15	0.11
(1,888)	1:A:49:ILE:HA	1:A:61:VAL:H	14	0.11
(1,884)	1:A:50:SER:H	1:A:59:ILE:H	5	0.11
(1,876)	1:A:39:CYS:HB2	1:A:43:THR:H	5	0.11
(1,876)	1:A:39:CYS:HB3	1:A:43:THR:H	5	0.11
(1,876)	1:A:39:CYS:HB2	1:A:43:THR:H	11	0.11
(1,876)	1:A:39:CYS:HB3	1:A:43:THR:H	11	0.11
(1,876)	1:A:39:CYS:HB2	1:A:43:THR:H	12	0.11
(1,876)	1:A:39:CYS:HB3	1:A:43:THR:H	12	0.11
(1,876)	1:A:39:CYS:HB2	1:A:43:THR:H	17	0.11
(1,876)	1:A:39:CYS:HB3	1:A:43:THR:H	17	0.11
(1,872)	1:A:32:SER:H	1:A:33:ASP:HB2	7	0.11
(1,872)	1:A:32:SER:H	1:A:33:ASP:HB3	7	0.11
(1,872)	1:A:32:SER:H	1:A:33:ASP:HB2	20	0.11
(1,872)	1:A:32:SER:H	1:A:33:ASP:HB3	20	0.11
(1,869)	1:A:14:GLN:HE22	1:A:28:CYS:H	2	0.11
(1,867)	1:A:34:GLU:HG2	1:A:24:GLY:H	7	0.11
(1,867)	1:A:34:GLU:HG3	1:A:24:GLY:H	7	0.11
(1,867)	1:A:34:GLU:HG2	1:A:24:GLY:H	13	0.11
(1,867)	1:A:34:GLU:HG3	1:A:24:GLY:H	13	0.11
(1,862)	1:A:21:LYS:HE2	1:A:19:ARG:H	11	0.11
(1,862)	1:A:21:LYS:HE3	1:A:19:ARG:H	11	0.11
(1,852)	1:A:14:GLN:HG2	1:A:12:ASN:H	18	0.11
(1,852)	1:A:14:GLN:HG3	1:A:12:ASN:H	18	0.11
(1,846)	1:A:38:GLN:HE21	1:A:9:VAL:H	4	0.11
(1,838)	1:A:58:CYS:HA	1:A:52:GLY:H	6	0.11
(1,838)	1:A:58:CYS:HA	1:A:52:GLY:H	12	0.11

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,837)	1:A:50:SER:H	1:A:45:ARG:HD2	3	0.11
(1,837)	1:A:50:SER:H	1:A:45:ARG:HD3	3	0.11
(1,832)	1:A:35:SER:H	1:A:38:GLN:H	16	0.11
(1,832)	1:A:35:SER:H	1:A:38:GLN:H	19	0.11
(1,828)	1:A:85:CYS:HA	1:A:86:SER:H	8	0.11
(1,817)	1:A:112:ASP:HB2	1:A:114:SER:H	9	0.11
(1,817)	1:A:112:ASP:HB3	1:A:114:SER:H	9	0.11
(1,809)	1:A:106:GLY:H	1:A:104:CYS:H	12	0.11
(1,79)	1:A:61:VAL:HB	1:A:61:VAL:H	17	0.11
(1,787)	1:A:73:SER:H	1:A:76:ASP:H	8	0.11
(1,787)	1:A:73:SER:H	1:A:76:ASP:H	14	0.11
(1,787)	1:A:73:SER:H	1:A:76:ASP:H	18	0.11
(1,784)	1:A:71:CYS:HB2	1:A:76:ASP:H	13	0.11
(1,784)	1:A:71:CYS:HB3	1:A:76:ASP:H	13	0.11
(1,781)	1:A:73:SER:H	1:A:71:CYS:HB2	3	0.11
(1,781)	1:A:73:SER:H	1:A:71:CYS:HB3	3	0.11
(1,781)	1:A:73:SER:H	1:A:71:CYS:HB2	5	0.11
(1,781)	1:A:73:SER:H	1:A:71:CYS:HB3	5	0.11
(1,781)	1:A:73:SER:H	1:A:71:CYS:HB2	16	0.11
(1,781)	1:A:73:SER:H	1:A:71:CYS:HB3	16	0.11
(1,750)	1:A:57:GLN:HB2	1:A:52:GLY:H	6	0.11
(1,750)	1:A:57:GLN:HB2	1:A:52:GLY:H	6	0.11
(1,750)	1:A:57:GLN:HB3	1:A:52:GLY:H	6	0.11
(1,750)	1:A:57:GLN:HB3	1:A:52:GLY:H	6	0.11
(1,74)	1:A:65:CYS:H	1:A:65:CYS:HB2	19	0.11
(1,74)	1:A:65:CYS:H	1:A:65:CYS:HB3	19	0.11
(1,734)	1:A:32:SER:H	1:A:11:ASN:H	16	0.11
(1,731)	1:A:28:CYS:HB2	1:A:32:SER:H	4	0.11
(1,731)	1:A:28:CYS:HB3	1:A:32:SER:H	4	0.11
(1,726)	1:A:34:GLU:HG2	1:A:27:ASP:H	15	0.11
(1,726)	1:A:34:GLU:HG3	1:A:27:ASP:H	15	0.11
(1,726)	1:A:34:GLU:HG2	1:A:27:ASP:H	20	0.11
(1,726)	1:A:34:GLU:HG3	1:A:27:ASP:H	20	0.11
(1,717)	1:A:20:TRP:HE1	1:A:20:TRP:H	15	0.11
(1,716)	1:A:28:CYS:HB2	1:A:14:GLN:HE22	3	0.11
(1,716)	1:A:28:CYS:HB3	1:A:14:GLN:HE22	3	0.11
(1,712)	1:A:32:SER:H	1:A:11:ASN:H	16	0.11
(1,709)	1:A:45:ARG:HD2	1:A:45:ARG:H	19	0.11
(1,709)	1:A:45:ARG:HD3	1:A:45:ARG:H	19	0.11
(1,708)	1:A:44:CYS:HB2	1:A:45:ARG:H	20	0.11
(1,708)	1:A:44:CYS:HB3	1:A:45:ARG:H	20	0.11
(1,707)	1:A:45:ARG:HD2	1:A:45:ARG:H	19	0.11

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,707)	1:A:45:ARG:HD3	1:A:45:ARG:H	19	0.11
(1,7)	1:A:22:CYS:H	1:A:23:ASP:H	17	0.11
(1,696)	1:A:44:CYS:HB2	1:A:34:GLU:H	8	0.11
(1,696)	1:A:44:CYS:HB3	1:A:34:GLU:H	8	0.11
(1,689)	1:A:69:ASN:HD21	1:A:69:ASN:H	15	0.11
(1,682)	1:A:79:ASN:HD22	1:A:87:PRO:HD2	8	0.11
(1,682)	1:A:79:ASN:HD22	1:A:87:PRO:HD3	8	0.11
(1,680)	1:A:79:ASN:HD22	1:A:79:ASN:HB2	13	0.11
(1,680)	1:A:79:ASN:HD22	1:A:79:ASN:HB3	13	0.11
(1,673)	1:A:17:PRO:HB2	1:A:20:TRP:HE1	11	0.11
(1,673)	1:A:17:PRO:HB3	1:A:20:TRP:HE1	11	0.11
(1,67)	1:A:19:ARG:H	1:A:18:SER:H	4	0.11
(1,662)	1:A:102:PHE:HB2	1:A:105:ASN:HD21	3	0.11
(1,662)	1:A:102:PHE:HB3	1:A:105:ASN:HD21	3	0.11
(1,662)	1:A:102:PHE:HB2	1:A:105:ASN:HD21	4	0.11
(1,662)	1:A:102:PHE:HB3	1:A:105:ASN:HD21	4	0.11
(1,658)	1:A:102:PHE:HA	1:A:105:ASN:HD22	13	0.11
(1,652)	1:A:101:ASN:HD21	1:A:101:ASN:HB2	6	0.11
(1,652)	1:A:101:ASN:HD21	1:A:101:ASN:HB3	6	0.11
(1,652)	1:A:101:ASN:HD21	1:A:101:ASN:HB2	17	0.11
(1,652)	1:A:101:ASN:HD21	1:A:101:ASN:HB3	17	0.11
(1,645)	1:A:101:ASN:HD22	1:A:101:ASN:H	15	0.11
(1,631)	1:A:79:ASN:HD22	1:A:79:ASN:H	16	0.11
(1,631)	1:A:79:ASN:HD22	1:A:79:ASN:H	19	0.11
(1,627)	1:A:72:ASP:HA	1:A:57:GLN:HE22	3	0.11
(1,627)	1:A:72:ASP:HA	1:A:57:GLN:HE22	6	0.11
(1,626)	1:A:71:CYS:HA	1:A:57:GLN:HE22	10	0.11
(1,623)	1:A:30:ASP:HB2	1:A:12:ASN:HD22	18	0.11
(1,623)	1:A:30:ASP:HB3	1:A:12:ASN:HD22	18	0.11
(1,607)	1:A:11:ASN:HB2	1:A:11:ASN:HD21	3	0.11
(1,607)	1:A:11:ASN:HB3	1:A:11:ASN:HD21	3	0.11
(1,600)	1:A:11:ASN:H	1:A:11:ASN:HD21	8	0.11
(1,600)	1:A:11:ASN:H	1:A:11:ASN:HD21	20	0.11
(1,598)	1:A:74:GLY:HA2	1:A:69:ASN:HD22	15	0.11
(1,598)	1:A:74:GLY:HA3	1:A:69:ASN:HD22	15	0.11
(1,597)	1:A:74:GLY:HA2	1:A:69:ASN:HD22	15	0.11
(1,597)	1:A:74:GLY:HA3	1:A:69:ASN:HD22	15	0.11
(1,59)	1:A:65:CYS:H	1:A:66:ASP:H	8	0.11
(1,588)	1:A:12:ASN:HA	1:A:13:GLY:H	12	0.11
(1,580)	1:A:48:GLU:HG2	1:A:49:ILE:H	18	0.11
(1,580)	1:A:48:GLU:HG3	1:A:49:ILE:H	18	0.11
(1,571)	1:A:85:CYS:HB2	1:A:85:CYS:H	16	0.11

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,571)	1:A:85:CYS:HB3	1:A:85:CYS:H	16	0.11
(1,565)	1:A:91:THR:HG1	1:A:91:THR:H	13	0.11
(1,565)	1:A:91:THR:HG21	1:A:91:THR:H	13	0.11
(1,565)	1:A:91:THR:HG22	1:A:91:THR:H	13	0.11
(1,565)	1:A:91:THR:HG23	1:A:91:THR:H	13	0.11
(1,565)	1:A:91:THR:HG1	1:A:91:THR:H	14	0.11
(1,565)	1:A:91:THR:HG21	1:A:91:THR:H	14	0.11
(1,565)	1:A:91:THR:HG22	1:A:91:THR:H	14	0.11
(1,565)	1:A:91:THR:HG23	1:A:91:THR:H	14	0.11
(1,56)	1:A:70:ASP:H	1:A:71:CYS:H	11	0.11
(1,56)	1:A:70:ASP:H	1:A:71:CYS:H	13	0.11
(1,551)	1:A:104:CYS:HB2	1:A:104:CYS:H	10	0.11
(1,551)	1:A:104:CYS:HB3	1:A:104:CYS:H	10	0.11
(1,550)	1:A:104:CYS:HB2	1:A:104:CYS:H	10	0.11
(1,550)	1:A:104:CYS:HB3	1:A:104:CYS:H	10	0.11
(1,541)	1:A:115:ASP:HB2	1:A:116:GLU:H	19	0.11
(1,541)	1:A:115:ASP:HB3	1:A:116:GLU:H	19	0.11
(1,534)	1:A:77:GLU:HB2	1:A:77:GLU:H	7	0.11
(1,534)	1:A:77:GLU:HB3	1:A:77:GLU:H	7	0.11
(1,53)	1:A:77:GLU:H	1:A:76:ASP:H	8	0.11
(1,527)	1:A:67:GLY:HA2	1:A:67:GLY:H	2	0.11
(1,527)	1:A:67:GLY:HA3	1:A:67:GLY:H	2	0.11
(1,527)	1:A:67:GLY:HA2	1:A:67:GLY:H	3	0.11
(1,527)	1:A:67:GLY:HA3	1:A:67:GLY:H	3	0.11
(1,527)	1:A:67:GLY:HA2	1:A:67:GLY:H	13	0.11
(1,527)	1:A:67:GLY:HA3	1:A:67:GLY:H	13	0.11
(1,527)	1:A:67:GLY:HA2	1:A:67:GLY:H	20	0.11
(1,527)	1:A:67:GLY:HA3	1:A:67:GLY:H	20	0.11
(1,52)	1:A:76:ASP:H	1:A:77:GLU:H	8	0.11
(1,512)	1:A:59:ILE:H	1:A:49:ILE:H	1	0.11
(1,501)	1:A:34:GLU:HB2	1:A:34:GLU:H	12	0.11
(1,501)	1:A:34:GLU:HB3	1:A:34:GLU:H	12	0.11
(1,496)	1:A:31:GLY:HA2	1:A:31:GLY:H	6	0.11
(1,496)	1:A:31:GLY:HA3	1:A:31:GLY:H	6	0.11
(1,495)	1:A:31:GLY:H	1:A:29:GLU:H	20	0.11
(1,479)	1:A:9:VAL:HG11	1:A:9:VAL:H	3	0.11
(1,479)	1:A:9:VAL:HG12	1:A:9:VAL:H	3	0.11
(1,479)	1:A:9:VAL:HG13	1:A:9:VAL:H	3	0.11
(1,479)	1:A:9:VAL:HG21	1:A:9:VAL:H	3	0.11
(1,479)	1:A:9:VAL:HG22	1:A:9:VAL:H	3	0.11
(1,479)	1:A:9:VAL:HG23	1:A:9:VAL:H	3	0.11
(1,478)	1:A:9:VAL:HB	1:A:9:VAL:H	15	0.11

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,477)	1:A:9:VAL:HA	1:A:9:VAL:H	15	0.11
(1,475)	1:A:75:GLU:H	1:A:76:ASP:H	11	0.11
(1,462)	1:A:79:ASN:H	1:A:78:GLU:H	13	0.11
(1,461)	1:A:76:ASP:H	1:A:78:GLU:H	8	0.11
(1,451)	1:A:75:GLU:H	1:A:76:ASP:H	11	0.11
(1,446)	1:A:73:SER:H	1:A:74:GLY:H	18	0.11
(1,437)	1:A:72:ASP:H	1:A:71:CYS:H	1	0.11
(1,437)	1:A:72:ASP:H	1:A:71:CYS:H	5	0.11
(1,435)	1:A:72:ASP:HA	1:A:72:ASP:H	10	0.11
(1,435)	1:A:72:ASP:HA	1:A:72:ASP:H	14	0.11
(1,435)	1:A:72:ASP:HA	1:A:72:ASP:H	18	0.11
(1,431)	1:A:72:ASP:H	1:A:70:ASP:H	20	0.11
(1,42)	1:A:96:ARG:H	1:A:97:CYS:H	13	0.11
(1,418)	1:A:64:ARG:HA	1:A:66:ASP:H	4	0.11
(1,418)	1:A:64:ARG:HA	1:A:66:ASP:H	6	0.11
(1,415)	1:A:64:ARG:HA	1:A:65:CYS:H	12	0.11
(1,414)	1:A:63:TRP:H	1:A:63:TRP:HB2	2	0.11
(1,414)	1:A:63:TRP:H	1:A:63:TRP:HB3	2	0.11
(1,41)	1:A:96:ARG:H	1:A:97:CYS:H	13	0.11
(1,399)	1:A:54:HIS:H	1:A:53:ALA:HB1	6	0.11
(1,399)	1:A:54:HIS:H	1:A:53:ALA:HB2	6	0.11
(1,399)	1:A:54:HIS:H	1:A:53:ALA:HB3	6	0.11
(1,392)	1:A:52:GLY:HA2	1:A:53:ALA:H	5	0.11
(1,392)	1:A:52:GLY:HA3	1:A:53:ALA:H	5	0.11
(1,392)	1:A:52:GLY:HA2	1:A:53:ALA:H	10	0.11
(1,392)	1:A:52:GLY:HA3	1:A:53:ALA:H	10	0.11
(1,392)	1:A:52:GLY:HA2	1:A:53:ALA:H	19	0.11
(1,392)	1:A:52:GLY:HA3	1:A:53:ALA:H	19	0.11
(1,392)	1:A:52:GLY:HA2	1:A:53:ALA:H	20	0.11
(1,392)	1:A:52:GLY:HA3	1:A:53:ALA:H	20	0.11
(1,390)	1:A:51:CYS:HB2	1:A:52:GLY:H	14	0.11
(1,390)	1:A:51:CYS:HB3	1:A:52:GLY:H	14	0.11
(1,387)	1:A:51:CYS:H	1:A:51:CYS:HB2	20	0.11
(1,387)	1:A:51:CYS:H	1:A:51:CYS:HB3	20	0.11
(1,383)	1:A:51:CYS:H	1:A:50:SER:HA	1	0.11
(1,383)	1:A:51:CYS:H	1:A:50:SER:HA	2	0.11
(1,383)	1:A:51:CYS:H	1:A:50:SER:HA	3	0.11
(1,383)	1:A:51:CYS:H	1:A:50:SER:HA	7	0.11
(1,383)	1:A:51:CYS:H	1:A:50:SER:HA	13	0.11
(1,383)	1:A:51:CYS:H	1:A:50:SER:HA	17	0.11
(1,382)	1:A:51:CYS:H	1:A:59:ILE:H	18	0.11
(1,379)	1:A:50:SER:H	1:A:50:SER:HA	10	0.11

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,378)	1:A:48:GLU:HG2	1:A:49:ILE:H	18	0.11
(1,378)	1:A:48:GLU:HG3	1:A:49:ILE:H	18	0.11
(1,377)	1:A:60:PRO:HA	1:A:49:ILE:H	8	0.11
(1,374)	1:A:61:VAL:H	1:A:49:ILE:H	17	0.11
(1,372)	1:A:48:GLU:H	1:A:48:GLU:HA	10	0.11
(1,359)	1:A:40:HIS:H	1:A:40:HIS:HB2	15	0.11
(1,359)	1:A:40:HIS:H	1:A:40:HIS:HB3	15	0.11
(1,357)	1:A:40:HIS:H	1:A:39:CYS:HA	7	0.11
(1,357)	1:A:40:HIS:H	1:A:39:CYS:HA	11	0.11
(1,357)	1:A:40:HIS:H	1:A:39:CYS:HA	13	0.11
(1,357)	1:A:40:HIS:H	1:A:39:CYS:HA	15	0.11
(1,352)	1:A:34:GLU:H	1:A:35:SER:HB2	9	0.11
(1,352)	1:A:34:GLU:H	1:A:35:SER:HB3	9	0.11
(1,351)	1:A:32:SER:H	1:A:33:ASP:H	8	0.11
(1,351)	1:A:32:SER:H	1:A:33:ASP:H	19	0.11
(1,349)	1:A:32:SER:H	1:A:33:ASP:H	8	0.11
(1,349)	1:A:32:SER:H	1:A:33:ASP:H	19	0.11
(1,345)	1:A:29:GLU:HB2	1:A:29:GLU:H	2	0.11
(1,345)	1:A:29:GLU:HB3	1:A:29:GLU:H	2	0.11
(1,343)	1:A:28:CYS:HB2	1:A:28:CYS:H	14	0.11
(1,343)	1:A:28:CYS:HB3	1:A:28:CYS:H	14	0.11
(1,33)	1:A:115:ASP:H	1:A:114:SER:H	1	0.11
(1,33)	1:A:115:ASP:H	1:A:114:SER:H	10	0.11
(1,33)	1:A:115:ASP:H	1:A:114:SER:H	14	0.11
(1,323)	1:A:64:ARG:H	1:A:80:CYS:HB2	8	0.11
(1,323)	1:A:64:ARG:H	1:A:80:CYS:HB3	8	0.11
(1,317)	1:A:8:PHE:H	1:A:16:VAL:H	13	0.11
(1,315)	1:A:15:CYS:H	1:A:15:CYS:HB2	20	0.11
(1,315)	1:A:15:CYS:H	1:A:15:CYS:HB3	20	0.11
(1,313)	1:A:14:GLN:HG2	1:A:14:GLN:H	6	0.11
(1,313)	1:A:14:GLN:HG3	1:A:14:GLN:H	6	0.11
(1,313)	1:A:14:GLN:HG2	1:A:14:GLN:H	12	0.11
(1,313)	1:A:14:GLN:HG3	1:A:14:GLN:H	12	0.11
(1,308)	1:A:13:GLY:H	1:A:14:GLN:H	9	0.11
(1,308)	1:A:13:GLY:H	1:A:14:GLN:H	11	0.11
(1,295)	1:A:15:CYS:HA	1:A:10:CYS:H	18	0.11
(1,286)	1:A:7:ASP:HB2	1:A:7:ASP:H	8	0.11
(1,286)	1:A:7:ASP:HB3	1:A:7:ASP:H	8	0.11
(1,286)	1:A:7:ASP:HB2	1:A:7:ASP:H	9	0.11
(1,286)	1:A:7:ASP:HB3	1:A:7:ASP:H	9	0.11
(1,286)	1:A:7:ASP:HB2	1:A:7:ASP:H	10	0.11
(1,286)	1:A:7:ASP:HB3	1:A:7:ASP:H	10	0.11

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,286)	1:A:7:ASP:HB2	1:A:7:ASP:H	14	0.11
(1,286)	1:A:7:ASP:HB3	1:A:7:ASP:H	14	0.11
(1,279)	1:A:6:SER:HB2	1:A:6:SER:H	5	0.11
(1,279)	1:A:6:SER:HB3	1:A:6:SER:H	5	0.11
(1,277)	1:A:6:SER:HB2	1:A:6:SER:H	5	0.11
(1,277)	1:A:6:SER:HB3	1:A:6:SER:H	5	0.11
(1,257)	1:A:82:ASN:HB2	1:A:82:ASN:H	7	0.11
(1,257)	1:A:82:ASN:HB2	1:A:82:ASN:H	7	0.11
(1,257)	1:A:82:ASN:HB3	1:A:82:ASN:H	7	0.11
(1,257)	1:A:82:ASN:HB3	1:A:82:ASN:H	7	0.11
(1,257)	1:A:82:ASN:HB2	1:A:82:ASN:H	14	0.11
(1,257)	1:A:82:ASN:HB2	1:A:82:ASN:H	14	0.11
(1,257)	1:A:82:ASN:HB3	1:A:82:ASN:H	14	0.11
(1,257)	1:A:82:ASN:HB3	1:A:82:ASN:H	14	0.11
(1,257)	1:A:82:ASN:HB2	1:A:82:ASN:H	19	0.11
(1,257)	1:A:82:ASN:HB2	1:A:82:ASN:H	19	0.11
(1,257)	1:A:82:ASN:HB3	1:A:82:ASN:H	19	0.11
(1,257)	1:A:82:ASN:HB3	1:A:82:ASN:H	19	0.11
(1,248)	1:A:83:ILE:HB	1:A:84:THR:H	6	0.11
(1,247)	1:A:83:ILE:HA	1:A:84:THR:H	15	0.11
(1,228)	1:A:92:CYS:HB2	1:A:93:SER:H	18	0.11
(1,228)	1:A:92:CYS:HB3	1:A:93:SER:H	18	0.11
(1,225)	1:A:92:CYS:HB2	1:A:94:SER:H	10	0.11
(1,225)	1:A:92:CYS:HB3	1:A:94:SER:H	10	0.11
(1,220)	1:A:92:CYS:HB2	1:A:95:GLY:H	8	0.11
(1,220)	1:A:92:CYS:HB3	1:A:95:GLY:H	8	0.11
(1,215)	1:A:96:ARG:H	1:A:92:CYS:HB2	9	0.11
(1,215)	1:A:96:ARG:H	1:A:92:CYS:HB3	9	0.11
(1,204)	1:A:98:ILE:HG12	1:A:98:ILE:H	1	0.11
(1,204)	1:A:98:ILE:HG13	1:A:98:ILE:H	1	0.11
(1,204)	1:A:98:ILE:HG12	1:A:98:ILE:H	17	0.11
(1,204)	1:A:98:ILE:HG13	1:A:98:ILE:H	17	0.11
(1,187)	1:A:103:VAL:HG11	1:A:102:PHE:H	17	0.11
(1,187)	1:A:103:VAL:HG12	1:A:102:PHE:H	17	0.11
(1,187)	1:A:103:VAL:HG13	1:A:102:PHE:H	17	0.11
(1,187)	1:A:103:VAL:HG21	1:A:102:PHE:H	17	0.11
(1,187)	1:A:103:VAL:HG22	1:A:102:PHE:H	17	0.11
(1,187)	1:A:103:VAL:HG23	1:A:102:PHE:H	17	0.11
(1,115)	1:A:109:ASP:H	1:A:110:CYS:H	9	0.11
(1,129)	1:A:114:SER:H	1:A:114:SER:HG	1	0.11
(1,128)	1:A:114:SER:HA	1:A:114:SER:H	14	0.11
(1,122)	1:A:115:ASP:HB2	1:A:115:ASP:H	4	0.11

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,122)	1:A:115:ASP:HB3	1:A:115:ASP:H	4	0.11
(1,122)	1:A:115:ASP:HB2	1:A:115:ASP:H	7	0.11
(1,122)	1:A:115:ASP:HB3	1:A:115:ASP:H	7	0.11
(1,121)	1:A:114:SER:HA	1:A:115:ASP:H	12	0.11
(1,117)	1:A:116:GLU:HG2	1:A:116:GLU:H	5	0.11
(1,117)	1:A:116:GLU:HG3	1:A:116:GLU:H	5	0.11

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

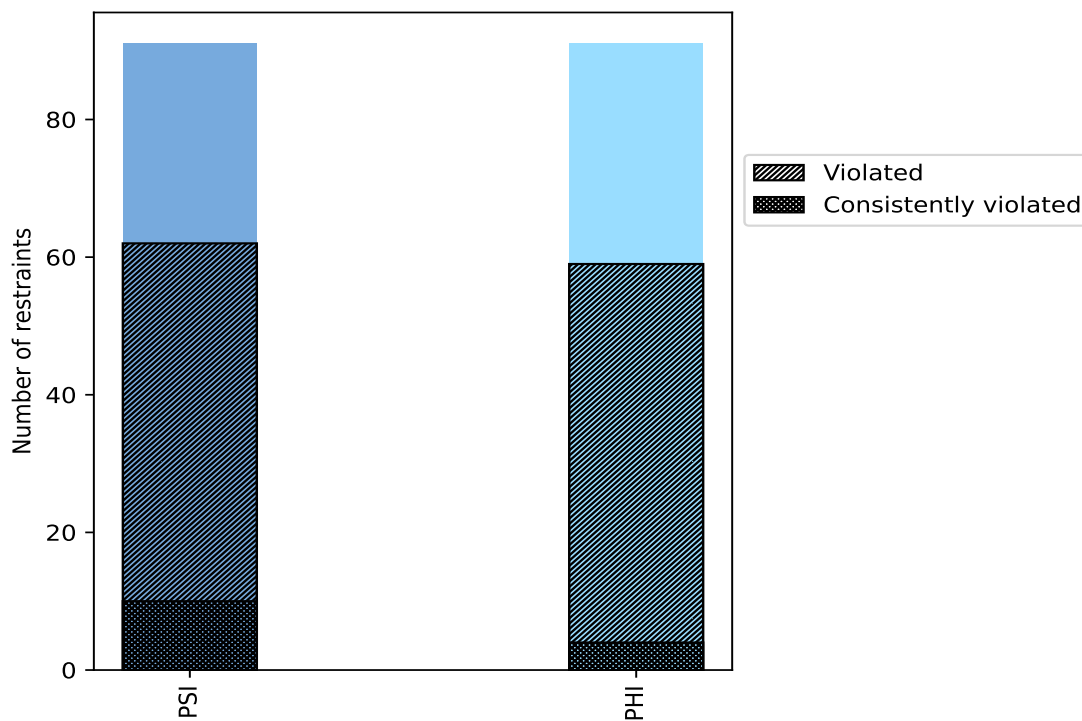
10.1 Summary of dihedral-angle violations [i](#)

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

Angle type	Count	% ¹	Violated ³			Consistently Violated ⁴		
			Count	% ²	% ¹	Count	% ²	% ¹
PSI	91	50.0	62	68.1	34.1	10	11.0	5.5
PHI	91	50.0	59	64.8	32.4	4	4.4	2.2
Total	182	100.0	121	66.5	66.5	14	7.7	7.7

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

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



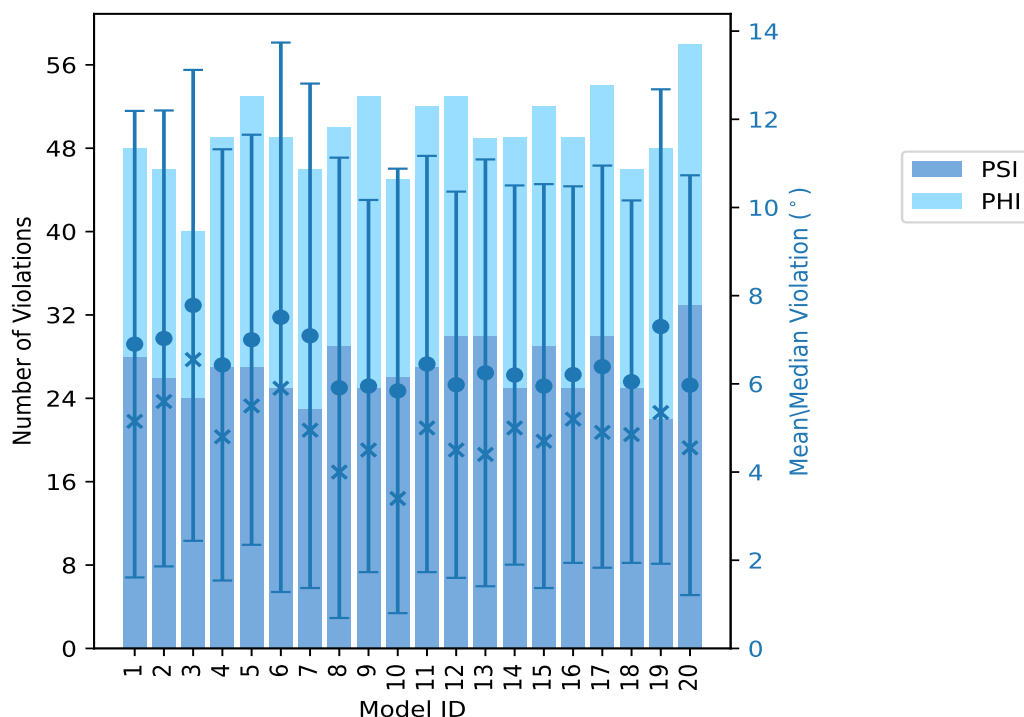
Violated and consistently violated restraints are shown using different hatch patterns in their respective categories

10.2 Dihedral-angle violation statistics for each model

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

Model ID	Number of violations			Mean (°)	Max (°)	SD (°)	Median (°)
	PSI	PHI	Total				
1	28	20	48	6.9	19.3	5.29	5.15
2	26	20	46	7.03	16.7	5.17	5.6
3	24	16	40	7.78	25.7	5.34	6.55
4	27	22	49	6.43	25.4	4.89	4.8
5	27	26	53	7.0	18.3	4.65	5.5
6	25	24	49	7.51	29.1	6.23	5.9
7	23	23	46	7.09	25.2	5.72	4.95
8	29	21	50	5.91	18.8	5.22	4.0
9	25	28	53	5.95	18.9	4.22	4.5
10	26	19	45	5.84	17.8	5.04	3.4
11	27	25	52	6.45	18.7	4.72	5.0
12	30	23	53	5.98	19.9	4.38	4.5
13	30	19	49	6.25	19.9	4.84	4.4
14	25	24	49	6.2	18.0	4.3	5.0
15	29	23	52	5.95	17.1	4.58	4.7
16	25	24	49	6.21	19.0	4.27	5.2
17	30	24	54	6.39	18.2	4.56	4.9
18	25	21	46	6.05	16.6	4.11	4.85
19	22	26	48	7.3	22.6	5.38	5.35
20	33	25	58	5.97	21.3	4.76	4.55

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



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

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

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

Number of violated restraints			Fraction of the ensemble	
PSI	PHI	Total	Count ¹	%
7	11	18	1	5.0
3	11	14	2	10.0
11	5	16	3	15.0
5	3	8	4	20.0
3	1	4	5	25.0
2	1	3	6	30.0
3	1	4	7	35.0
0	1	1	8	40.0
3	4	7	9	45.0
3	1	4	10	50.0
3	2	5	11	55.0

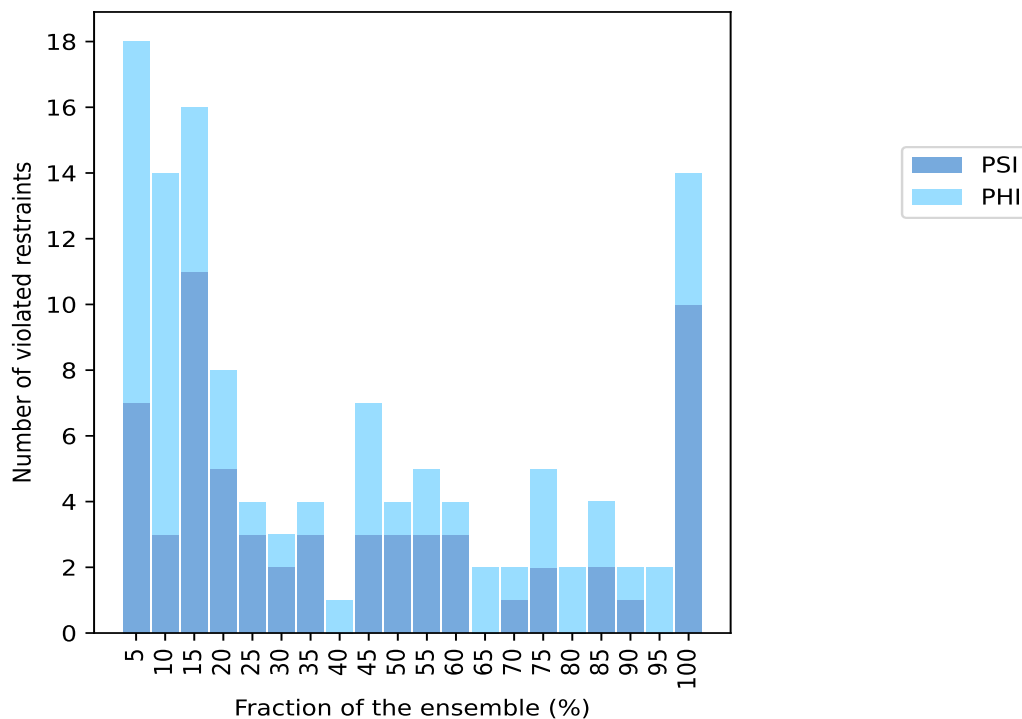
Continued on next page...

Continued from previous page...

Number of violated restraints			Fraction of the ensemble	
PSI	PHI	Total	Count ¹	%
3	1	4	12	60.0
0	2	2	13	65.0
1	1	2	14	70.0
2	3	5	15	75.0
0	2	2	16	80.0
2	2	4	17	85.0
1	1	2	18	90.0
0	2	2	19	95.0
10	4	14	20	100.0

¹ Number of models with violations

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

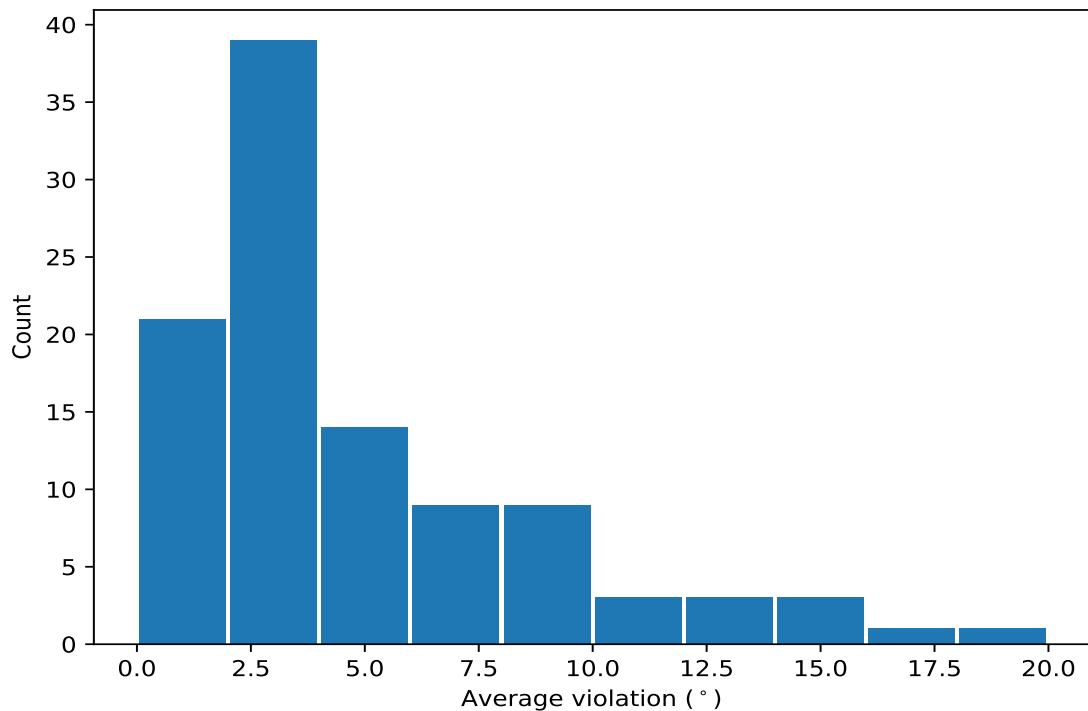


10.4 Most violated dihedral-angle restraints in the ensemble [i](#)

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

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

in the ensemble



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

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

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Models ¹	Mean	SD ²	Median
(1,40)	1:A:26:PRO:N	1:A:26:PRO:CA	1:A:26:PRO:C	1:A:27:ASP:N	20	18.31	2.14	17.95
(1,34)	1:A:21:LYS:N	1:A:21:LYS:CA	1:A:21:LYS:C	1:A:22:CYS:N	20	14.38	2.29	15.05
(1,86)	1:A:64:ARG:N	1:A:64:ARG:CA	1:A:64:ARG:C	1:A:65:CYS:N	20	12.86	1.77	13.05
(1,180)	1:A:104:CYS:N	1:A:104:CYS:CA	1:A:104:CYS:C	1:A:105:ASN:N	20	12.58	1.47	12.45
(1,36)	1:A:22:CYS:N	1:A:22:CYS:CA	1:A:22:CYS:C	1:A:23:ASP:N	20	12.32	1.25	12.3
(1,162)	1:A:117:LEU:N	1:A:117:LEU:CA	1:A:117:LEU:C	1:A:118:ASP:N	20	11.76	2.8	11.6
(1,41)	1:A:26:PRO:C	1:A:27:ASP:N	1:A:27:ASP:CA	1:A:27:ASP:C	20	11.63	1.92	11.15
(1,73)	1:A:56:THR:C	1:A:57:GLN:N	1:A:57:GLN:CA	1:A:57:GLN:C	20	9.67	3.24	10.2
(1,72)	1:A:55:SER:N	1:A:55:SER:CA	1:A:55:SER:C	1:A:56:THR:N	20	8.26	2.16	8.55
(1,93)	1:A:67:GLY:C	1:A:68:GLU:N	1:A:68:GLU:CA	1:A:68:GLU:C	20	7.74	1.77	7.8
(1,58)	1:A:39:CYS:N	1:A:39:CYS:CA	1:A:39:CYS:C	1:A:40:HIS:N	20	7.14	1.88	7.6
(1,33)	1:A:20:TRP:C	1:A:21:LYS:N	1:A:21:LYS:CA	1:A:21:LYS:C	20	7.08	1.17	7.05
(1,74)	1:A:57:GLN:N	1:A:57:GLN:CA	1:A:57:GLN:C	1:A:58:CYS:N	20	6.44	2.6	6.3
(1,56)	1:A:38:GLN:N	1:A:38:GLN:CA	1:A:38:GLN:C	1:A:39:CYS:N	20	4.82	1.07	4.95
(1,95)	1:A:68:GLU:C	1:A:69:ASN:N	1:A:69:ASN:CA	1:A:69:ASN:C	19	9.47	3.77	11.2
(1,159)	1:A:115:ASP:C	1:A:116:GLU:N	1:A:116:GLU:CA	1:A:116:GLU:C	19	4.38	1.55	4.1
(1,100)	1:A:72:ASP:N	1:A:72:ASP:CA	1:A:72:ASP:C	1:A:73:SER:N	18	6.24	5.66	5.1
(1,109)	1:A:82:ASN:C	1:A:83:ILE:N	1:A:83:ILE:CA	1:A:83:ILE:C	18	4.04	1.62	4.0
(1,153)	1:A:110:CYS:C	1:A:111:SER:N	1:A:111:SER:CA	1:A:111:SER:C	17	9.33	6.15	10.0
(1,50)	1:A:35:SER:N	1:A:35:SER:CA	1:A:35:SER:C	1:A:36:PRO:N	17	2.9	1.3	2.7

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Models ¹	Mean	SD ²	Median
(1,23)	1:A:14:GLN:C	1:A:15:CYS:N	1:A:15:CYS:CA	1:A:15:CYS:C	17	2.52	1.14	2.4
(1,30)	1:A:18:SER:N	1:A:18:SER:CA	1:A:18:SER:C	1:A:19:ARG:N	17	2.49	1.16	2.0
(1,63)	1:A:48:GLU:C	1:A:49:ILE:N	1:A:49:ILE:CA	1:A:49:ILE:C	16	14.26	3.49	15.0
(1,143)	1:A:102:PHE:C	1:A:103:VAL:N	1:A:103:VAL:CA	1:A:103:VAL:C	16	7.21	4.14	4.5
(1,98)	1:A:71:CYS:N	1:A:71:CYS:CA	1:A:71:CYS:C	1:A:72:ASP:N	15	5.75	2.55	6.2
(1,101)	1:A:74:GLY:C	1:A:75:GLU:N	1:A:75:GLU:CA	1:A:75:GLU:C	15	4.38	1.53	4.5
(1,107)	1:A:77:GLU:C	1:A:78:GLU:N	1:A:78:GLU:CA	1:A:78:GLU:C	15	3.76	1.63	3.4
(1,114)	1:A:85:CYS:N	1:A:85:CYS:CA	1:A:85:CYS:C	1:A:86:SER:N	15	3.69	1.27	4.1
(1,99)	1:A:71:CYS:C	1:A:72:ASP:N	1:A:72:ASP:CA	1:A:72:ASP:C	15	3.43	1.54	3.1
(1,108)	1:A:78:GLU:N	1:A:78:GLU:CA	1:A:78:GLU:C	1:A:79:ASN:N	14	7.73	2.91	7.6
(1,5)	1:A:4:ALA:C	1:A:5:GLU:N	1:A:5:GLU:CA	1:A:5:GLU:C	14	2.66	1.42	2.1
(1,179)	1:A:103:VAL:C	1:A:104:CYS:N	1:A:104:CYS:CA	1:A:104:CYS:C	13	14.38	3.41	15.6
(1,49)	1:A:34:GLU:C	1:A:35:SER:N	1:A:35:SER:CA	1:A:35:SER:C	13	2.08	0.74	1.9
(1,154)	1:A:111:SER:N	1:A:111:SER:CA	1:A:111:SER:C	1:A:112:ASP:N	12	9.68	4.99	11.2
(1,182)	1:A:112:ASP:N	1:A:112:ASP:CA	1:A:112:ASP:C	1:A:113:GLY:N	12	5.07	2.78	4.5
(1,149)	1:A:107:GLN:C	1:A:108:ASP:N	1:A:108:ASP:CA	1:A:108:ASP:C	12	3.55	1.41	3.95
(1,138)	1:A:100:ARG:N	1:A:100:ARG:CA	1:A:100:ARG:C	1:A:101:ASN:N	12	2.16	0.53	2.05
(1,152)	1:A:110:CYS:N	1:A:110:CYS:CA	1:A:110:CYS:C	1:A:111:SER:N	11	17.96	6.39	17.5
(1,181)	1:A:111:SER:C	1:A:112:ASP:N	1:A:112:ASP:CA	1:A:112:ASP:C	11	9.2	4.35	9.2
(1,150)	1:A:108:ASP:N	1:A:108:ASP:CA	1:A:108:ASP:C	1:A:109:ASP:N	11	5.75	2.74	6.7
(1,32)	1:A:19:ARG:N	1:A:19:ARG:CA	1:A:19:ARG:C	1:A:20:TRP:N	11	3.21	2.27	1.8
(1,35)	1:A:21:LYS:C	1:A:22:CYS:N	1:A:22:CYS:CA	1:A:22:CYS:C	11	2.39	0.8	2.5
(1,105)	1:A:76:ASP:C	1:A:77:GLU:N	1:A:77:GLU:CA	1:A:77:GLU:C	10	7.56	2.1	7.55
(1,64)	1:A:49:ILE:N	1:A:49:ILE:CA	1:A:49:ILE:C	1:A:50:SER:N	10	3.65	1.62	3.65
(1,26)	1:A:16:VAL:N	1:A:16:VAL:CA	1:A:16:VAL:C	1:A:17:PRO:N	10	3.49	2.31	2.9
(1,80)	1:A:60:PRO:N	1:A:60:PRO:CA	1:A:60:PRO:C	1:A:61:VAL:N	10	3.01	1.29	2.8
(1,156)	1:A:114:SER:N	1:A:114:SER:CA	1:A:114:SER:C	1:A:115:ASP:N	9	11.83	0.55	11.6
(1,104)	1:A:76:ASP:N	1:A:76:ASP:CA	1:A:76:ASP:C	1:A:77:GLU:N	9	5.67	2.61	5.7
(1,144)	1:A:103:VAL:N	1:A:103:VAL:CA	1:A:103:VAL:C	1:A:104:CYS:N	9	4.5	2.27	3.9
(1,9)	1:A:7:ASP:C	1:A:8:PHE:N	1:A:8:PHE:CA	1:A:8:PHE:C	9	4.36	1.78	3.7
(1,161)	1:A:116:GLU:C	1:A:117:LEU:N	1:A:117:LEU:CA	1:A:117:LEU:C	9	3.64	2.46	2.1
(1,31)	1:A:18:SER:C	1:A:19:ARG:N	1:A:19:ARG:CA	1:A:19:ARG:C	9	2.61	1.25	2.1
(1,55)	1:A:37:GLU:C	1:A:38:GLN:N	1:A:38:GLN:CA	1:A:38:GLN:C	9	1.81	0.55	1.8
(1,125)	1:A:93:SER:C	1:A:94:SER:N	1:A:94:SER:CA	1:A:94:SER:C	8	4.66	1.77	5.45
(1,158)	1:A:115:ASP:N	1:A:115:ASP:CA	1:A:115:ASP:C	1:A:116:GLU:N	7	8.56	2.1	8.4
(1,134)	1:A:98:ILE:N	1:A:98:ILE:CA	1:A:98:ILE:C	1:A:99:SER:N	7	3.96	1.12	4.2
(1,103)	1:A:75:GLU:C	1:A:76:ASP:N	1:A:76:ASP:CA	1:A:76:ASP:C	7	3.29	2.22	2.3
(1,122)	1:A:90:PHE:N	1:A:90:PHE:CA	1:A:90:PHE:C	1:A:91:THR:N	7	2.5	0.91	2.7
(1,127)	1:A:94:SER:C	1:A:95:GLY:N	1:A:95:GLY:CA	1:A:95:GLY:C	6	3.4	2.01	2.9
(1,128)	1:A:95:GLY:N	1:A:95:GLY:CA	1:A:95:GLY:C	1:A:96:ARG:N	6	2.35	1.08	1.8
(1,54)	1:A:37:GLU:N	1:A:37:GLU:CA	1:A:37:GLU:C	1:A:38:GLN:N	6	1.52	0.28	1.6
(1,42)	1:A:27:ASP:N	1:A:27:ASP:CA	1:A:27:ASP:C	1:A:28:CYS:N	5	2.54	1.25	2.3
(1,44)	1:A:29:GLU:N	1:A:29:GLU:CA	1:A:29:GLU:C	1:A:30:ASP:N	5	2.52	0.74	2.3
(1,120)	1:A:89:GLU:N	1:A:89:GLU:CA	1:A:89:GLU:C	1:A:90:PHE:N	5	2.18	1.15	1.5
(1,7)	1:A:5:GLU:C	1:A:6:SER:N	1:A:6:SER:CA	1:A:6:SER:C	5	1.62	0.41	1.6
(1,65)	1:A:49:ILE:C	1:A:50:SER:N	1:A:50:SER:CA	1:A:50:SER:C	4	8.35	2.94	9.3
(1,106)	1:A:77:GLU:N	1:A:77:GLU:CA	1:A:77:GLU:C	1:A:78:GLU:N	4	4.93	2.76	4.0
(1,124)	1:A:93:SER:N	1:A:93:SER:CA	1:A:93:SER:C	1:A:94:SER:N	4	3.68	1.51	3.15
(1,136)	1:A:99:SER:N	1:A:99:SER:CA	1:A:99:SER:C	1:A:100:ARG:N	4	2.33	0.88	2.0
(1,130)	1:A:96:ARG:N	1:A:96:ARG:CA	1:A:96:ARG:C	1:A:97:CYS:N	4	2.17	0.7	2.0
(1,13)	1:A:9:VAL:C	1:A:10:CYS:N	1:A:10:CYS:CA	1:A:10:CYS:C	4	1.88	0.22	1.85

Continued on next page...

Continued from previous page...

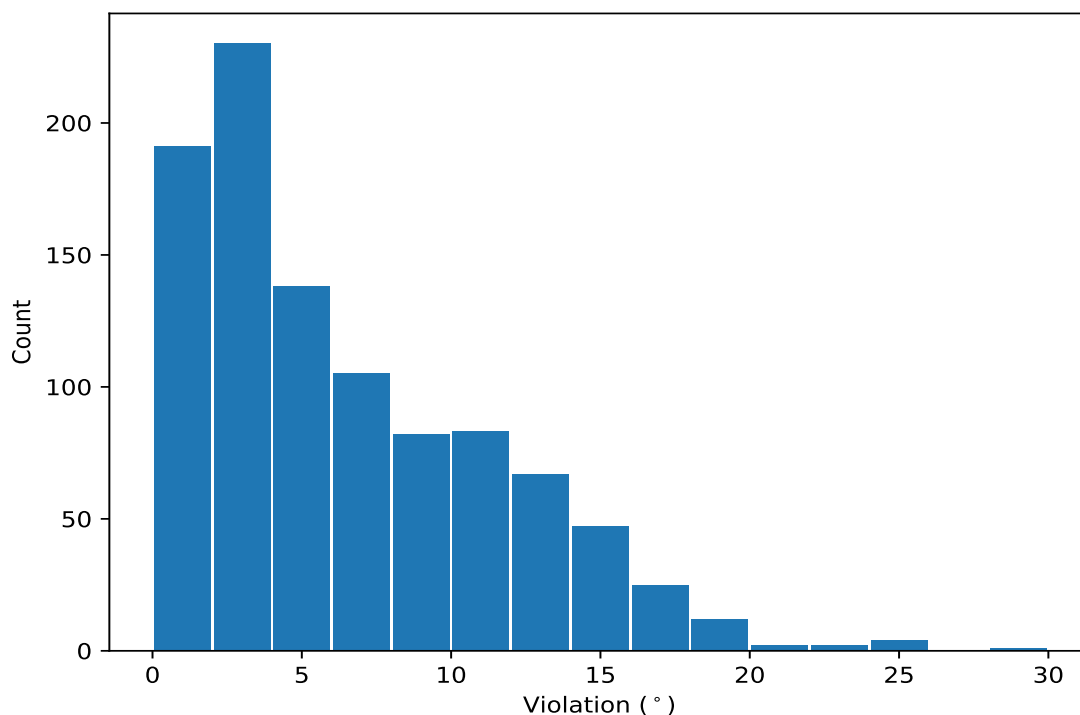
Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Models ¹	Mean	SD ²	Median
(1,4)	1:A:3:CYS:N	1:A:3:CYS:CA	1:A:3:CYS:C	1:A:4:ALA:N	4	1.82	0.69	1.75
(1,113)	1:A:84:THR:C	1:A:85:CYS:N	1:A:85:CYS:CA	1:A:85:CYS:C	4	1.5	0.41	1.3
(1,96)	1:A:69:ASN:N	1:A:69:ASN:CA	1:A:69:ASN:C	1:A:70:ASP:N	3	7.33	0.84	7.6
(1,126)	1:A:94:SER:N	1:A:94:SER:CA	1:A:94:SER:C	1:A:95:GLY:N	3	4.9	2.62	6.5
(1,97)	1:A:70:ASP:C	1:A:71:CYS:N	1:A:71:CYS:CA	1:A:71:CYS:C	3	4.63	4.22	1.8
(1,121)	1:A:89:GLU:C	1:A:90:PHE:N	1:A:90:PHE:CA	1:A:90:PHE:C	3	3.87	1.9	4.9
(1,8)	1:A:6:SER:N	1:A:6:SER:CA	1:A:6:SER:C	1:A:7:ASP:N	3	3.13	1.3	3.9
(1,147)	1:A:106:GLY:C	1:A:107:GLN:N	1:A:107:GLN:CA	1:A:107:GLN:C	3	3.1	0.16	3.1
(1,68)	1:A:53:ALA:N	1:A:53:ALA:CA	1:A:53:ALA:C	1:A:54:HIS:N	3	2.93	1.65	2.6
(1,90)	1:A:66:ASP:N	1:A:66:ASP:CA	1:A:66:ASP:C	1:A:67:GLY:N	3	2.9	1.34	2.5
(1,10)	1:A:8:PHE:N	1:A:8:PHE:CA	1:A:8:PHE:C	1:A:9:VAL:N	3	2.77	0.62	2.6
(1,81)	1:A:60:PRO:C	1:A:61:VAL:N	1:A:61:VAL:CA	1:A:61:VAL:C	3	2.4	0.51	2.2
(1,88)	1:A:65:CYS:N	1:A:65:CYS:CA	1:A:65:CYS:C	1:A:66:ASP:N	3	2.37	0.95	2.2
(1,70)	1:A:54:HIS:N	1:A:54:HIS:CA	1:A:54:HIS:C	1:A:55:SER:N	3	2.0	0.59	1.8
(1,160)	1:A:116:GLU:N	1:A:116:GLU:CA	1:A:116:GLU:C	1:A:117:LEU:N	3	1.8	0.36	2.0
(1,131)	1:A:96:ARG:C	1:A:97:CYS:N	1:A:97:CYS:CA	1:A:97:CYS:C	3	1.5	0.36	1.3
(1,2)	1:A:2:THR:N	1:A:2:THR:CA	1:A:2:THR:C	1:A:3:CYS:N	3	1.47	0.31	1.3
(1,132)	1:A:97:CYS:N	1:A:97:CYS:CA	1:A:97:CYS:C	1:A:98:ILE:N	3	1.4	0.14	1.5
(1,102)	1:A:75:GLU:N	1:A:75:GLU:CA	1:A:75:GLU:C	1:A:76:ASP:N	2	9.2	5.6	9.2
(1,123)	1:A:92:CYS:C	1:A:93:SER:N	1:A:93:SER:CA	1:A:93:SER:C	2	3.2	2.1	3.2
(1,151)	1:A:109:ASP:C	1:A:110:CYS:N	1:A:110:CYS:CA	1:A:110:CYS:C	2	2.0	0.2	2.0
(1,16)	1:A:11:ASN:N	1:A:11:ASN:CA	1:A:11:ASN:C	1:A:12:ASN:N	2	1.9	0.7	1.9
(1,3)	1:A:2:THR:C	1:A:3:CYS:N	1:A:3:CYS:CA	1:A:3:CYS:C	2	1.8	0.1	1.8
(1,145)	1:A:105:ASN:C	1:A:106:GLY:N	1:A:106:GLY:CA	1:A:106:GLY:C	2	1.75	0.05	1.75
(1,157)	1:A:114:SER:C	1:A:115:ASP:N	1:A:115:ASP:CA	1:A:115:ASP:C	2	1.75	0.15	1.75
(1,177)	1:A:91:THR:C	1:A:92:CYS:N	1:A:92:CYS:CA	1:A:92:CYS:C	2	1.7	0.3	1.7
(1,19)	1:A:12:ASN:C	1:A:13:GLY:N	1:A:13:GLY:CA	1:A:13:GLY:C	2	1.5	0.1	1.5
(1,133)	1:A:97:CYS:C	1:A:98:ILE:N	1:A:98:ILE:CA	1:A:98:ILE:C	2	1.35	0.25	1.35
(1,21)	1:A:13:GLY:C	1:A:14:GLN:N	1:A:14:GLN:CA	1:A:14:GLN:C	2	1.3	0.0	1.3
(1,27)	1:A:16:VAL:C	1:A:17:PRO:N	1:A:17:PRO:CA	1:A:17:PRO:C	2	1.25	0.05	1.25
(1,61)	1:A:47:HIS:C	1:A:48:GLU:N	1:A:48:GLU:CA	1:A:48:GLU:C	2	1.2	0.1	1.2
(1,116)	1:A:87:PRO:N	1:A:87:PRO:CA	1:A:87:PRO:C	1:A:88:ASP:N	2	1.15	0.05	1.15

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

10.5 All violated dihedral-angle restraints

10.5.1 Histogram : Distribution of violations

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



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

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

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,100)	1:A:72:ASP:N	1:A:72:ASP:CA	1:A:72:ASP:C	1:A:73:SER:N	6	29.1
(1,152)	1:A:110:CYS:N	1:A:110:CYS:CA	1:A:110:CYS:C	1:A:111:SER:N	3	25.7
(1,152)	1:A:110:CYS:N	1:A:110:CYS:CA	1:A:110:CYS:C	1:A:111:SER:N	4	25.4
(1,152)	1:A:110:CYS:N	1:A:110:CYS:CA	1:A:110:CYS:C	1:A:111:SER:N	7	25.2
(1,152)	1:A:110:CYS:N	1:A:110:CYS:CA	1:A:110:CYS:C	1:A:111:SER:N	6	24.5
(1,40)	1:A:26:PRO:N	1:A:26:PRO:CA	1:A:26:PRO:C	1:A:27:ASP:N	7	22.8
(1,40)	1:A:26:PRO:N	1:A:26:PRO:CA	1:A:26:PRO:C	1:A:27:ASP:N	19	22.6
(1,40)	1:A:26:PRO:N	1:A:26:PRO:CA	1:A:26:PRO:C	1:A:27:ASP:N	20	21.3
(1,179)	1:A:103:VAL:C	1:A:104:CYS:N	1:A:104:CYS:CA	1:A:104:CYS:C	6	20.2
(1,40)	1:A:26:PRO:N	1:A:26:PRO:CA	1:A:26:PRO:C	1:A:27:ASP:N	12	19.9
(1,40)	1:A:26:PRO:N	1:A:26:PRO:CA	1:A:26:PRO:C	1:A:27:ASP:N	13	19.9
(1,152)	1:A:110:CYS:N	1:A:110:CYS:CA	1:A:110:CYS:C	1:A:111:SER:N	1	19.3
(1,40)	1:A:26:PRO:N	1:A:26:PRO:CA	1:A:26:PRO:C	1:A:27:ASP:N	16	19.0
(1,40)	1:A:26:PRO:N	1:A:26:PRO:CA	1:A:26:PRO:C	1:A:27:ASP:N	9	18.9
(1,34)	1:A:21:LYS:N	1:A:21:LYS:CA	1:A:21:LYS:C	1:A:22:CYS:N	8	18.8
(1,40)	1:A:26:PRO:N	1:A:26:PRO:CA	1:A:26:PRO:C	1:A:27:ASP:N	11	18.7
(1,153)	1:A:110:CYS:C	1:A:111:SER:N	1:A:111:SER:CA	1:A:111:SER:C	1	18.7
(1,40)	1:A:26:PRO:N	1:A:26:PRO:CA	1:A:26:PRO:C	1:A:27:ASP:N	5	18.3
(1,179)	1:A:103:VAL:C	1:A:104:CYS:N	1:A:104:CYS:CA	1:A:104:CYS:C	17	18.2
(1,153)	1:A:110:CYS:C	1:A:111:SER:N	1:A:111:SER:CA	1:A:111:SER:C	8	18.2
(1,40)	1:A:26:PRO:N	1:A:26:PRO:CA	1:A:26:PRO:C	1:A:27:ASP:N	14	18.0

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,40)	1:A:26:PRO:N	1:A:26:PRO:CA	1:A:26:PRO:C	1:A:27:ASP:N	6	17.9
(1,179)	1:A:103:VAL:C	1:A:104:CYS:N	1:A:104:CYS:CA	1:A:104:CYS:C	4	17.9
(1,40)	1:A:26:PRO:N	1:A:26:PRO:CA	1:A:26:PRO:C	1:A:27:ASP:N	4	17.8
(1,153)	1:A:110:CYS:C	1:A:111:SER:N	1:A:111:SER:CA	1:A:111:SER:C	10	17.8
(1,40)	1:A:26:PRO:N	1:A:26:PRO:CA	1:A:26:PRO:C	1:A:27:ASP:N	10	17.7
(1,152)	1:A:110:CYS:N	1:A:110:CYS:CA	1:A:110:CYS:C	1:A:111:SER:N	8	17.5
(1,34)	1:A:21:LYS:N	1:A:21:LYS:CA	1:A:21:LYS:C	1:A:22:CYS:N	11	17.2
(1,40)	1:A:26:PRO:N	1:A:26:PRO:CA	1:A:26:PRO:C	1:A:27:ASP:N	15	17.1
(1,63)	1:A:48:GLU:C	1:A:49:ILE:N	1:A:49:ILE:CA	1:A:49:ILE:C	13	16.8
(1,63)	1:A:48:GLU:C	1:A:49:ILE:N	1:A:49:ILE:CA	1:A:49:ILE:C	20	16.8
(1,40)	1:A:26:PRO:N	1:A:26:PRO:CA	1:A:26:PRO:C	1:A:27:ASP:N	8	16.8
(1,40)	1:A:26:PRO:N	1:A:26:PRO:CA	1:A:26:PRO:C	1:A:27:ASP:N	2	16.7
(1,179)	1:A:103:VAL:C	1:A:104:CYS:N	1:A:104:CYS:CA	1:A:104:CYS:C	7	16.7
(1,162)	1:A:117:LEU:N	1:A:117:LEU:CA	1:A:117:LEU:C	1:A:118:ASP:N	15	16.7
(1,40)	1:A:26:PRO:N	1:A:26:PRO:CA	1:A:26:PRO:C	1:A:27:ASP:N	18	16.6
(1,152)	1:A:110:CYS:N	1:A:110:CYS:CA	1:A:110:CYS:C	1:A:111:SER:N	10	16.6
(1,63)	1:A:48:GLU:C	1:A:49:ILE:N	1:A:49:ILE:CA	1:A:49:ILE:C	5	16.4
(1,40)	1:A:26:PRO:N	1:A:26:PRO:CA	1:A:26:PRO:C	1:A:27:ASP:N	3	16.4
(1,63)	1:A:48:GLU:C	1:A:49:ILE:N	1:A:49:ILE:CA	1:A:49:ILE:C	11	16.3
(1,179)	1:A:103:VAL:C	1:A:104:CYS:N	1:A:104:CYS:CA	1:A:104:CYS:C	3	16.3
(1,63)	1:A:48:GLU:C	1:A:49:ILE:N	1:A:49:ILE:CA	1:A:49:ILE:C	19	16.2
(1,162)	1:A:117:LEU:N	1:A:117:LEU:CA	1:A:117:LEU:C	1:A:118:ASP:N	12	16.1
(1,63)	1:A:48:GLU:C	1:A:49:ILE:N	1:A:49:ILE:CA	1:A:49:ILE:C	8	16.0
(1,34)	1:A:21:LYS:N	1:A:21:LYS:CA	1:A:21:LYS:C	1:A:22:CYS:N	1	16.0
(1,34)	1:A:21:LYS:N	1:A:21:LYS:CA	1:A:21:LYS:C	1:A:22:CYS:N	18	16.0
(1,95)	1:A:68:GLU:C	1:A:69:ASN:N	1:A:69:ASN:CA	1:A:69:ASN:C	19	15.9
(1,180)	1:A:104:CYS:N	1:A:104:CYS:CA	1:A:104:CYS:C	1:A:105:ASN:N	11	15.9
(1,34)	1:A:21:LYS:N	1:A:21:LYS:CA	1:A:21:LYS:C	1:A:22:CYS:N	3	15.8
(1,179)	1:A:103:VAL:C	1:A:104:CYS:N	1:A:104:CYS:CA	1:A:104:CYS:C	2	15.8
(1,154)	1:A:111:SER:N	1:A:111:SER:CA	1:A:111:SER:C	1:A:112:ASP:N	10	15.8
(1,181)	1:A:111:SER:C	1:A:112:ASP:N	1:A:112:ASP:CA	1:A:112:ASP:C	2	15.7
(1,86)	1:A:64:ARG:N	1:A:64:ARG:CA	1:A:64:ARG:C	1:A:65:CYS:N	15	15.6
(1,34)	1:A:21:LYS:N	1:A:21:LYS:CA	1:A:21:LYS:C	1:A:22:CYS:N	2	15.6
(1,179)	1:A:103:VAL:C	1:A:104:CYS:N	1:A:104:CYS:CA	1:A:104:CYS:C	19	15.6
(1,86)	1:A:64:ARG:N	1:A:64:ARG:CA	1:A:64:ARG:C	1:A:65:CYS:N	17	15.5
(1,154)	1:A:111:SER:N	1:A:111:SER:CA	1:A:111:SER:C	1:A:112:ASP:N	2	15.5
(1,40)	1:A:26:PRO:N	1:A:26:PRO:CA	1:A:26:PRO:C	1:A:27:ASP:N	1	15.4
(1,63)	1:A:48:GLU:C	1:A:49:ILE:N	1:A:49:ILE:CA	1:A:49:ILE:C	3	15.3
(1,41)	1:A:26:PRO:C	1:A:27:ASP:N	1:A:27:ASP:CA	1:A:27:ASP:C	7	15.3
(1,34)	1:A:21:LYS:N	1:A:21:LYS:CA	1:A:21:LYS:C	1:A:22:CYS:N	13	15.3
(1,34)	1:A:21:LYS:N	1:A:21:LYS:CA	1:A:21:LYS:C	1:A:22:CYS:N	20	15.3
(1,162)	1:A:117:LEU:N	1:A:117:LEU:CA	1:A:117:LEU:C	1:A:118:ASP:N	11	15.3
(1,34)	1:A:21:LYS:N	1:A:21:LYS:CA	1:A:21:LYS:C	1:A:22:CYS:N	5	15.1
(1,34)	1:A:21:LYS:N	1:A:21:LYS:CA	1:A:21:LYS:C	1:A:22:CYS:N	14	15.1
(1,153)	1:A:110:CYS:C	1:A:111:SER:N	1:A:111:SER:CA	1:A:111:SER:C	19	15.1
(1,63)	1:A:48:GLU:C	1:A:49:ILE:N	1:A:49:ILE:CA	1:A:49:ILE:C	2	15.0
(1,63)	1:A:48:GLU:C	1:A:49:ILE:N	1:A:49:ILE:CA	1:A:49:ILE:C	6	15.0
(1,34)	1:A:21:LYS:N	1:A:21:LYS:CA	1:A:21:LYS:C	1:A:22:CYS:N	10	15.0
(1,152)	1:A:110:CYS:N	1:A:110:CYS:CA	1:A:110:CYS:C	1:A:111:SER:N	19	15.0
(1,86)	1:A:64:ARG:N	1:A:64:ARG:CA	1:A:64:ARG:C	1:A:65:CYS:N	12	14.9
(1,36)	1:A:22:CYS:N	1:A:22:CYS:CA	1:A:22:CYS:C	1:A:23:ASP:N	5	14.9

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,154)	1:A:111:SER:N	1:A:111:SER:CA	1:A:111:SER:C	1:A:112:ASP:N	1	14.9
(1,102)	1:A:75:GLU:N	1:A:75:GLU:CA	1:A:75:GLU:C	1:A:76:ASP:N	6	14.8
(1,95)	1:A:68:GLU:C	1:A:69:ASN:N	1:A:69:ASN:CA	1:A:69:ASN:C	7	14.7
(1,41)	1:A:26:PRO:C	1:A:27:ASP:N	1:A:27:ASP:CA	1:A:27:ASP:C	20	14.7
(1,34)	1:A:21:LYS:N	1:A:21:LYS:CA	1:A:21:LYS:C	1:A:22:CYS:N	15	14.7
(1,162)	1:A:117:LEU:N	1:A:117:LEU:CA	1:A:117:LEU:C	1:A:118:ASP:N	20	14.7
(1,108)	1:A:78:GLU:N	1:A:78:GLU:CA	1:A:78:GLU:C	1:A:79:ASN:N	19	14.7
(1,86)	1:A:64:ARG:N	1:A:64:ARG:CA	1:A:64:ARG:C	1:A:65:CYS:N	19	14.6
(1,73)	1:A:56:THR:C	1:A:57:GLN:N	1:A:57:GLN:CA	1:A:57:GLN:C	1	14.6
(1,63)	1:A:48:GLU:C	1:A:49:ILE:N	1:A:49:ILE:CA	1:A:49:ILE:C	7	14.6
(1,63)	1:A:48:GLU:C	1:A:49:ILE:N	1:A:49:ILE:CA	1:A:49:ILE:C	9	14.5
(1,34)	1:A:21:LYS:N	1:A:21:LYS:CA	1:A:21:LYS:C	1:A:22:CYS:N	19	14.4
(1,180)	1:A:104:CYS:N	1:A:104:CYS:CA	1:A:104:CYS:C	1:A:105:ASN:N	13	14.4
(1,180)	1:A:104:CYS:N	1:A:104:CYS:CA	1:A:104:CYS:C	1:A:105:ASN:N	15	14.4
(1,73)	1:A:56:THR:C	1:A:57:GLN:N	1:A:57:GLN:CA	1:A:57:GLN:C	17	14.3
(1,40)	1:A:26:PRO:N	1:A:26:PRO:CA	1:A:26:PRO:C	1:A:27:ASP:N	17	14.3
(1,34)	1:A:21:LYS:N	1:A:21:LYS:CA	1:A:21:LYS:C	1:A:22:CYS:N	17	14.3
(1,180)	1:A:104:CYS:N	1:A:104:CYS:CA	1:A:104:CYS:C	1:A:105:ASN:N	18	14.2
(1,63)	1:A:48:GLU:C	1:A:49:ILE:N	1:A:49:ILE:CA	1:A:49:ILE:C	14	14.1
(1,181)	1:A:111:SER:C	1:A:112:ASP:N	1:A:112:ASP:CA	1:A:112:ASP:C	19	14.1
(1,86)	1:A:64:ARG:N	1:A:64:ARG:CA	1:A:64:ARG:C	1:A:65:CYS:N	2	14.0
(1,86)	1:A:64:ARG:N	1:A:64:ARG:CA	1:A:64:ARG:C	1:A:65:CYS:N	1	13.9
(1,41)	1:A:26:PRO:C	1:A:27:ASP:N	1:A:27:ASP:CA	1:A:27:ASP:C	13	13.9
(1,180)	1:A:104:CYS:N	1:A:104:CYS:CA	1:A:104:CYS:C	1:A:105:ASN:N	14	13.9
(1,162)	1:A:117:LEU:N	1:A:117:LEU:CA	1:A:117:LEU:C	1:A:118:ASP:N	18	13.9
(1,86)	1:A:64:ARG:N	1:A:64:ARG:CA	1:A:64:ARG:C	1:A:65:CYS:N	20	13.8
(1,36)	1:A:22:CYS:N	1:A:22:CYS:CA	1:A:22:CYS:C	1:A:23:ASP:N	1	13.8
(1,181)	1:A:111:SER:C	1:A:112:ASP:N	1:A:112:ASP:CA	1:A:112:ASP:C	5	13.8
(1,180)	1:A:104:CYS:N	1:A:104:CYS:CA	1:A:104:CYS:C	1:A:105:ASN:N	12	13.8
(1,179)	1:A:103:VAL:C	1:A:104:CYS:N	1:A:104:CYS:CA	1:A:104:CYS:C	5	13.8
(1,162)	1:A:117:LEU:N	1:A:117:LEU:CA	1:A:117:LEU:C	1:A:118:ASP:N	14	13.8
(1,73)	1:A:56:THR:C	1:A:57:GLN:N	1:A:57:GLN:CA	1:A:57:GLN:C	2	13.7
(1,41)	1:A:26:PRO:C	1:A:27:ASP:N	1:A:27:ASP:CA	1:A:27:ASP:C	11	13.7
(1,154)	1:A:111:SER:N	1:A:111:SER:CA	1:A:111:SER:C	1:A:112:ASP:N	8	13.7
(1,36)	1:A:22:CYS:N	1:A:22:CYS:CA	1:A:22:CYS:C	1:A:23:ASP:N	20	13.6
(1,153)	1:A:110:CYS:C	1:A:111:SER:N	1:A:111:SER:CA	1:A:111:SER:C	5	13.6
(1,41)	1:A:26:PRO:C	1:A:27:ASP:N	1:A:27:ASP:CA	1:A:27:ASP:C	12	13.5
(1,154)	1:A:111:SER:N	1:A:111:SER:CA	1:A:111:SER:C	1:A:112:ASP:N	5	13.5
(1,86)	1:A:64:ARG:N	1:A:64:ARG:CA	1:A:64:ARG:C	1:A:65:CYS:N	5	13.4
(1,63)	1:A:48:GLU:C	1:A:49:ILE:N	1:A:49:ILE:CA	1:A:49:ILE:C	16	13.4
(1,63)	1:A:48:GLU:C	1:A:49:ILE:N	1:A:49:ILE:CA	1:A:49:ILE:C	17	13.4
(1,36)	1:A:22:CYS:N	1:A:22:CYS:CA	1:A:22:CYS:C	1:A:23:ASP:N	9	13.4
(1,36)	1:A:22:CYS:N	1:A:22:CYS:CA	1:A:22:CYS:C	1:A:23:ASP:N	17	13.3
(1,180)	1:A:104:CYS:N	1:A:104:CYS:CA	1:A:104:CYS:C	1:A:105:ASN:N	20	13.3
(1,86)	1:A:64:ARG:N	1:A:64:ARG:CA	1:A:64:ARG:C	1:A:65:CYS:N	13	13.2
(1,156)	1:A:114:SER:N	1:A:114:SER:CA	1:A:114:SER:C	1:A:115:ASP:N	14	13.2
(1,86)	1:A:64:ARG:N	1:A:64:ARG:CA	1:A:64:ARG:C	1:A:65:CYS:N	3	13.1
(1,41)	1:A:26:PRO:C	1:A:27:ASP:N	1:A:27:ASP:CA	1:A:27:ASP:C	16	13.1
(1,86)	1:A:64:ARG:N	1:A:64:ARG:CA	1:A:64:ARG:C	1:A:65:CYS:N	10	13.0
(1,73)	1:A:56:THR:C	1:A:57:GLN:N	1:A:57:GLN:CA	1:A:57:GLN:C	6	13.0
(1,36)	1:A:22:CYS:N	1:A:22:CYS:CA	1:A:22:CYS:C	1:A:23:ASP:N	2	13.0

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,36)	1:A:22:CYS:N	1:A:22:CYS:CA	1:A:22:CYS:C	1:A:23:ASP:N	3	13.0
(1,86)	1:A:64:ARG:N	1:A:64:ARG:CA	1:A:64:ARG:C	1:A:65:CYS:N	6	12.9
(1,41)	1:A:26:PRO:C	1:A:27:ASP:N	1:A:27:ASP:CA	1:A:27:ASP:C	5	12.9
(1,34)	1:A:21:LYS:N	1:A:21:LYS:CA	1:A:21:LYS:C	1:A:22:CYS:N	9	12.9
(1,180)	1:A:104:CYS:N	1:A:104:CYS:CA	1:A:104:CYS:C	1:A:105:ASN:N	8	12.9
(1,63)	1:A:48:GLU:C	1:A:49:ILE:N	1:A:49:ILE:CA	1:A:49:ILE:C	1	12.8
(1,180)	1:A:104:CYS:N	1:A:104:CYS:CA	1:A:104:CYS:C	1:A:105:ASN:N	1	12.8
(1,162)	1:A:117:LEU:N	1:A:117:LEU:CA	1:A:117:LEU:C	1:A:118:ASP:N	5	12.8
(1,143)	1:A:102:PHE:C	1:A:103:VAL:N	1:A:103:VAL:CA	1:A:103:VAL:C	13	12.8
(1,143)	1:A:102:PHE:C	1:A:103:VAL:N	1:A:103:VAL:CA	1:A:103:VAL:C	15	12.8
(1,95)	1:A:68:GLU:C	1:A:69:ASN:N	1:A:69:ASN:CA	1:A:69:ASN:C	3	12.7
(1,73)	1:A:56:THR:C	1:A:57:GLN:N	1:A:57:GLN:CA	1:A:57:GLN:C	7	12.7
(1,34)	1:A:21:LYS:N	1:A:21:LYS:CA	1:A:21:LYS:C	1:A:22:CYS:N	7	12.7
(1,180)	1:A:104:CYS:N	1:A:104:CYS:CA	1:A:104:CYS:C	1:A:105:ASN:N	10	12.7
(1,36)	1:A:22:CYS:N	1:A:22:CYS:CA	1:A:22:CYS:C	1:A:23:ASP:N	14	12.6
(1,36)	1:A:22:CYS:N	1:A:22:CYS:CA	1:A:22:CYS:C	1:A:23:ASP:N	19	12.6
(1,86)	1:A:64:ARG:N	1:A:64:ARG:CA	1:A:64:ARG:C	1:A:65:CYS:N	7	12.5
(1,36)	1:A:22:CYS:N	1:A:22:CYS:CA	1:A:22:CYS:C	1:A:23:ASP:N	8	12.5
(1,86)	1:A:64:ARG:N	1:A:64:ARG:CA	1:A:64:ARG:C	1:A:65:CYS:N	11	12.4
(1,74)	1:A:57:GLN:N	1:A:57:GLN:CA	1:A:57:GLN:C	1:A:58:CYS:N	15	12.4
(1,154)	1:A:111:SER:N	1:A:111:SER:CA	1:A:111:SER:C	1:A:112:ASP:N	19	12.4
(1,153)	1:A:110:CYS:C	1:A:111:SER:N	1:A:111:SER:CA	1:A:111:SER:C	2	12.4
(1,143)	1:A:102:PHE:C	1:A:103:VAL:N	1:A:103:VAL:CA	1:A:103:VAL:C	14	12.4
(1,41)	1:A:26:PRO:C	1:A:27:ASP:N	1:A:27:ASP:CA	1:A:27:ASP:C	9	12.3
(1,34)	1:A:21:LYS:N	1:A:21:LYS:CA	1:A:21:LYS:C	1:A:22:CYS:N	16	12.3
(1,86)	1:A:64:ARG:N	1:A:64:ARG:CA	1:A:64:ARG:C	1:A:65:CYS:N	16	12.2
(1,180)	1:A:104:CYS:N	1:A:104:CYS:CA	1:A:104:CYS:C	1:A:105:ASN:N	4	12.2
(1,156)	1:A:114:SER:N	1:A:114:SER:CA	1:A:114:SER:C	1:A:115:ASP:N	12	12.2
(1,86)	1:A:64:ARG:N	1:A:64:ARG:CA	1:A:64:ARG:C	1:A:65:CYS:N	8	12.1
(1,36)	1:A:22:CYS:N	1:A:22:CYS:CA	1:A:22:CYS:C	1:A:23:ASP:N	13	12.1
(1,36)	1:A:22:CYS:N	1:A:22:CYS:CA	1:A:22:CYS:C	1:A:23:ASP:N	15	12.1
(1,162)	1:A:117:LEU:N	1:A:117:LEU:CA	1:A:117:LEU:C	1:A:118:ASP:N	6	12.1
(1,143)	1:A:102:PHE:C	1:A:103:VAL:N	1:A:103:VAL:CA	1:A:103:VAL:C	20	12.1
(1,73)	1:A:56:THR:C	1:A:57:GLN:N	1:A:57:GLN:CA	1:A:57:GLN:C	13	12.0
(1,36)	1:A:22:CYS:N	1:A:22:CYS:CA	1:A:22:CYS:C	1:A:23:ASP:N	6	12.0
(1,162)	1:A:117:LEU:N	1:A:117:LEU:CA	1:A:117:LEU:C	1:A:118:ASP:N	7	12.0
(1,156)	1:A:114:SER:N	1:A:114:SER:CA	1:A:114:SER:C	1:A:115:ASP:N	18	12.0
(1,95)	1:A:68:GLU:C	1:A:69:ASN:N	1:A:69:ASN:CA	1:A:69:ASN:C	5	11.9
(1,36)	1:A:22:CYS:N	1:A:22:CYS:CA	1:A:22:CYS:C	1:A:23:ASP:N	7	11.9
(1,34)	1:A:21:LYS:N	1:A:21:LYS:CA	1:A:21:LYS:C	1:A:22:CYS:N	4	11.9
(1,105)	1:A:76:ASP:C	1:A:77:GLU:N	1:A:77:GLU:CA	1:A:77:GLU:C	3	11.9
(1,36)	1:A:22:CYS:N	1:A:22:CYS:CA	1:A:22:CYS:C	1:A:23:ASP:N	11	11.8
(1,180)	1:A:104:CYS:N	1:A:104:CYS:CA	1:A:104:CYS:C	1:A:105:ASN:N	7	11.8
(1,162)	1:A:117:LEU:N	1:A:117:LEU:CA	1:A:117:LEU:C	1:A:118:ASP:N	4	11.8
(1,156)	1:A:114:SER:N	1:A:114:SER:CA	1:A:114:SER:C	1:A:115:ASP:N	13	11.8
(1,95)	1:A:68:GLU:C	1:A:69:ASN:N	1:A:69:ASN:CA	1:A:69:ASN:C	1	11.7
(1,95)	1:A:68:GLU:C	1:A:69:ASN:N	1:A:69:ASN:CA	1:A:69:ASN:C	20	11.7
(1,180)	1:A:104:CYS:N	1:A:104:CYS:CA	1:A:104:CYS:C	1:A:105:ASN:N	6	11.7
(1,158)	1:A:115:ASP:N	1:A:115:ASP:CA	1:A:115:ASP:C	1:A:116:GLU:N	18	11.7
(1,95)	1:A:68:GLU:C	1:A:69:ASN:N	1:A:69:ASN:CA	1:A:69:ASN:C	9	11.6
(1,74)	1:A:57:GLN:N	1:A:57:GLN:CA	1:A:57:GLN:C	1:A:58:CYS:N	4	11.6

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,41)	1:A:26:PRO:C	1:A:27:ASP:N	1:A:27:ASP:CA	1:A:27:ASP:C	1	11.6
(1,156)	1:A:114:SER:N	1:A:114:SER:CA	1:A:114:SER:C	1:A:115:ASP:N	16	11.6
(1,95)	1:A:68:GLU:C	1:A:69:ASN:N	1:A:69:ASN:CA	1:A:69:ASN:C	16	11.5
(1,73)	1:A:56:THR:C	1:A:57:GLN:N	1:A:57:GLN:CA	1:A:57:GLN:C	5	11.5
(1,36)	1:A:22:CYS:N	1:A:22:CYS:CA	1:A:22:CYS:C	1:A:23:ASP:N	16	11.5
(1,156)	1:A:114:SER:N	1:A:114:SER:CA	1:A:114:SER:C	1:A:115:ASP:N	15	11.5
(1,86)	1:A:64:ARG:N	1:A:64:ARG:CA	1:A:64:ARG:C	1:A:65:CYS:N	9	11.4
(1,73)	1:A:56:THR:C	1:A:57:GLN:N	1:A:57:GLN:CA	1:A:57:GLN:C	9	11.4
(1,73)	1:A:56:THR:C	1:A:57:GLN:N	1:A:57:GLN:CA	1:A:57:GLN:C	16	11.4
(1,36)	1:A:22:CYS:N	1:A:22:CYS:CA	1:A:22:CYS:C	1:A:23:ASP:N	18	11.4
(1,180)	1:A:104:CYS:N	1:A:104:CYS:CA	1:A:104:CYS:C	1:A:105:ASN:N	3	11.4
(1,180)	1:A:104:CYS:N	1:A:104:CYS:CA	1:A:104:CYS:C	1:A:105:ASN:N	9	11.4
(1,179)	1:A:103:VAL:C	1:A:104:CYS:N	1:A:104:CYS:CA	1:A:104:CYS:C	8	11.4
(1,162)	1:A:117:LEU:N	1:A:117:LEU:CA	1:A:117:LEU:C	1:A:118:ASP:N	3	11.4
(1,156)	1:A:114:SER:N	1:A:114:SER:CA	1:A:114:SER:C	1:A:115:ASP:N	9	11.4
(1,156)	1:A:114:SER:N	1:A:114:SER:CA	1:A:114:SER:C	1:A:115:ASP:N	11	11.4
(1,156)	1:A:114:SER:N	1:A:114:SER:CA	1:A:114:SER:C	1:A:115:ASP:N	20	11.4
(1,152)	1:A:110:CYS:N	1:A:110:CYS:CA	1:A:110:CYS:C	1:A:111:SER:N	2	11.4
(1,95)	1:A:68:GLU:C	1:A:69:ASN:N	1:A:69:ASN:CA	1:A:69:ASN:C	2	11.3
(1,180)	1:A:104:CYS:N	1:A:104:CYS:CA	1:A:104:CYS:C	1:A:105:ASN:N	16	11.3
(1,180)	1:A:104:CYS:N	1:A:104:CYS:CA	1:A:104:CYS:C	1:A:105:ASN:N	19	11.3
(1,95)	1:A:68:GLU:C	1:A:69:ASN:N	1:A:69:ASN:CA	1:A:69:ASN:C	11	11.2
(1,65)	1:A:49:ILE:C	1:A:50:SER:N	1:A:50:SER:CA	1:A:50:SER:C	15	11.2
(1,41)	1:A:26:PRO:C	1:A:27:ASP:N	1:A:27:ASP:CA	1:A:27:ASP:C	8	11.2
(1,162)	1:A:117:LEU:N	1:A:117:LEU:CA	1:A:117:LEU:C	1:A:118:ASP:N	13	11.2
(1,143)	1:A:102:PHE:C	1:A:103:VAL:N	1:A:103:VAL:CA	1:A:103:VAL:C	11	11.2
(1,73)	1:A:56:THR:C	1:A:57:GLN:N	1:A:57:GLN:CA	1:A:57:GLN:C	11	11.1
(1,41)	1:A:26:PRO:C	1:A:27:ASP:N	1:A:27:ASP:CA	1:A:27:ASP:C	6	11.1
(1,36)	1:A:22:CYS:N	1:A:22:CYS:CA	1:A:22:CYS:C	1:A:23:ASP:N	12	11.1
(1,181)	1:A:111:SER:C	1:A:112:ASP:N	1:A:112:ASP:CA	1:A:112:ASP:C	17	11.1
(1,180)	1:A:104:CYS:N	1:A:104:CYS:CA	1:A:104:CYS:C	1:A:105:ASN:N	17	11.1
(1,162)	1:A:117:LEU:N	1:A:117:LEU:CA	1:A:117:LEU:C	1:A:118:ASP:N	10	11.1
(1,153)	1:A:110:CYS:C	1:A:111:SER:N	1:A:111:SER:CA	1:A:111:SER:C	17	11.1
(1,41)	1:A:26:PRO:C	1:A:27:ASP:N	1:A:27:ASP:CA	1:A:27:ASP:C	4	11.0
(1,179)	1:A:103:VAL:C	1:A:104:CYS:N	1:A:104:CYS:CA	1:A:104:CYS:C	10	11.0
(1,34)	1:A:21:LYS:N	1:A:21:LYS:CA	1:A:21:LYS:C	1:A:22:CYS:N	12	10.9
(1,182)	1:A:112:ASP:N	1:A:112:ASP:CA	1:A:112:ASP:C	1:A:113:GLY:N	2	10.9
(1,180)	1:A:104:CYS:N	1:A:104:CYS:CA	1:A:104:CYS:C	1:A:105:ASN:N	5	10.9
(1,36)	1:A:22:CYS:N	1:A:22:CYS:CA	1:A:22:CYS:C	1:A:23:ASP:N	4	10.8
(1,153)	1:A:110:CYS:C	1:A:111:SER:N	1:A:111:SER:CA	1:A:111:SER:C	3	10.8
(1,143)	1:A:102:PHE:C	1:A:103:VAL:N	1:A:103:VAL:CA	1:A:103:VAL:C	12	10.8
(1,72)	1:A:55:SER:N	1:A:55:SER:CA	1:A:55:SER:C	1:A:56:THR:N	5	10.7
(1,162)	1:A:117:LEU:N	1:A:117:LEU:CA	1:A:117:LEU:C	1:A:118:ASP:N	8	10.7
(1,97)	1:A:70:ASP:C	1:A:71:CYS:N	1:A:71:CYS:CA	1:A:71:CYS:C	6	10.6
(1,41)	1:A:26:PRO:C	1:A:27:ASP:N	1:A:27:ASP:CA	1:A:27:ASP:C	19	10.6
(1,162)	1:A:117:LEU:N	1:A:117:LEU:CA	1:A:117:LEU:C	1:A:118:ASP:N	2	10.6
(1,72)	1:A:55:SER:N	1:A:55:SER:CA	1:A:55:SER:C	1:A:56:THR:N	1	10.5
(1,72)	1:A:55:SER:N	1:A:55:SER:CA	1:A:55:SER:C	1:A:56:THR:N	17	10.5
(1,41)	1:A:26:PRO:C	1:A:27:ASP:N	1:A:27:ASP:CA	1:A:27:ASP:C	14	10.5
(1,108)	1:A:78:GLU:N	1:A:78:GLU:CA	1:A:78:GLU:C	1:A:79:ASN:N	13	10.5
(1,86)	1:A:64:ARG:N	1:A:64:ARG:CA	1:A:64:ARG:C	1:A:65:CYS:N	18	10.4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,72)	1:A:55:SER:N	1:A:55:SER:CA	1:A:55:SER:C	1:A:56:THR:N	2	10.4
(1,41)	1:A:26:PRO:C	1:A:27:ASP:N	1:A:27:ASP:CA	1:A:27:ASP:C	10	10.4
(1,179)	1:A:103:VAL:C	1:A:104:CYS:N	1:A:104:CYS:CA	1:A:104:CYS:C	1	10.4
(1,95)	1:A:68:GLU:C	1:A:69:ASN:N	1:A:69:ASN:CA	1:A:69:ASN:C	17	10.3
(1,65)	1:A:49:ILE:C	1:A:50:SER:N	1:A:50:SER:CA	1:A:50:SER:C	12	10.3
(1,143)	1:A:102:PHE:C	1:A:103:VAL:N	1:A:103:VAL:CA	1:A:103:VAL:C	18	10.3
(1,93)	1:A:67:GLY:C	1:A:68:GLU:N	1:A:68:GLU:CA	1:A:68:GLU:C	5	10.2
(1,41)	1:A:26:PRO:C	1:A:27:ASP:N	1:A:27:ASP:CA	1:A:27:ASP:C	15	10.2
(1,98)	1:A:71:CYS:N	1:A:71:CYS:CA	1:A:71:CYS:C	1:A:72:ASP:N	4	10.1
(1,72)	1:A:55:SER:N	1:A:55:SER:CA	1:A:55:SER:C	1:A:56:THR:N	20	10.1
(1,41)	1:A:26:PRO:C	1:A:27:ASP:N	1:A:27:ASP:CA	1:A:27:ASP:C	17	10.1
(1,180)	1:A:104:CYS:N	1:A:104:CYS:CA	1:A:104:CYS:C	1:A:105:ASN:N	2	10.1
(1,179)	1:A:103:VAL:C	1:A:104:CYS:N	1:A:104:CYS:CA	1:A:104:CYS:C	9	10.0
(1,158)	1:A:115:ASP:N	1:A:115:ASP:CA	1:A:115:ASP:C	1:A:116:GLU:N	12	10.0
(1,154)	1:A:111:SER:N	1:A:111:SER:CA	1:A:111:SER:C	1:A:112:ASP:N	17	10.0
(1,153)	1:A:110:CYS:C	1:A:111:SER:N	1:A:111:SER:CA	1:A:111:SER:C	6	10.0
(1,108)	1:A:78:GLU:N	1:A:78:GLU:CA	1:A:78:GLU:C	1:A:79:ASN:N	17	10.0
(1,105)	1:A:76:ASP:C	1:A:77:GLU:N	1:A:77:GLU:CA	1:A:77:GLU:C	11	10.0
(1,58)	1:A:39:CYS:N	1:A:39:CYS:CA	1:A:39:CYS:C	1:A:40:HIS:N	9	9.9
(1,41)	1:A:26:PRO:C	1:A:27:ASP:N	1:A:27:ASP:CA	1:A:27:ASP:C	2	9.9
(1,162)	1:A:117:LEU:N	1:A:117:LEU:CA	1:A:117:LEU:C	1:A:118:ASP:N	1	9.9
(1,158)	1:A:115:ASP:N	1:A:115:ASP:CA	1:A:115:ASP:C	1:A:116:GLU:N	14	9.9
(1,108)	1:A:78:GLU:N	1:A:78:GLU:CA	1:A:78:GLU:C	1:A:79:ASN:N	6	9.9
(1,93)	1:A:67:GLY:C	1:A:68:GLU:N	1:A:68:GLU:CA	1:A:68:GLU:C	7	9.8
(1,93)	1:A:67:GLY:C	1:A:68:GLU:N	1:A:68:GLU:CA	1:A:68:GLU:C	16	9.8
(1,26)	1:A:16:VAL:N	1:A:16:VAL:CA	1:A:16:VAL:C	1:A:17:PRO:N	15	9.8
(1,153)	1:A:110:CYS:C	1:A:111:SER:N	1:A:111:SER:CA	1:A:111:SER:C	4	9.8
(1,153)	1:A:110:CYS:C	1:A:111:SER:N	1:A:111:SER:CA	1:A:111:SER:C	7	9.8
(1,152)	1:A:110:CYS:N	1:A:110:CYS:CA	1:A:110:CYS:C	1:A:111:SER:N	17	9.8
(1,93)	1:A:67:GLY:C	1:A:68:GLU:N	1:A:68:GLU:CA	1:A:68:GLU:C	2	9.7
(1,33)	1:A:20:TRP:C	1:A:21:LYS:N	1:A:21:LYS:CA	1:A:21:LYS:C	6	9.7
(1,179)	1:A:103:VAL:C	1:A:104:CYS:N	1:A:104:CYS:CA	1:A:104:CYS:C	16	9.7
(1,93)	1:A:67:GLY:C	1:A:68:GLU:N	1:A:68:GLU:CA	1:A:68:GLU:C	11	9.6
(1,93)	1:A:67:GLY:C	1:A:68:GLU:N	1:A:68:GLU:CA	1:A:68:GLU:C	1	9.5
(1,72)	1:A:55:SER:N	1:A:55:SER:CA	1:A:55:SER:C	1:A:56:THR:N	9	9.5
(1,106)	1:A:77:GLU:N	1:A:77:GLU:CA	1:A:77:GLU:C	1:A:78:GLU:N	6	9.5
(1,104)	1:A:76:ASP:N	1:A:76:ASP:CA	1:A:76:ASP:C	1:A:77:GLU:N	3	9.5
(1,58)	1:A:39:CYS:N	1:A:39:CYS:CA	1:A:39:CYS:C	1:A:40:HIS:N	4	9.4
(1,181)	1:A:111:SER:C	1:A:112:ASP:N	1:A:112:ASP:CA	1:A:112:ASP:C	10	9.4
(1,73)	1:A:56:THR:C	1:A:57:GLN:N	1:A:57:GLN:CA	1:A:57:GLN:C	3	9.3
(1,150)	1:A:108:ASP:N	1:A:108:ASP:CA	1:A:108:ASP:C	1:A:109:ASP:N	17	9.3
(1,95)	1:A:68:GLU:C	1:A:69:ASN:N	1:A:69:ASN:CA	1:A:69:ASN:C	13	9.2
(1,93)	1:A:67:GLY:C	1:A:68:GLU:N	1:A:68:GLU:CA	1:A:68:GLU:C	9	9.2
(1,86)	1:A:64:ARG:N	1:A:64:ARG:CA	1:A:64:ARG:C	1:A:65:CYS:N	4	9.2
(1,181)	1:A:111:SER:C	1:A:112:ASP:N	1:A:112:ASP:CA	1:A:112:ASP:C	1	9.2
(1,104)	1:A:76:ASP:N	1:A:76:ASP:CA	1:A:76:ASP:C	1:A:77:GLU:N	16	9.2
(1,98)	1:A:71:CYS:N	1:A:71:CYS:CA	1:A:71:CYS:C	1:A:72:ASP:N	18	9.1
(1,86)	1:A:64:ARG:N	1:A:64:ARG:CA	1:A:64:ARG:C	1:A:65:CYS:N	14	9.1
(1,72)	1:A:55:SER:N	1:A:55:SER:CA	1:A:55:SER:C	1:A:56:THR:N	16	9.1
(1,93)	1:A:67:GLY:C	1:A:68:GLU:N	1:A:68:GLU:CA	1:A:68:GLU:C	17	9.0
(1,74)	1:A:57:GLN:N	1:A:57:GLN:CA	1:A:57:GLN:C	1:A:58:CYS:N	12	9.0

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,58)	1:A:39:CYS:N	1:A:39:CYS:CA	1:A:39:CYS:C	1:A:40:HIS:N	12	9.0
(1,58)	1:A:39:CYS:N	1:A:39:CYS:CA	1:A:39:CYS:C	1:A:40:HIS:N	16	9.0
(1,162)	1:A:117:LEU:N	1:A:117:LEU:CA	1:A:117:LEU:C	1:A:118:ASP:N	9	9.0
(1,162)	1:A:117:LEU:N	1:A:117:LEU:CA	1:A:117:LEU:C	1:A:118:ASP:N	17	9.0
(1,72)	1:A:55:SER:N	1:A:55:SER:CA	1:A:55:SER:C	1:A:56:THR:N	6	8.9
(1,58)	1:A:39:CYS:N	1:A:39:CYS:CA	1:A:39:CYS:C	1:A:40:HIS:N	3	8.9
(1,36)	1:A:22:CYS:N	1:A:22:CYS:CA	1:A:22:CYS:C	1:A:23:ASP:N	10	8.9
(1,108)	1:A:78:GLU:N	1:A:78:GLU:CA	1:A:78:GLU:C	1:A:79:ASN:N	3	8.9
(1,182)	1:A:112:ASP:N	1:A:112:ASP:CA	1:A:112:ASP:C	1:A:113:GLY:N	19	8.8
(1,181)	1:A:111:SER:C	1:A:112:ASP:N	1:A:112:ASP:CA	1:A:112:ASP:C	16	8.8
(1,150)	1:A:108:ASP:N	1:A:108:ASP:CA	1:A:108:ASP:C	1:A:109:ASP:N	19	8.8
(1,72)	1:A:55:SER:N	1:A:55:SER:CA	1:A:55:SER:C	1:A:56:THR:N	15	8.7
(1,72)	1:A:55:SER:N	1:A:55:SER:CA	1:A:55:SER:C	1:A:56:THR:N	19	8.7
(1,98)	1:A:71:CYS:N	1:A:71:CYS:CA	1:A:71:CYS:C	1:A:72:ASP:N	20	8.6
(1,93)	1:A:67:GLY:C	1:A:68:GLU:N	1:A:68:GLU:CA	1:A:68:GLU:C	19	8.6
(1,73)	1:A:56:THR:C	1:A:57:GLN:N	1:A:57:GLN:CA	1:A:57:GLN:C	14	8.6
(1,41)	1:A:26:PRO:C	1:A:27:ASP:N	1:A:27:ASP:CA	1:A:27:ASP:C	3	8.6
(1,33)	1:A:20:TRP:C	1:A:21:LYS:N	1:A:21:LYS:CA	1:A:21:LYS:C	12	8.5
(1,33)	1:A:20:TRP:C	1:A:21:LYS:N	1:A:21:LYS:CA	1:A:21:LYS:C	16	8.5
(1,74)	1:A:57:GLN:N	1:A:57:GLN:CA	1:A:57:GLN:C	1:A:58:CYS:N	2	8.4
(1,72)	1:A:55:SER:N	1:A:55:SER:CA	1:A:55:SER:C	1:A:56:THR:N	7	8.4
(1,72)	1:A:55:SER:N	1:A:55:SER:CA	1:A:55:SER:C	1:A:56:THR:N	13	8.4
(1,33)	1:A:20:TRP:C	1:A:21:LYS:N	1:A:21:LYS:CA	1:A:21:LYS:C	4	8.4
(1,158)	1:A:115:ASP:N	1:A:115:ASP:CA	1:A:115:ASP:C	1:A:116:GLU:N	15	8.4
(1,109)	1:A:82:ASN:C	1:A:83:ILE:N	1:A:83:ILE:CA	1:A:83:ILE:C	1	8.4
(1,103)	1:A:75:GLU:C	1:A:76:ASP:N	1:A:76:ASP:CA	1:A:76:ASP:C	6	8.4
(1,93)	1:A:67:GLY:C	1:A:68:GLU:N	1:A:68:GLU:CA	1:A:68:GLU:C	13	8.3
(1,72)	1:A:55:SER:N	1:A:55:SER:CA	1:A:55:SER:C	1:A:56:THR:N	3	8.3
(1,65)	1:A:49:ILE:C	1:A:50:SER:N	1:A:50:SER:CA	1:A:50:SER:C	4	8.3
(1,58)	1:A:39:CYS:N	1:A:39:CYS:CA	1:A:39:CYS:C	1:A:40:HIS:N	15	8.3
(1,58)	1:A:39:CYS:N	1:A:39:CYS:CA	1:A:39:CYS:C	1:A:40:HIS:N	17	8.3
(1,181)	1:A:111:SER:C	1:A:112:ASP:N	1:A:112:ASP:CA	1:A:112:ASP:C	9	8.3
(1,105)	1:A:76:ASP:C	1:A:77:GLU:N	1:A:77:GLU:CA	1:A:77:GLU:C	16	8.3
(1,96)	1:A:69:ASN:N	1:A:69:ASN:CA	1:A:69:ASN:C	1:A:70:ASP:N	14	8.2
(1,34)	1:A:21:LYS:N	1:A:21:LYS:CA	1:A:21:LYS:C	1:A:22:CYS:N	6	8.2
(1,33)	1:A:20:TRP:C	1:A:21:LYS:N	1:A:21:LYS:CA	1:A:21:LYS:C	7	8.2
(1,161)	1:A:116:GLU:C	1:A:117:LEU:N	1:A:117:LEU:CA	1:A:117:LEU:C	17	8.2
(1,159)	1:A:115:ASP:C	1:A:116:GLU:N	1:A:116:GLU:CA	1:A:116:GLU:C	14	8.2
(1,150)	1:A:108:ASP:N	1:A:108:ASP:CA	1:A:108:ASP:C	1:A:109:ASP:N	5	8.2
(1,144)	1:A:103:VAL:N	1:A:103:VAL:CA	1:A:103:VAL:C	1:A:104:CYS:N	18	8.2
(1,74)	1:A:57:GLN:N	1:A:57:GLN:CA	1:A:57:GLN:C	1:A:58:CYS:N	6	8.1
(1,41)	1:A:26:PRO:C	1:A:27:ASP:N	1:A:27:ASP:CA	1:A:27:ASP:C	18	8.1
(1,158)	1:A:115:ASP:N	1:A:115:ASP:CA	1:A:115:ASP:C	1:A:116:GLU:N	20	8.1
(1,95)	1:A:68:GLU:C	1:A:69:ASN:N	1:A:69:ASN:CA	1:A:69:ASN:C	12	8.0
(1,72)	1:A:55:SER:N	1:A:55:SER:CA	1:A:55:SER:C	1:A:56:THR:N	18	8.0
(1,58)	1:A:39:CYS:N	1:A:39:CYS:CA	1:A:39:CYS:C	1:A:40:HIS:N	1	8.0
(1,162)	1:A:117:LEU:N	1:A:117:LEU:CA	1:A:117:LEU:C	1:A:118:ASP:N	19	8.0
(1,150)	1:A:108:ASP:N	1:A:108:ASP:CA	1:A:108:ASP:C	1:A:109:ASP:N	8	8.0
(1,105)	1:A:76:ASP:C	1:A:77:GLU:N	1:A:77:GLU:CA	1:A:77:GLU:C	5	8.0
(1,98)	1:A:71:CYS:N	1:A:71:CYS:CA	1:A:71:CYS:C	1:A:72:ASP:N	14	7.9
(1,74)	1:A:57:GLN:N	1:A:57:GLN:CA	1:A:57:GLN:C	1:A:58:CYS:N	18	7.9

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,72)	1:A:55:SER:N	1:A:55:SER:CA	1:A:55:SER:C	1:A:56:THR:N	12	7.9
(1,58)	1:A:39:CYS:N	1:A:39:CYS:CA	1:A:39:CYS:C	1:A:40:HIS:N	13	7.9
(1,33)	1:A:20:TRP:C	1:A:21:LYS:N	1:A:21:LYS:CA	1:A:21:LYS:C	9	7.9
(1,9)	1:A:7:ASP:C	1:A:8:PHE:N	1:A:8:PHE:CA	1:A:8:PHE:C	14	7.8
(1,58)	1:A:39:CYS:N	1:A:39:CYS:CA	1:A:39:CYS:C	1:A:40:HIS:N	7	7.8
(1,108)	1:A:78:GLU:N	1:A:78:GLU:CA	1:A:78:GLU:C	1:A:79:ASN:N	11	7.8
(1,74)	1:A:57:GLN:N	1:A:57:GLN:CA	1:A:57:GLN:C	1:A:58:CYS:N	20	7.7
(1,73)	1:A:56:THR:C	1:A:57:GLN:N	1:A:57:GLN:CA	1:A:57:GLN:C	19	7.7
(1,108)	1:A:78:GLU:N	1:A:78:GLU:CA	1:A:78:GLU:C	1:A:79:ASN:N	2	7.7
(1,96)	1:A:69:ASN:N	1:A:69:ASN:CA	1:A:69:ASN:C	1:A:70:ASP:N	18	7.6
(1,73)	1:A:56:THR:C	1:A:57:GLN:N	1:A:57:GLN:CA	1:A:57:GLN:C	10	7.6
(1,72)	1:A:55:SER:N	1:A:55:SER:CA	1:A:55:SER:C	1:A:56:THR:N	11	7.6
(1,107)	1:A:77:GLU:C	1:A:78:GLU:N	1:A:78:GLU:CA	1:A:78:GLU:C	12	7.6
(1,105)	1:A:76:ASP:C	1:A:77:GLU:N	1:A:77:GLU:CA	1:A:77:GLU:C	9	7.6
(1,33)	1:A:20:TRP:C	1:A:21:LYS:N	1:A:21:LYS:CA	1:A:21:LYS:C	14	7.5
(1,108)	1:A:78:GLU:N	1:A:78:GLU:CA	1:A:78:GLU:C	1:A:79:ASN:N	1	7.5
(1,105)	1:A:76:ASP:C	1:A:77:GLU:N	1:A:77:GLU:CA	1:A:77:GLU:C	20	7.5
(1,104)	1:A:76:ASP:N	1:A:76:ASP:CA	1:A:76:ASP:C	1:A:77:GLU:N	11	7.5
(1,58)	1:A:39:CYS:N	1:A:39:CYS:CA	1:A:39:CYS:C	1:A:40:HIS:N	5	7.4
(1,33)	1:A:20:TRP:C	1:A:21:LYS:N	1:A:21:LYS:CA	1:A:21:LYS:C	19	7.4
(1,181)	1:A:111:SER:C	1:A:112:ASP:N	1:A:112:ASP:CA	1:A:112:ASP:C	8	7.4
(1,99)	1:A:71:CYS:C	1:A:72:ASP:N	1:A:72:ASP:CA	1:A:72:ASP:C	20	7.3
(1,93)	1:A:67:GLY:C	1:A:68:GLU:N	1:A:68:GLU:CA	1:A:68:GLU:C	3	7.3
(1,93)	1:A:67:GLY:C	1:A:68:GLU:N	1:A:68:GLU:CA	1:A:68:GLU:C	6	7.3
(1,73)	1:A:56:THR:C	1:A:57:GLN:N	1:A:57:GLN:CA	1:A:57:GLN:C	8	7.3
(1,33)	1:A:20:TRP:C	1:A:21:LYS:N	1:A:21:LYS:CA	1:A:21:LYS:C	20	7.3
(1,98)	1:A:71:CYS:N	1:A:71:CYS:CA	1:A:71:CYS:C	1:A:72:ASP:N	7	7.2
(1,98)	1:A:71:CYS:N	1:A:71:CYS:CA	1:A:71:CYS:C	1:A:72:ASP:N	12	7.2
(1,95)	1:A:68:GLU:C	1:A:69:ASN:N	1:A:69:ASN:CA	1:A:69:ASN:C	6	7.2
(1,58)	1:A:39:CYS:N	1:A:39:CYS:CA	1:A:39:CYS:C	1:A:40:HIS:N	11	7.2
(1,33)	1:A:20:TRP:C	1:A:21:LYS:N	1:A:21:LYS:CA	1:A:21:LYS:C	15	7.2
(1,152)	1:A:110:CYS:N	1:A:110:CYS:CA	1:A:110:CYS:C	1:A:111:SER:N	5	7.2
(1,72)	1:A:55:SER:N	1:A:55:SER:CA	1:A:55:SER:C	1:A:56:THR:N	4	7.1
(1,32)	1:A:19:ARG:N	1:A:19:ARG:CA	1:A:19:ARG:C	1:A:20:TRP:N	4	7.1
(1,32)	1:A:19:ARG:N	1:A:19:ARG:CA	1:A:19:ARG:C	1:A:20:TRP:N	12	7.1
(1,158)	1:A:115:ASP:N	1:A:115:ASP:CA	1:A:115:ASP:C	1:A:116:GLU:N	13	7.1
(1,150)	1:A:108:ASP:N	1:A:108:ASP:CA	1:A:108:ASP:C	1:A:109:ASP:N	2	7.1
(1,98)	1:A:71:CYS:N	1:A:71:CYS:CA	1:A:71:CYS:C	1:A:72:ASP:N	17	7.0
(1,9)	1:A:7:ASP:C	1:A:8:PHE:N	1:A:8:PHE:CA	1:A:8:PHE:C	4	7.0
(1,74)	1:A:57:GLN:N	1:A:57:GLN:CA	1:A:57:GLN:C	1:A:58:CYS:N	10	7.0
(1,73)	1:A:56:THR:C	1:A:57:GLN:N	1:A:57:GLN:CA	1:A:57:GLN:C	18	7.0
(1,126)	1:A:94:SER:N	1:A:94:SER:CA	1:A:94:SER:C	1:A:95:GLY:N	16	7.0
(1,93)	1:A:67:GLY:C	1:A:68:GLU:N	1:A:68:GLU:CA	1:A:68:GLU:C	10	6.9
(1,33)	1:A:20:TRP:C	1:A:21:LYS:N	1:A:21:LYS:CA	1:A:21:LYS:C	3	6.9
(1,182)	1:A:112:ASP:N	1:A:112:ASP:CA	1:A:112:ASP:C	1:A:113:GLY:N	11	6.9
(1,64)	1:A:49:ILE:N	1:A:49:ILE:CA	1:A:49:ILE:C	1:A:50:SER:N	14	6.8
(1,58)	1:A:39:CYS:N	1:A:39:CYS:CA	1:A:39:CYS:C	1:A:40:HIS:N	18	6.8
(1,58)	1:A:39:CYS:N	1:A:39:CYS:CA	1:A:39:CYS:C	1:A:40:HIS:N	19	6.7
(1,56)	1:A:38:GLN:N	1:A:38:GLN:CA	1:A:38:GLN:C	1:A:39:CYS:N	19	6.7
(1,50)	1:A:35:SER:N	1:A:35:SER:CA	1:A:35:SER:C	1:A:36:PRO:N	10	6.7
(1,182)	1:A:112:ASP:N	1:A:112:ASP:CA	1:A:112:ASP:C	1:A:113:GLY:N	5	6.7

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,161)	1:A:116:GLU:C	1:A:117:LEU:N	1:A:117:LEU:CA	1:A:117:LEU:C	5	6.7
(1,150)	1:A:108:ASP:N	1:A:108:ASP:CA	1:A:108:ASP:C	1:A:109:ASP:N	1	6.7
(1,144)	1:A:103:VAL:N	1:A:103:VAL:CA	1:A:103:VAL:C	1:A:104:CYS:N	11	6.7
(1,108)	1:A:78:GLU:N	1:A:78:GLU:CA	1:A:78:GLU:C	1:A:79:ASN:N	20	6.7
(1,72)	1:A:55:SER:N	1:A:55:SER:CA	1:A:55:SER:C	1:A:56:THR:N	14	6.6
(1,33)	1:A:20:TRP:C	1:A:21:LYS:N	1:A:21:LYS:CA	1:A:21:LYS:C	18	6.6
(1,105)	1:A:76:ASP:C	1:A:77:GLU:N	1:A:77:GLU:CA	1:A:77:GLU:C	6	6.6
(1,74)	1:A:57:GLN:N	1:A:57:GLN:CA	1:A:57:GLN:C	1:A:58:CYS:N	7	6.5
(1,73)	1:A:56:THR:C	1:A:57:GLN:N	1:A:57:GLN:CA	1:A:57:GLN:C	12	6.5
(1,56)	1:A:38:GLN:N	1:A:38:GLN:CA	1:A:38:GLN:C	1:A:39:CYS:N	20	6.5
(1,33)	1:A:20:TRP:C	1:A:21:LYS:N	1:A:21:LYS:CA	1:A:21:LYS:C	10	6.5
(1,127)	1:A:94:SER:C	1:A:95:GLY:N	1:A:95:GLY:CA	1:A:95:GLY:C	16	6.5
(1,126)	1:A:94:SER:N	1:A:94:SER:CA	1:A:94:SER:C	1:A:95:GLY:N	9	6.5
(1,101)	1:A:74:GLY:C	1:A:75:GLU:N	1:A:75:GLU:CA	1:A:75:GLU:C	4	6.5
(1,100)	1:A:72:ASP:N	1:A:72:ASP:CA	1:A:72:ASP:C	1:A:73:SER:N	2	6.5
(1,74)	1:A:57:GLN:N	1:A:57:GLN:CA	1:A:57:GLN:C	1:A:58:CYS:N	14	6.4
(1,159)	1:A:115:ASP:C	1:A:116:GLU:N	1:A:116:GLU:CA	1:A:116:GLU:C	18	6.4
(1,144)	1:A:103:VAL:N	1:A:103:VAL:CA	1:A:103:VAL:C	1:A:104:CYS:N	12	6.4
(1,109)	1:A:82:ASN:C	1:A:83:ILE:N	1:A:83:ILE:CA	1:A:83:ILE:C	9	6.4
(1,101)	1:A:74:GLY:C	1:A:75:GLU:N	1:A:75:GLU:CA	1:A:75:GLU:C	18	6.4
(1,93)	1:A:67:GLY:C	1:A:68:GLU:N	1:A:68:GLU:CA	1:A:68:GLU:C	4	6.3
(1,5)	1:A:4:ALA:C	1:A:5:GLU:N	1:A:5:GLU:CA	1:A:5:GLU:C	15	6.3
(1,108)	1:A:78:GLU:N	1:A:78:GLU:CA	1:A:78:GLU:C	1:A:79:ASN:N	16	6.3
(1,98)	1:A:71:CYS:N	1:A:71:CYS:CA	1:A:71:CYS:C	1:A:72:ASP:N	15	6.2
(1,96)	1:A:69:ASN:N	1:A:69:ASN:CA	1:A:69:ASN:C	1:A:70:ASP:N	4	6.2
(1,95)	1:A:68:GLU:C	1:A:69:ASN:N	1:A:69:ASN:CA	1:A:69:ASN:C	8	6.2
(1,80)	1:A:60:PRO:N	1:A:60:PRO:CA	1:A:60:PRO:C	1:A:61:VAL:N	13	6.2
(1,74)	1:A:57:GLN:N	1:A:57:GLN:CA	1:A:57:GLN:C	1:A:58:CYS:N	17	6.2
(1,56)	1:A:38:GLN:N	1:A:38:GLN:CA	1:A:38:GLN:C	1:A:39:CYS:N	3	6.2
(1,33)	1:A:20:TRP:C	1:A:21:LYS:N	1:A:21:LYS:CA	1:A:21:LYS:C	13	6.2
(1,33)	1:A:20:TRP:C	1:A:21:LYS:N	1:A:21:LYS:CA	1:A:21:LYS:C	17	6.2
(1,182)	1:A:112:ASP:N	1:A:112:ASP:CA	1:A:112:ASP:C	1:A:113:GLY:N	18	6.2
(1,125)	1:A:93:SER:C	1:A:94:SER:N	1:A:94:SER:CA	1:A:94:SER:C	13	6.2
(1,124)	1:A:93:SER:N	1:A:93:SER:CA	1:A:93:SER:C	1:A:94:SER:N	20	6.2
(1,108)	1:A:78:GLU:N	1:A:78:GLU:CA	1:A:78:GLU:C	1:A:79:ASN:N	7	6.2
(1,104)	1:A:76:ASP:N	1:A:76:ASP:CA	1:A:76:ASP:C	1:A:77:GLU:N	9	6.2
(1,101)	1:A:74:GLY:C	1:A:75:GLU:N	1:A:75:GLU:CA	1:A:75:GLU:C	20	6.2
(1,100)	1:A:72:ASP:N	1:A:72:ASP:CA	1:A:72:ASP:C	1:A:73:SER:N	7	6.2
(1,93)	1:A:67:GLY:C	1:A:68:GLU:N	1:A:68:GLU:CA	1:A:68:GLU:C	8	6.1
(1,58)	1:A:39:CYS:N	1:A:39:CYS:CA	1:A:39:CYS:C	1:A:40:HIS:N	20	6.1
(1,56)	1:A:38:GLN:N	1:A:38:GLN:CA	1:A:38:GLN:C	1:A:39:CYS:N	17	6.1
(1,33)	1:A:20:TRP:C	1:A:21:LYS:N	1:A:21:LYS:CA	1:A:21:LYS:C	2	6.1
(1,33)	1:A:20:TRP:C	1:A:21:LYS:N	1:A:21:LYS:CA	1:A:21:LYS:C	5	6.1
(1,154)	1:A:111:SER:N	1:A:111:SER:CA	1:A:111:SER:C	1:A:112:ASP:N	15	6.1
(1,114)	1:A:85:CYS:N	1:A:85:CYS:CA	1:A:85:CYS:C	1:A:86:SER:N	16	6.1
(1,64)	1:A:49:ILE:N	1:A:49:ILE:CA	1:A:49:ILE:C	1:A:50:SER:N	3	6.0
(1,161)	1:A:116:GLU:C	1:A:117:LEU:N	1:A:117:LEU:CA	1:A:117:LEU:C	16	6.0
(1,159)	1:A:115:ASP:C	1:A:116:GLU:N	1:A:116:GLU:CA	1:A:116:GLU:C	5	6.0
(1,144)	1:A:103:VAL:N	1:A:103:VAL:CA	1:A:103:VAL:C	1:A:104:CYS:N	14	6.0
(1,125)	1:A:93:SER:C	1:A:94:SER:N	1:A:94:SER:CA	1:A:94:SER:C	15	6.0
(1,100)	1:A:72:ASP:N	1:A:72:ASP:CA	1:A:72:ASP:C	1:A:73:SER:N	11	6.0

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,100)	1:A:72:ASP:N	1:A:72:ASP:CA	1:A:72:ASP:C	1:A:73:SER:N	15	6.0
(1,56)	1:A:38:GLN:N	1:A:38:GLN:CA	1:A:38:GLN:C	1:A:39:CYS:N	13	5.9
(1,23)	1:A:14:GLN:C	1:A:15:CYS:N	1:A:15:CYS:CA	1:A:15:CYS:C	11	5.9
(1,159)	1:A:115:ASP:C	1:A:116:GLU:N	1:A:116:GLU:CA	1:A:116:GLU:C	6	5.9
(1,149)	1:A:107:GLN:C	1:A:108:ASP:N	1:A:108:ASP:CA	1:A:108:ASP:C	5	5.9
(1,101)	1:A:74:GLY:C	1:A:75:GLU:N	1:A:75:GLU:CA	1:A:75:GLU:C	14	5.9
(1,95)	1:A:68:GLU:C	1:A:69:ASN:N	1:A:69:ASN:CA	1:A:69:ASN:C	15	5.8
(1,93)	1:A:67:GLY:C	1:A:68:GLU:N	1:A:68:GLU:CA	1:A:68:GLU:C	12	5.8
(1,58)	1:A:39:CYS:N	1:A:39:CYS:CA	1:A:39:CYS:C	1:A:40:HIS:N	6	5.8
(1,105)	1:A:76:ASP:C	1:A:77:GLU:N	1:A:77:GLU:CA	1:A:77:GLU:C	1	5.8
(1,100)	1:A:72:ASP:N	1:A:72:ASP:CA	1:A:72:ASP:C	1:A:73:SER:N	3	5.8
(1,93)	1:A:67:GLY:C	1:A:68:GLU:N	1:A:68:GLU:CA	1:A:68:GLU:C	14	5.7
(1,33)	1:A:20:TRP:C	1:A:21:LYS:N	1:A:21:LYS:CA	1:A:21:LYS:C	11	5.7
(1,109)	1:A:82:ASN:C	1:A:83:ILE:N	1:A:83:ILE:CA	1:A:83:ILE:C	7	5.7
(1,107)	1:A:77:GLU:C	1:A:78:GLU:N	1:A:78:GLU:CA	1:A:78:GLU:C	4	5.7
(1,105)	1:A:76:ASP:C	1:A:77:GLU:N	1:A:77:GLU:CA	1:A:77:GLU:C	19	5.7
(1,104)	1:A:76:ASP:N	1:A:76:ASP:CA	1:A:76:ASP:C	1:A:77:GLU:N	5	5.7
(1,100)	1:A:72:ASP:N	1:A:72:ASP:CA	1:A:72:ASP:C	1:A:73:SER:N	9	5.7
(1,100)	1:A:72:ASP:N	1:A:72:ASP:CA	1:A:72:ASP:C	1:A:73:SER:N	13	5.7
(1,93)	1:A:67:GLY:C	1:A:68:GLU:N	1:A:68:GLU:CA	1:A:68:GLU:C	15	5.6
(1,150)	1:A:108:ASP:N	1:A:108:ASP:CA	1:A:108:ASP:C	1:A:109:ASP:N	10	5.6
(1,134)	1:A:98:ILE:N	1:A:98:ILE:CA	1:A:98:ILE:C	1:A:99:SER:N	8	5.6
(1,125)	1:A:93:SER:C	1:A:94:SER:N	1:A:94:SER:CA	1:A:94:SER:C	20	5.6
(1,107)	1:A:77:GLU:C	1:A:78:GLU:N	1:A:78:GLU:CA	1:A:78:GLU:C	11	5.6
(1,74)	1:A:57:GLN:N	1:A:57:GLN:CA	1:A:57:GLN:C	1:A:58:CYS:N	1	5.5
(1,127)	1:A:94:SER:C	1:A:95:GLY:N	1:A:95:GLY:CA	1:A:95:GLY:C	9	5.5
(1,125)	1:A:93:SER:C	1:A:94:SER:N	1:A:94:SER:CA	1:A:94:SER:C	18	5.5
(1,121)	1:A:89:GLU:C	1:A:90:PHE:N	1:A:90:PHE:CA	1:A:90:PHE:C	5	5.5
(1,114)	1:A:85:CYS:N	1:A:85:CYS:CA	1:A:85:CYS:C	1:A:86:SER:N	4	5.5
(1,56)	1:A:38:GLN:N	1:A:38:GLN:CA	1:A:38:GLN:C	1:A:39:CYS:N	16	5.4
(1,125)	1:A:93:SER:C	1:A:94:SER:N	1:A:94:SER:CA	1:A:94:SER:C	11	5.4
(1,101)	1:A:74:GLY:C	1:A:75:GLU:N	1:A:75:GLU:CA	1:A:75:GLU:C	12	5.4
(1,74)	1:A:57:GLN:N	1:A:57:GLN:CA	1:A:57:GLN:C	1:A:58:CYS:N	5	5.3
(1,33)	1:A:20:TRP:C	1:A:21:LYS:N	1:A:21:LYS:CA	1:A:21:LYS:C	1	5.3
(1,33)	1:A:20:TRP:C	1:A:21:LYS:N	1:A:21:LYS:CA	1:A:21:LYS:C	8	5.3
(1,159)	1:A:115:ASP:C	1:A:116:GLU:N	1:A:116:GLU:CA	1:A:116:GLU:C	15	5.3
(1,125)	1:A:93:SER:C	1:A:94:SER:N	1:A:94:SER:CA	1:A:94:SER:C	12	5.3
(1,123)	1:A:92:CYS:C	1:A:93:SER:N	1:A:93:SER:CA	1:A:93:SER:C	20	5.3
(1,109)	1:A:82:ASN:C	1:A:83:ILE:N	1:A:83:ILE:CA	1:A:83:ILE:C	5	5.3
(1,56)	1:A:38:GLN:N	1:A:38:GLN:CA	1:A:38:GLN:C	1:A:39:CYS:N	7	5.2
(1,56)	1:A:38:GLN:N	1:A:38:GLN:CA	1:A:38:GLN:C	1:A:39:CYS:N	8	5.2
(1,30)	1:A:18:SER:N	1:A:18:SER:CA	1:A:18:SER:C	1:A:19:ARG:N	14	5.2
(1,101)	1:A:74:GLY:C	1:A:75:GLU:N	1:A:75:GLU:CA	1:A:75:GLU:C	16	5.2
(1,99)	1:A:71:CYS:C	1:A:72:ASP:N	1:A:72:ASP:CA	1:A:72:ASP:C	17	5.1
(1,93)	1:A:67:GLY:C	1:A:68:GLU:N	1:A:68:GLU:CA	1:A:68:GLU:C	18	5.1
(1,73)	1:A:56:THR:C	1:A:57:GLN:N	1:A:57:GLN:CA	1:A:57:GLN:C	20	5.1
(1,68)	1:A:53:ALA:N	1:A:53:ALA:CA	1:A:53:ALA:C	1:A:54:HIS:N	2	5.1
(1,32)	1:A:19:ARG:N	1:A:19:ARG:CA	1:A:19:ARG:C	1:A:20:TRP:N	15	5.1
(1,159)	1:A:115:ASP:C	1:A:116:GLU:N	1:A:116:GLU:CA	1:A:116:GLU:C	3	5.1
(1,114)	1:A:85:CYS:N	1:A:85:CYS:CA	1:A:85:CYS:C	1:A:86:SER:N	13	5.1
(1,100)	1:A:72:ASP:N	1:A:72:ASP:CA	1:A:72:ASP:C	1:A:73:SER:N	5	5.1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,100)	1:A:72:ASP:N	1:A:72:ASP:CA	1:A:72:ASP:C	1:A:73:SER:N	16	5.1
(1,98)	1:A:71:CYS:N	1:A:71:CYS:CA	1:A:71:CYS:C	1:A:72:ASP:N	5	5.0
(1,93)	1:A:67:GLY:C	1:A:68:GLU:N	1:A:68:GLU:CA	1:A:68:GLU:C	20	5.0
(1,9)	1:A:7:ASP:C	1:A:8:PHE:N	1:A:8:PHE:CA	1:A:8:PHE:C	11	5.0
(1,74)	1:A:57:GLN:N	1:A:57:GLN:CA	1:A:57:GLN:C	1:A:58:CYS:N	13	5.0
(1,56)	1:A:38:GLN:N	1:A:38:GLN:CA	1:A:38:GLN:C	1:A:39:CYS:N	1	5.0
(1,56)	1:A:38:GLN:N	1:A:38:GLN:CA	1:A:38:GLN:C	1:A:39:CYS:N	11	5.0
(1,32)	1:A:19:ARG:N	1:A:19:ARG:CA	1:A:19:ARG:C	1:A:20:TRP:N	14	5.0
(1,162)	1:A:117:LEU:N	1:A:117:LEU:CA	1:A:117:LEU:C	1:A:118:ASP:N	16	5.0
(1,159)	1:A:115:ASP:C	1:A:116:GLU:N	1:A:116:GLU:CA	1:A:116:GLU:C	17	5.0
(1,159)	1:A:115:ASP:C	1:A:116:GLU:N	1:A:116:GLU:CA	1:A:116:GLU:C	19	5.0
(1,108)	1:A:78:GLU:N	1:A:78:GLU:CA	1:A:78:GLU:C	1:A:79:ASN:N	9	5.0
(1,74)	1:A:57:GLN:N	1:A:57:GLN:CA	1:A:57:GLN:C	1:A:58:CYS:N	8	4.9
(1,56)	1:A:38:GLN:N	1:A:38:GLN:CA	1:A:38:GLN:C	1:A:39:CYS:N	4	4.9
(1,121)	1:A:89:GLU:C	1:A:90:PHE:N	1:A:90:PHE:CA	1:A:90:PHE:C	9	4.9
(1,73)	1:A:56:THR:C	1:A:57:GLN:N	1:A:57:GLN:CA	1:A:57:GLN:C	4	4.8
(1,58)	1:A:39:CYS:N	1:A:39:CYS:CA	1:A:39:CYS:C	1:A:40:HIS:N	10	4.8
(1,109)	1:A:82:ASN:C	1:A:83:ILE:N	1:A:83:ILE:CA	1:A:83:ILE:C	17	4.8
(1,107)	1:A:77:GLU:C	1:A:78:GLU:N	1:A:78:GLU:CA	1:A:78:GLU:C	9	4.8
(1,101)	1:A:74:GLY:C	1:A:75:GLU:N	1:A:75:GLU:CA	1:A:75:GLU:C	5	4.8
(1,100)	1:A:72:ASP:N	1:A:72:ASP:CA	1:A:72:ASP:C	1:A:73:SER:N	20	4.8
(1,90)	1:A:66:ASP:N	1:A:66:ASP:CA	1:A:66:ASP:C	1:A:67:GLY:N	15	4.7
(1,58)	1:A:39:CYS:N	1:A:39:CYS:CA	1:A:39:CYS:C	1:A:40:HIS:N	8	4.7
(1,56)	1:A:38:GLN:N	1:A:38:GLN:CA	1:A:38:GLN:C	1:A:39:CYS:N	15	4.7
(1,42)	1:A:27:ASP:N	1:A:27:ASP:CA	1:A:27:ASP:C	1:A:28:CYS:N	8	4.7
(1,158)	1:A:115:ASP:N	1:A:115:ASP:CA	1:A:115:ASP:C	1:A:116:GLU:N	11	4.7
(1,149)	1:A:107:GLN:C	1:A:108:ASP:N	1:A:108:ASP:CA	1:A:108:ASP:C	14	4.7
(1,149)	1:A:107:GLN:C	1:A:108:ASP:N	1:A:108:ASP:CA	1:A:108:ASP:C	19	4.7
(1,149)	1:A:107:GLN:C	1:A:108:ASP:N	1:A:108:ASP:CA	1:A:108:ASP:C	20	4.7
(1,107)	1:A:77:GLU:C	1:A:78:GLU:N	1:A:78:GLU:CA	1:A:78:GLU:C	7	4.7
(1,100)	1:A:72:ASP:N	1:A:72:ASP:CA	1:A:72:ASP:C	1:A:73:SER:N	19	4.7
(1,72)	1:A:55:SER:N	1:A:55:SER:CA	1:A:55:SER:C	1:A:56:THR:N	8	4.6
(1,31)	1:A:18:SER:C	1:A:19:ARG:N	1:A:19:ARG:CA	1:A:19:ARG:C	19	4.6
(1,128)	1:A:95:GLY:N	1:A:95:GLY:CA	1:A:95:GLY:C	1:A:96:ARG:N	18	4.6
(1,108)	1:A:78:GLU:N	1:A:78:GLU:CA	1:A:78:GLU:C	1:A:79:ASN:N	5	4.6
(1,100)	1:A:72:ASP:N	1:A:72:ASP:CA	1:A:72:ASP:C	1:A:73:SER:N	1	4.6
(1,100)	1:A:72:ASP:N	1:A:72:ASP:CA	1:A:72:ASP:C	1:A:73:SER:N	12	4.6
(1,99)	1:A:71:CYS:C	1:A:72:ASP:N	1:A:72:ASP:CA	1:A:72:ASP:C	18	4.5
(1,95)	1:A:68:GLU:C	1:A:69:ASN:N	1:A:69:ASN:CA	1:A:69:ASN:C	14	4.5
(1,74)	1:A:57:GLN:N	1:A:57:GLN:CA	1:A:57:GLN:C	1:A:58:CYS:N	19	4.5
(1,5)	1:A:4:ALA:C	1:A:5:GLU:N	1:A:5:GLU:CA	1:A:5:GLU:C	12	4.5
(1,30)	1:A:18:SER:N	1:A:18:SER:CA	1:A:18:SER:C	1:A:19:ARG:N	4	4.5
(1,182)	1:A:112:ASP:N	1:A:112:ASP:CA	1:A:112:ASP:C	1:A:113:GLY:N	12	4.5
(1,182)	1:A:112:ASP:N	1:A:112:ASP:CA	1:A:112:ASP:C	1:A:113:GLY:N	17	4.5
(1,149)	1:A:107:GLN:C	1:A:108:ASP:N	1:A:108:ASP:CA	1:A:108:ASP:C	11	4.5
(1,143)	1:A:102:PHE:C	1:A:103:VAL:N	1:A:103:VAL:CA	1:A:103:VAL:C	9	4.5
(1,143)	1:A:102:PHE:C	1:A:103:VAL:N	1:A:103:VAL:CA	1:A:103:VAL:C	17	4.5
(1,134)	1:A:98:ILE:N	1:A:98:ILE:CA	1:A:98:ILE:C	1:A:99:SER:N	3	4.5
(1,101)	1:A:74:GLY:C	1:A:75:GLU:N	1:A:75:GLU:CA	1:A:75:GLU:C	11	4.5
(1,26)	1:A:16:VAL:N	1:A:16:VAL:CA	1:A:16:VAL:C	1:A:17:PRO:N	12	4.4
(1,23)	1:A:14:GLN:C	1:A:15:CYS:N	1:A:15:CYS:CA	1:A:15:CYS:C	19	4.4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,159)	1:A:115:ASP:C	1:A:116:GLU:N	1:A:116:GLU:CA	1:A:116:GLU:C	13	4.4
(1,114)	1:A:85:CYS:N	1:A:85:CYS:CA	1:A:85:CYS:C	1:A:86:SER:N	11	4.4
(1,114)	1:A:85:CYS:N	1:A:85:CYS:CA	1:A:85:CYS:C	1:A:86:SER:N	20	4.4
(1,106)	1:A:77:GLU:N	1:A:77:GLU:CA	1:A:77:GLU:C	1:A:78:GLU:N	13	4.4
(1,104)	1:A:76:ASP:N	1:A:76:ASP:CA	1:A:76:ASP:C	1:A:77:GLU:N	7	4.4
(1,56)	1:A:38:GLN:N	1:A:38:GLN:CA	1:A:38:GLN:C	1:A:39:CYS:N	5	4.3
(1,31)	1:A:18:SER:C	1:A:19:ARG:N	1:A:19:ARG:CA	1:A:19:ARG:C	16	4.3
(1,143)	1:A:102:PHE:C	1:A:103:VAL:N	1:A:103:VAL:CA	1:A:103:VAL:C	6	4.3
(1,134)	1:A:98:ILE:N	1:A:98:ILE:CA	1:A:98:ILE:C	1:A:99:SER:N	4	4.3
(1,114)	1:A:85:CYS:N	1:A:85:CYS:CA	1:A:85:CYS:C	1:A:86:SER:N	8	4.3
(1,109)	1:A:82:ASN:C	1:A:83:ILE:N	1:A:83:ILE:CA	1:A:83:ILE:C	18	4.3
(1,99)	1:A:71:CYS:C	1:A:72:ASP:N	1:A:72:ASP:CA	1:A:72:ASP:C	4	4.2
(1,99)	1:A:71:CYS:C	1:A:72:ASP:N	1:A:72:ASP:CA	1:A:72:ASP:C	5	4.2
(1,99)	1:A:71:CYS:C	1:A:72:ASP:N	1:A:72:ASP:CA	1:A:72:ASP:C	14	4.2
(1,8)	1:A:6:SER:N	1:A:6:SER:CA	1:A:6:SER:C	1:A:7:ASP:N	12	4.2
(1,50)	1:A:35:SER:N	1:A:35:SER:CA	1:A:35:SER:C	1:A:36:PRO:N	5	4.2
(1,143)	1:A:102:PHE:C	1:A:103:VAL:N	1:A:103:VAL:CA	1:A:103:VAL:C	2	4.2
(1,134)	1:A:98:ILE:N	1:A:98:ILE:CA	1:A:98:ILE:C	1:A:99:SER:N	6	4.2
(1,109)	1:A:82:ASN:C	1:A:83:ILE:N	1:A:83:ILE:CA	1:A:83:ILE:C	11	4.2
(1,105)	1:A:76:ASP:C	1:A:77:GLU:N	1:A:77:GLU:CA	1:A:77:GLU:C	7	4.2
(1,103)	1:A:75:GLU:C	1:A:76:ASP:N	1:A:76:ASP:CA	1:A:76:ASP:C	4	4.2
(1,101)	1:A:74:GLY:C	1:A:75:GLU:N	1:A:75:GLU:CA	1:A:75:GLU:C	3	4.2
(1,159)	1:A:115:ASP:C	1:A:116:GLU:N	1:A:116:GLU:CA	1:A:116:GLU:C	1	4.1
(1,159)	1:A:115:ASP:C	1:A:116:GLU:N	1:A:116:GLU:CA	1:A:116:GLU:C	12	4.1
(1,149)	1:A:107:GLN:C	1:A:108:ASP:N	1:A:108:ASP:CA	1:A:108:ASP:C	15	4.1
(1,143)	1:A:102:PHE:C	1:A:103:VAL:N	1:A:103:VAL:CA	1:A:103:VAL:C	7	4.1
(1,120)	1:A:89:GLU:N	1:A:89:GLU:CA	1:A:89:GLU:C	1:A:90:PHE:N	9	4.1
(1,114)	1:A:85:CYS:N	1:A:85:CYS:CA	1:A:85:CYS:C	1:A:86:SER:N	3	4.1
(1,114)	1:A:85:CYS:N	1:A:85:CYS:CA	1:A:85:CYS:C	1:A:86:SER:N	10	4.1
(1,109)	1:A:82:ASN:C	1:A:83:ILE:N	1:A:83:ILE:CA	1:A:83:ILE:C	4	4.1
(1,104)	1:A:76:ASP:N	1:A:76:ASP:CA	1:A:76:ASP:C	1:A:77:GLU:N	20	4.1
(1,64)	1:A:49:ILE:N	1:A:49:ILE:CA	1:A:49:ILE:C	1:A:50:SER:N	17	4.0
(1,31)	1:A:18:SER:C	1:A:19:ARG:N	1:A:19:ARG:CA	1:A:19:ARG:C	5	4.0
(1,159)	1:A:115:ASP:C	1:A:116:GLU:N	1:A:116:GLU:CA	1:A:116:GLU:C	4	4.0
(1,159)	1:A:115:ASP:C	1:A:116:GLU:N	1:A:116:GLU:CA	1:A:116:GLU:C	7	4.0
(1,109)	1:A:82:ASN:C	1:A:83:ILE:N	1:A:83:ILE:CA	1:A:83:ILE:C	3	4.0
(1,109)	1:A:82:ASN:C	1:A:83:ILE:N	1:A:83:ILE:CA	1:A:83:ILE:C	19	4.0
(1,98)	1:A:71:CYS:N	1:A:71:CYS:CA	1:A:71:CYS:C	1:A:72:ASP:N	11	3.9
(1,9)	1:A:7:ASP:C	1:A:8:PHE:N	1:A:8:PHE:CA	1:A:8:PHE:C	16	3.9
(1,80)	1:A:60:PRO:N	1:A:60:PRO:CA	1:A:60:PRO:C	1:A:61:VAL:N	5	3.9
(1,8)	1:A:6:SER:N	1:A:6:SER:CA	1:A:6:SER:C	1:A:7:ASP:N	4	3.9
(1,64)	1:A:49:ILE:N	1:A:49:ILE:CA	1:A:49:ILE:C	1:A:50:SER:N	16	3.9
(1,56)	1:A:38:GLN:N	1:A:38:GLN:CA	1:A:38:GLN:C	1:A:39:CYS:N	6	3.9
(1,56)	1:A:38:GLN:N	1:A:38:GLN:CA	1:A:38:GLN:C	1:A:39:CYS:N	10	3.9
(1,56)	1:A:38:GLN:N	1:A:38:GLN:CA	1:A:38:GLN:C	1:A:39:CYS:N	12	3.9
(1,50)	1:A:35:SER:N	1:A:35:SER:CA	1:A:35:SER:C	1:A:36:PRO:N	17	3.9
(1,5)	1:A:4:ALA:C	1:A:5:GLU:N	1:A:5:GLU:CA	1:A:5:GLU:C	14	3.9
(1,154)	1:A:111:SER:N	1:A:111:SER:CA	1:A:111:SER:C	1:A:112:ASP:N	20	3.9
(1,153)	1:A:110:CYS:C	1:A:111:SER:N	1:A:111:SER:CA	1:A:111:SER:C	18	3.9
(1,144)	1:A:103:VAL:N	1:A:103:VAL:CA	1:A:103:VAL:C	1:A:104:CYS:N	13	3.9
(1,134)	1:A:98:ILE:N	1:A:98:ILE:CA	1:A:98:ILE:C	1:A:99:SER:N	1	3.9

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,107)	1:A:77:GLU:C	1:A:78:GLU:N	1:A:78:GLU:CA	1:A:78:GLU:C	1	3.9
(1,100)	1:A:72:ASP:N	1:A:72:ASP:CA	1:A:72:ASP:C	1:A:73:SER:N	14	3.9
(1,74)	1:A:57:GLN:N	1:A:57:GLN:CA	1:A:57:GLN:C	1:A:58:CYS:N	11	3.8
(1,73)	1:A:56:THR:C	1:A:57:GLN:N	1:A:57:GLN:CA	1:A:57:GLN:C	15	3.8
(1,64)	1:A:49:ILE:N	1:A:49:ILE:CA	1:A:49:ILE:C	1:A:50:SER:N	6	3.8
(1,58)	1:A:39:CYS:N	1:A:39:CYS:CA	1:A:39:CYS:C	1:A:40:HIS:N	14	3.8
(1,49)	1:A:34:GLU:C	1:A:35:SER:N	1:A:35:SER:CA	1:A:35:SER:C	3	3.8
(1,35)	1:A:21:LYS:C	1:A:22:CYS:N	1:A:22:CYS:CA	1:A:22:CYS:C	19	3.8
(1,30)	1:A:18:SER:N	1:A:18:SER:CA	1:A:18:SER:C	1:A:19:ARG:N	15	3.8
(1,26)	1:A:16:VAL:N	1:A:16:VAL:CA	1:A:16:VAL:C	1:A:17:PRO:N	20	3.8
(1,149)	1:A:107:GLN:C	1:A:108:ASP:N	1:A:108:ASP:CA	1:A:108:ASP:C	4	3.8
(1,143)	1:A:102:PHE:C	1:A:103:VAL:N	1:A:103:VAL:CA	1:A:103:VAL:C	4	3.8
(1,143)	1:A:102:PHE:C	1:A:103:VAL:N	1:A:103:VAL:CA	1:A:103:VAL:C	16	3.8
(1,136)	1:A:99:SER:N	1:A:99:SER:CA	1:A:99:SER:C	1:A:100:ARG:N	20	3.8
(1,107)	1:A:77:GLU:C	1:A:78:GLU:N	1:A:78:GLU:CA	1:A:78:GLU:C	5	3.8
(1,99)	1:A:71:CYS:C	1:A:72:ASP:N	1:A:72:ASP:CA	1:A:72:ASP:C	9	3.7
(1,92)	1:A:67:GLY:N	1:A:67:GLY:CA	1:A:67:GLY:C	1:A:68:GLU:N	15	3.7
(1,9)	1:A:7:ASP:C	1:A:8:PHE:N	1:A:8:PHE:CA	1:A:8:PHE:C	6	3.7
(1,50)	1:A:35:SER:N	1:A:35:SER:CA	1:A:35:SER:C	1:A:36:PRO:N	6	3.7
(1,44)	1:A:29:GLU:N	1:A:29:GLU:CA	1:A:29:GLU:C	1:A:30:ASP:N	12	3.7
(1,26)	1:A:16:VAL:N	1:A:16:VAL:CA	1:A:16:VAL:C	1:A:17:PRO:N	18	3.7
(1,122)	1:A:90:PHE:N	1:A:90:PHE:CA	1:A:90:PHE:C	1:A:91:THR:N	8	3.7
(1,98)	1:A:71:CYS:N	1:A:71:CYS:CA	1:A:71:CYS:C	1:A:72:ASP:N	3	3.6
(1,88)	1:A:65:CYS:N	1:A:65:CYS:CA	1:A:65:CYS:C	1:A:66:ASP:N	8	3.6
(1,80)	1:A:60:PRO:N	1:A:60:PRO:CA	1:A:60:PRO:C	1:A:61:VAL:N	9	3.6
(1,65)	1:A:49:ILE:C	1:A:50:SER:N	1:A:50:SER:CA	1:A:50:SER:C	18	3.6
(1,56)	1:A:38:GLN:N	1:A:38:GLN:CA	1:A:38:GLN:C	1:A:39:CYS:N	9	3.6
(1,50)	1:A:35:SER:N	1:A:35:SER:CA	1:A:35:SER:C	1:A:36:PRO:N	13	3.6
(1,30)	1:A:18:SER:N	1:A:18:SER:CA	1:A:18:SER:C	1:A:19:ARG:N	5	3.6
(1,154)	1:A:111:SER:N	1:A:111:SER:CA	1:A:111:SER:C	1:A:112:ASP:N	13	3.6
(1,144)	1:A:103:VAL:N	1:A:103:VAL:CA	1:A:103:VAL:C	1:A:104:CYS:N	15	3.6
(1,134)	1:A:98:ILE:N	1:A:98:ILE:CA	1:A:98:ILE:C	1:A:99:SER:N	7	3.6
(1,109)	1:A:82:ASN:C	1:A:83:ILE:N	1:A:83:ILE:CA	1:A:83:ILE:C	15	3.6
(1,106)	1:A:77:GLU:N	1:A:77:GLU:CA	1:A:77:GLU:C	1:A:78:GLU:N	2	3.6
(1,102)	1:A:75:GLU:N	1:A:75:GLU:CA	1:A:75:GLU:C	1:A:76:ASP:N	10	3.6
(1,10)	1:A:8:PHE:N	1:A:8:PHE:CA	1:A:8:PHE:C	1:A:9:VAL:N	4	3.6
(1,64)	1:A:49:ILE:N	1:A:49:ILE:CA	1:A:49:ILE:C	1:A:50:SER:N	9	3.5
(1,56)	1:A:38:GLN:N	1:A:38:GLN:CA	1:A:38:GLN:C	1:A:39:CYS:N	2	3.5
(1,35)	1:A:21:LYS:C	1:A:22:CYS:N	1:A:22:CYS:CA	1:A:22:CYS:C	2	3.5
(1,127)	1:A:94:SER:C	1:A:95:GLY:N	1:A:95:GLY:CA	1:A:95:GLY:C	14	3.5
(1,98)	1:A:71:CYS:N	1:A:71:CYS:CA	1:A:71:CYS:C	1:A:72:ASP:N	9	3.4
(1,9)	1:A:7:ASP:C	1:A:8:PHE:N	1:A:8:PHE:CA	1:A:8:PHE:C	10	3.4
(1,77)	1:A:58:CYS:C	1:A:59:ILE:N	1:A:59:ILE:CA	1:A:59:ILE:C	10	3.4
(1,56)	1:A:38:GLN:N	1:A:38:GLN:CA	1:A:38:GLN:C	1:A:39:CYS:N	18	3.4
(1,50)	1:A:35:SER:N	1:A:35:SER:CA	1:A:35:SER:C	1:A:36:PRO:N	20	3.4
(1,5)	1:A:4:ALA:C	1:A:5:GLU:N	1:A:5:GLU:CA	1:A:5:GLU:C	9	3.4
(1,182)	1:A:112:ASP:N	1:A:112:ASP:CA	1:A:112:ASP:C	1:A:113:GLY:N	20	3.4
(1,154)	1:A:111:SER:N	1:A:111:SER:CA	1:A:111:SER:C	1:A:112:ASP:N	11	3.4
(1,154)	1:A:111:SER:N	1:A:111:SER:CA	1:A:111:SER:C	1:A:112:ASP:N	12	3.4
(1,122)	1:A:90:PHE:N	1:A:90:PHE:CA	1:A:90:PHE:C	1:A:91:THR:N	10	3.4
(1,107)	1:A:77:GLU:C	1:A:78:GLU:N	1:A:78:GLU:CA	1:A:78:GLU:C	3	3.4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,101)	1:A:74:GLY:C	1:A:75:GLU:N	1:A:75:GLU:CA	1:A:75:GLU:C	10	3.4
(1,79)	1:A:59:ILE:C	1:A:60:PRO:N	1:A:60:PRO:CA	1:A:60:PRO:C	8	3.3
(1,50)	1:A:35:SER:N	1:A:35:SER:CA	1:A:35:SER:C	1:A:36:PRO:N	16	3.3
(1,161)	1:A:116:GLU:C	1:A:117:LEU:N	1:A:117:LEU:CA	1:A:117:LEU:C	6	3.3
(1,147)	1:A:106:GLY:C	1:A:107:GLN:N	1:A:107:GLN:CA	1:A:107:GLN:C	9	3.3
(1,130)	1:A:96:ARG:N	1:A:96:ARG:CA	1:A:96:ARG:C	1:A:97:CYS:N	10	3.3
(1,114)	1:A:85:CYS:N	1:A:85:CYS:CA	1:A:85:CYS:C	1:A:86:SER:N	14	3.3
(1,109)	1:A:82:ASN:C	1:A:83:ILE:N	1:A:83:ILE:CA	1:A:83:ILE:C	13	3.3
(1,104)	1:A:76:ASP:N	1:A:76:ASP:CA	1:A:76:ASP:C	1:A:77:GLU:N	19	3.3
(1,101)	1:A:74:GLY:C	1:A:75:GLU:N	1:A:75:GLU:CA	1:A:75:GLU:C	19	3.3
(1,80)	1:A:60:PRO:N	1:A:60:PRO:CA	1:A:60:PRO:C	1:A:61:VAL:N	17	3.2
(1,5)	1:A:4:ALA:C	1:A:5:GLU:N	1:A:5:GLU:CA	1:A:5:GLU:C	11	3.2
(1,26)	1:A:16:VAL:N	1:A:16:VAL:CA	1:A:16:VAL:C	1:A:17:PRO:N	3	3.2
(1,23)	1:A:14:GLN:C	1:A:15:CYS:N	1:A:15:CYS:CA	1:A:15:CYS:C	2	3.2
(1,159)	1:A:115:ASP:C	1:A:116:GLU:N	1:A:116:GLU:CA	1:A:116:GLU:C	11	3.2
(1,159)	1:A:115:ASP:C	1:A:116:GLU:N	1:A:116:GLU:CA	1:A:116:GLU:C	20	3.2
(1,138)	1:A:100:ARG:N	1:A:100:ARG:CA	1:A:100:ARG:C	1:A:101:ASN:N	17	3.2
(1,124)	1:A:93:SER:N	1:A:93:SER:CA	1:A:93:SER:C	1:A:94:SER:N	18	3.2
(1,107)	1:A:77:GLU:C	1:A:78:GLU:N	1:A:78:GLU:CA	1:A:78:GLU:C	19	3.2
(1,99)	1:A:71:CYS:C	1:A:72:ASP:N	1:A:72:ASP:CA	1:A:72:ASP:C	1	3.1
(1,99)	1:A:71:CYS:C	1:A:72:ASP:N	1:A:72:ASP:CA	1:A:72:ASP:C	16	3.1
(1,9)	1:A:7:ASP:C	1:A:8:PHE:N	1:A:8:PHE:CA	1:A:8:PHE:C	12	3.1
(1,81)	1:A:60:PRO:C	1:A:61:VAL:N	1:A:61:VAL:CA	1:A:61:VAL:C	17	3.1
(1,74)	1:A:57:GLN:N	1:A:57:GLN:CA	1:A:57:GLN:C	1:A:58:CYS:N	16	3.1
(1,56)	1:A:38:GLN:N	1:A:38:GLN:CA	1:A:38:GLN:C	1:A:39:CYS:N	14	3.1
(1,50)	1:A:35:SER:N	1:A:35:SER:CA	1:A:35:SER:C	1:A:36:PRO:N	1	3.1
(1,30)	1:A:18:SER:N	1:A:18:SER:CA	1:A:18:SER:C	1:A:19:ARG:N	1	3.1
(1,182)	1:A:112:ASP:N	1:A:112:ASP:CA	1:A:112:ASP:C	1:A:113:GLY:N	13	3.1
(1,150)	1:A:108:ASP:N	1:A:108:ASP:CA	1:A:108:ASP:C	1:A:109:ASP:N	12	3.1
(1,149)	1:A:107:GLN:C	1:A:108:ASP:N	1:A:108:ASP:CA	1:A:108:ASP:C	13	3.1
(1,147)	1:A:106:GLY:C	1:A:107:GLN:N	1:A:107:GLN:CA	1:A:107:GLN:C	4	3.1
(1,138)	1:A:100:ARG:N	1:A:100:ARG:CA	1:A:100:ARG:C	1:A:101:ASN:N	5	3.1
(1,124)	1:A:93:SER:N	1:A:93:SER:CA	1:A:93:SER:C	1:A:94:SER:N	13	3.1
(1,122)	1:A:90:PHE:N	1:A:90:PHE:CA	1:A:90:PHE:C	1:A:91:THR:N	7	3.1
(1,109)	1:A:82:ASN:C	1:A:83:ILE:N	1:A:83:ILE:CA	1:A:83:ILE:C	12	3.1
(1,100)	1:A:72:ASP:N	1:A:72:ASP:CA	1:A:72:ASP:C	1:A:73:SER:N	4	3.1
(1,9)	1:A:7:ASP:C	1:A:8:PHE:N	1:A:8:PHE:CA	1:A:8:PHE:C	7	3.0
(1,80)	1:A:60:PRO:N	1:A:60:PRO:CA	1:A:60:PRO:C	1:A:61:VAL:N	2	3.0
(1,44)	1:A:29:GLU:N	1:A:29:GLU:CA	1:A:29:GLU:C	1:A:30:ASP:N	13	3.0
(1,42)	1:A:27:ASP:N	1:A:27:ASP:CA	1:A:27:ASP:C	1:A:28:CYS:N	6	3.0
(1,23)	1:A:14:GLN:C	1:A:15:CYS:N	1:A:15:CYS:CA	1:A:15:CYS:C	7	3.0
(1,150)	1:A:108:ASP:N	1:A:108:ASP:CA	1:A:108:ASP:C	1:A:109:ASP:N	18	3.0
(1,107)	1:A:77:GLU:C	1:A:78:GLU:N	1:A:78:GLU:CA	1:A:78:GLU:C	18	3.0
(1,101)	1:A:74:GLY:C	1:A:75:GLU:N	1:A:75:GLU:CA	1:A:75:GLU:C	7	3.0
(1,101)	1:A:74:GLY:C	1:A:75:GLU:N	1:A:75:GLU:CA	1:A:75:GLU:C	15	3.0
(1,74)	1:A:57:GLN:N	1:A:57:GLN:CA	1:A:57:GLN:C	1:A:58:CYS:N	9	2.9
(1,58)	1:A:39:CYS:N	1:A:39:CYS:CA	1:A:39:CYS:C	1:A:40:HIS:N	2	2.9
(1,55)	1:A:37:GLU:C	1:A:38:GLN:N	1:A:38:GLN:CA	1:A:38:GLN:C	19	2.9
(1,49)	1:A:34:GLU:C	1:A:35:SER:N	1:A:35:SER:CA	1:A:35:SER:C	13	2.9
(1,30)	1:A:18:SER:N	1:A:18:SER:CA	1:A:18:SER:C	1:A:19:ARG:N	12	2.9
(1,147)	1:A:106:GLY:C	1:A:107:GLN:N	1:A:107:GLN:CA	1:A:107:GLN:C	7	2.9

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,120)	1:A:89:GLU:N	1:A:89:GLU:CA	1:A:89:GLU:C	1:A:90:PHE:N	5	2.9
(1,98)	1:A:71:CYS:N	1:A:71:CYS:CA	1:A:71:CYS:C	1:A:72:ASP:N	16	2.8
(1,95)	1:A:68:GLU:C	1:A:69:ASN:N	1:A:69:ASN:CA	1:A:69:ASN:C	18	2.8
(1,70)	1:A:54:HIS:N	1:A:54:HIS:CA	1:A:54:HIS:C	1:A:55:SER:N	2	2.8
(1,64)	1:A:49:ILE:N	1:A:49:ILE:CA	1:A:49:ILE:C	1:A:50:SER:N	1	2.8
(1,49)	1:A:34:GLU:C	1:A:35:SER:N	1:A:35:SER:CA	1:A:35:SER:C	9	2.8
(1,35)	1:A:21:LYS:C	1:A:22:CYS:N	1:A:22:CYS:CA	1:A:22:CYS:C	1	2.8
(1,35)	1:A:21:LYS:C	1:A:22:CYS:N	1:A:22:CYS:CA	1:A:22:CYS:C	11	2.8
(1,23)	1:A:14:GLN:C	1:A:15:CYS:N	1:A:15:CYS:CA	1:A:15:CYS:C	12	2.8
(1,23)	1:A:14:GLN:C	1:A:15:CYS:N	1:A:15:CYS:CA	1:A:15:CYS:C	16	2.8
(1,107)	1:A:77:GLU:C	1:A:78:GLU:N	1:A:78:GLU:CA	1:A:78:GLU:C	14	2.8
(1,107)	1:A:77:GLU:C	1:A:78:GLU:N	1:A:78:GLU:CA	1:A:78:GLU:C	15	2.8
(1,100)	1:A:72:ASP:N	1:A:72:ASP:CA	1:A:72:ASP:C	1:A:73:SER:N	18	2.8
(1,99)	1:A:71:CYS:C	1:A:72:ASP:N	1:A:72:ASP:CA	1:A:72:ASP:C	3	2.7
(1,99)	1:A:71:CYS:C	1:A:72:ASP:N	1:A:72:ASP:CA	1:A:72:ASP:C	7	2.7
(1,50)	1:A:35:SER:N	1:A:35:SER:CA	1:A:35:SER:C	1:A:36:PRO:N	9	2.7
(1,5)	1:A:4:ALA:C	1:A:5:GLU:N	1:A:5:GLU:CA	1:A:5:GLU:C	6	2.7
(1,4)	1:A:3:CYS:N	1:A:3:CYS:CA	1:A:3:CYS:C	1:A:4:ALA:N	20	2.7
(1,35)	1:A:21:LYS:C	1:A:22:CYS:N	1:A:22:CYS:CA	1:A:22:CYS:C	17	2.7
(1,30)	1:A:18:SER:N	1:A:18:SER:CA	1:A:18:SER:C	1:A:19:ARG:N	8	2.7
(1,128)	1:A:95:GLY:N	1:A:95:GLY:CA	1:A:95:GLY:C	1:A:96:ARG:N	14	2.7
(1,122)	1:A:90:PHE:N	1:A:90:PHE:CA	1:A:90:PHE:C	1:A:91:THR:N	5	2.7
(1,114)	1:A:85:CYS:N	1:A:85:CYS:CA	1:A:85:CYS:C	1:A:86:SER:N	5	2.7
(1,109)	1:A:82:ASN:C	1:A:83:ILE:N	1:A:83:ILE:CA	1:A:83:ILE:C	14	2.7
(1,101)	1:A:74:GLY:C	1:A:75:GLU:N	1:A:75:GLU:CA	1:A:75:GLU:C	17	2.7
(1,100)	1:A:72:ASP:N	1:A:72:ASP:CA	1:A:72:ASP:C	1:A:73:SER:N	17	2.7
(1,99)	1:A:71:CYS:C	1:A:72:ASP:N	1:A:72:ASP:CA	1:A:72:ASP:C	11	2.6
(1,91)	1:A:66:ASP:C	1:A:67:GLY:N	1:A:67:GLY:CA	1:A:67:GLY:C	18	2.6
(1,80)	1:A:60:PRO:N	1:A:60:PRO:CA	1:A:60:PRO:C	1:A:61:VAL:N	11	2.6
(1,74)	1:A:57:GLN:N	1:A:57:GLN:CA	1:A:57:GLN:C	1:A:58:CYS:N	3	2.6
(1,68)	1:A:53:ALA:N	1:A:53:ALA:CA	1:A:53:ALA:C	1:A:54:HIS:N	17	2.6
(1,26)	1:A:16:VAL:N	1:A:16:VAL:CA	1:A:16:VAL:C	1:A:17:PRO:N	17	2.6
(1,16)	1:A:11:ASN:N	1:A:11:ASN:CA	1:A:11:ASN:C	1:A:12:ASN:N	5	2.6
(1,114)	1:A:85:CYS:N	1:A:85:CYS:CA	1:A:85:CYS:C	1:A:86:SER:N	12	2.6
(1,109)	1:A:82:ASN:C	1:A:83:ILE:N	1:A:83:ILE:CA	1:A:83:ILE:C	2	2.6
(1,10)	1:A:8:PHE:N	1:A:8:PHE:CA	1:A:8:PHE:C	1:A:9:VAL:N	12	2.6
(1,90)	1:A:66:ASP:N	1:A:66:ASP:CA	1:A:66:ASP:C	1:A:67:GLY:N	12	2.5
(1,55)	1:A:37:GLU:C	1:A:38:GLN:N	1:A:38:GLN:CA	1:A:38:GLN:C	6	2.5
(1,49)	1:A:34:GLU:C	1:A:35:SER:N	1:A:35:SER:CA	1:A:35:SER:C	2	2.5
(1,49)	1:A:34:GLU:C	1:A:35:SER:N	1:A:35:SER:CA	1:A:35:SER:C	7	2.5
(1,35)	1:A:21:LYS:C	1:A:22:CYS:N	1:A:22:CYS:CA	1:A:22:CYS:C	16	2.5
(1,31)	1:A:18:SER:C	1:A:19:ARG:N	1:A:19:ARG:CA	1:A:19:ARG:C	7	2.5
(1,23)	1:A:14:GLN:C	1:A:15:CYS:N	1:A:15:CYS:CA	1:A:15:CYS:C	15	2.5
(1,23)	1:A:14:GLN:C	1:A:15:CYS:N	1:A:15:CYS:CA	1:A:15:CYS:C	20	2.5
(1,159)	1:A:115:ASP:C	1:A:116:GLU:N	1:A:116:GLU:CA	1:A:116:GLU:C	2	2.5
(1,144)	1:A:103:VAL:N	1:A:103:VAL:CA	1:A:103:VAL:C	1:A:104:CYS:N	9	2.5
(1,138)	1:A:100:ARG:N	1:A:100:ARG:CA	1:A:100:ARG:C	1:A:101:ASN:N	12	2.5
(1,114)	1:A:85:CYS:N	1:A:85:CYS:CA	1:A:85:CYS:C	1:A:86:SER:N	17	2.5
(1,26)	1:A:16:VAL:N	1:A:16:VAL:CA	1:A:16:VAL:C	1:A:17:PRO:N	14	2.4
(1,23)	1:A:14:GLN:C	1:A:15:CYS:N	1:A:15:CYS:CA	1:A:15:CYS:C	4	2.4
(1,182)	1:A:112:ASP:N	1:A:112:ASP:CA	1:A:112:ASP:C	1:A:113:GLY:N	14	2.4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,159)	1:A:115:ASP:C	1:A:116:GLU:N	1:A:116:GLU:CA	1:A:116:GLU:C	8	2.4
(1,114)	1:A:85:CYS:N	1:A:85:CYS:CA	1:A:85:CYS:C	1:A:86:SER:N	19	2.4
(1,109)	1:A:82:ASN:C	1:A:83:ILE:N	1:A:83:ILE:CA	1:A:83:ILE:C	6	2.4
(1,108)	1:A:78:GLU:N	1:A:78:GLU:CA	1:A:78:GLU:C	1:A:79:ASN:N	10	2.4
(1,103)	1:A:75:GLU:C	1:A:76:ASP:N	1:A:76:ASP:CA	1:A:76:ASP:C	2	2.4
(1,9)	1:A:7:ASP:C	1:A:8:PHE:N	1:A:8:PHE:CA	1:A:8:PHE:C	9	2.3
(1,7)	1:A:5:GLU:C	1:A:6:SER:N	1:A:6:SER:CA	1:A:6:SER:C	15	2.3
(1,64)	1:A:49:ILE:N	1:A:49:ILE:CA	1:A:49:ILE:C	1:A:50:SER:N	19	2.3
(1,50)	1:A:35:SER:N	1:A:35:SER:CA	1:A:35:SER:C	1:A:36:PRO:N	3	2.3
(1,44)	1:A:29:GLU:N	1:A:29:GLU:CA	1:A:29:GLU:C	1:A:30:ASP:N	20	2.3
(1,42)	1:A:27:ASP:N	1:A:27:ASP:CA	1:A:27:ASP:C	1:A:28:CYS:N	16	2.3
(1,4)	1:A:3:CYS:N	1:A:3:CYS:CA	1:A:3:CYS:C	1:A:4:ALA:N	17	2.3
(1,138)	1:A:100:ARG:N	1:A:100:ARG:CA	1:A:100:ARG:C	1:A:101:ASN:N	8	2.3
(1,127)	1:A:94:SER:C	1:A:95:GLY:N	1:A:95:GLY:CA	1:A:95:GLY:C	10	2.3
(1,109)	1:A:82:ASN:C	1:A:83:ILE:N	1:A:83:ILE:CA	1:A:83:ILE:C	20	2.3
(1,103)	1:A:75:GLU:C	1:A:76:ASP:N	1:A:76:ASP:CA	1:A:76:ASP:C	14	2.3
(1,98)	1:A:71:CYS:N	1:A:71:CYS:CA	1:A:71:CYS:C	1:A:72:ASP:N	1	2.2
(1,88)	1:A:65:CYS:N	1:A:65:CYS:CA	1:A:65:CYS:C	1:A:66:ASP:N	10	2.2
(1,81)	1:A:60:PRO:C	1:A:61:VAL:N	1:A:61:VAL:CA	1:A:61:VAL:C	1	2.2
(1,80)	1:A:60:PRO:N	1:A:60:PRO:CA	1:A:60:PRO:C	1:A:61:VAL:N	20	2.2
(1,64)	1:A:49:ILE:N	1:A:49:ILE:CA	1:A:49:ILE:C	1:A:50:SER:N	20	2.2
(1,5)	1:A:4:ALA:C	1:A:5:GLU:N	1:A:5:GLU:CA	1:A:5:GLU:C	4	2.2
(1,26)	1:A:16:VAL:N	1:A:16:VAL:CA	1:A:16:VAL:C	1:A:17:PRO:N	4	2.2
(1,159)	1:A:115:ASP:C	1:A:116:GLU:N	1:A:116:GLU:CA	1:A:116:GLU:C	9	2.2
(1,159)	1:A:115:ASP:C	1:A:116:GLU:N	1:A:116:GLU:CA	1:A:116:GLU:C	10	2.2
(1,151)	1:A:109:ASP:C	1:A:110:CYS:N	1:A:110:CYS:CA	1:A:110:CYS:C	17	2.2
(1,138)	1:A:100:ARG:N	1:A:100:ARG:CA	1:A:100:ARG:C	1:A:101:ASN:N	1	2.2
(1,138)	1:A:100:ARG:N	1:A:100:ARG:CA	1:A:100:ARG:C	1:A:101:ASN:N	11	2.2
(1,13)	1:A:9:VAL:C	1:A:10:CYS:N	1:A:10:CYS:CA	1:A:10:CYS:C	3	2.2
(1,124)	1:A:93:SER:N	1:A:93:SER:CA	1:A:93:SER:C	1:A:94:SER:N	12	2.2
(1,113)	1:A:84:THR:C	1:A:85:CYS:N	1:A:85:CYS:CA	1:A:85:CYS:C	4	2.2
(1,106)	1:A:77:GLU:N	1:A:77:GLU:CA	1:A:77:GLU:C	1:A:78:GLU:N	8	2.2
(1,98)	1:A:71:CYS:N	1:A:71:CYS:CA	1:A:71:CYS:C	1:A:72:ASP:N	8	2.1
(1,67)	1:A:52:GLY:C	1:A:53:ALA:N	1:A:53:ALA:CA	1:A:53:ALA:C	8	2.1
(1,50)	1:A:35:SER:N	1:A:35:SER:CA	1:A:35:SER:C	1:A:36:PRO:N	7	2.1
(1,32)	1:A:19:ARG:N	1:A:19:ARG:CA	1:A:19:ARG:C	1:A:20:TRP:N	18	2.1
(1,31)	1:A:18:SER:C	1:A:19:ARG:N	1:A:19:ARG:CA	1:A:19:ARG:C	11	2.1
(1,30)	1:A:18:SER:N	1:A:18:SER:CA	1:A:18:SER:C	1:A:19:ARG:N	2	2.1
(1,23)	1:A:14:GLN:C	1:A:15:CYS:N	1:A:15:CYS:CA	1:A:15:CYS:C	17	2.1
(1,182)	1:A:112:ASP:N	1:A:112:ASP:CA	1:A:112:ASP:C	1:A:113:GLY:N	1	2.1
(1,161)	1:A:116:GLU:C	1:A:117:LEU:N	1:A:117:LEU:CA	1:A:117:LEU:C	12	2.1
(1,160)	1:A:116:GLU:N	1:A:116:GLU:CA	1:A:116:GLU:C	1:A:117:LEU:N	9	2.1
(1,149)	1:A:107:GLN:C	1:A:108:ASP:N	1:A:108:ASP:CA	1:A:108:ASP:C	7	2.1
(1,141)	1:A:101:ASN:C	1:A:102:PHE:N	1:A:102:PHE:CA	1:A:102:PHE:C	9	2.1
(1,136)	1:A:99:SER:N	1:A:99:SER:CA	1:A:99:SER:C	1:A:100:ARG:N	13	2.1
(1,130)	1:A:96:ARG:N	1:A:96:ARG:CA	1:A:96:ARG:C	1:A:97:CYS:N	20	2.1
(1,107)	1:A:77:GLU:C	1:A:78:GLU:N	1:A:78:GLU:CA	1:A:78:GLU:C	20	2.1
(1,103)	1:A:75:GLU:C	1:A:76:ASP:N	1:A:76:ASP:CA	1:A:76:ASP:C	13	2.1
(1,10)	1:A:8:PHE:N	1:A:8:PHE:CA	1:A:8:PHE:C	1:A:9:VAL:N	14	2.1
(1,55)	1:A:37:GLU:C	1:A:38:GLN:N	1:A:38:GLN:CA	1:A:38:GLN:C	8	2.0
(1,50)	1:A:35:SER:N	1:A:35:SER:CA	1:A:35:SER:C	1:A:36:PRO:N	2	2.0

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,50)	1:A:35:SER:N	1:A:35:SER:CA	1:A:35:SER:C	1:A:36:PRO:N	4	2.0
(1,50)	1:A:35:SER:N	1:A:35:SER:CA	1:A:35:SER:C	1:A:36:PRO:N	12	2.0
(1,5)	1:A:4:ALA:C	1:A:5:GLU:N	1:A:5:GLU:CA	1:A:5:GLU:C	19	2.0
(1,30)	1:A:18:SER:N	1:A:18:SER:CA	1:A:18:SER:C	1:A:19:ARG:N	6	2.0
(1,30)	1:A:18:SER:N	1:A:18:SER:CA	1:A:18:SER:C	1:A:19:ARG:N	17	2.0
(1,30)	1:A:18:SER:N	1:A:18:SER:CA	1:A:18:SER:C	1:A:19:ARG:N	18	2.0
(1,177)	1:A:91:THR:C	1:A:92:CYS:N	1:A:92:CYS:CA	1:A:92:CYS:C	9	2.0
(1,160)	1:A:116:GLU:N	1:A:116:GLU:CA	1:A:116:GLU:C	1:A:117:LEU:N	7	2.0
(1,14)	1:A:10:CYS:N	1:A:10:CYS:CA	1:A:10:CYS:C	1:A:11:ASN:N	8	2.0
(1,131)	1:A:96:ARG:C	1:A:97:CYS:N	1:A:97:CYS:CA	1:A:97:CYS:C	13	2.0
(1,114)	1:A:85:CYS:N	1:A:85:CYS:CA	1:A:85:CYS:C	1:A:86:SER:N	15	2.0
(1,103)	1:A:75:GLU:C	1:A:76:ASP:N	1:A:76:ASP:CA	1:A:76:ASP:C	17	2.0
(1,81)	1:A:60:PRO:C	1:A:61:VAL:N	1:A:61:VAL:CA	1:A:61:VAL:C	16	1.9
(1,80)	1:A:60:PRO:N	1:A:60:PRO:CA	1:A:60:PRO:C	1:A:61:VAL:N	1	1.9
(1,5)	1:A:4:ALA:C	1:A:5:GLU:N	1:A:5:GLU:CA	1:A:5:GLU:C	5	1.9
(1,49)	1:A:34:GLU:C	1:A:35:SER:N	1:A:35:SER:CA	1:A:35:SER:C	1	1.9
(1,49)	1:A:34:GLU:C	1:A:35:SER:N	1:A:35:SER:CA	1:A:35:SER:C	17	1.9
(1,44)	1:A:29:GLU:N	1:A:29:GLU:CA	1:A:29:GLU:C	1:A:30:ASP:N	11	1.9
(1,35)	1:A:21:LYS:C	1:A:22:CYS:N	1:A:22:CYS:CA	1:A:22:CYS:C	7	1.9
(1,35)	1:A:21:LYS:C	1:A:22:CYS:N	1:A:22:CYS:CA	1:A:22:CYS:C	13	1.9
(1,35)	1:A:21:LYS:C	1:A:22:CYS:N	1:A:22:CYS:CA	1:A:22:CYS:C	20	1.9
(1,3)	1:A:2:THR:C	1:A:3:CYS:N	1:A:3:CYS:CA	1:A:3:CYS:C	20	1.9
(1,2)	1:A:2:THR:N	1:A:2:THR:CA	1:A:2:THR:C	1:A:3:CYS:N	20	1.9
(1,161)	1:A:116:GLU:C	1:A:117:LEU:N	1:A:117:LEU:CA	1:A:117:LEU:C	18	1.9
(1,157)	1:A:114:SER:C	1:A:115:ASP:N	1:A:115:ASP:CA	1:A:115:ASP:C	9	1.9
(1,153)	1:A:110:CYS:C	1:A:111:SER:N	1:A:111:SER:CA	1:A:111:SER:C	15	1.9
(1,144)	1:A:103:VAL:N	1:A:103:VAL:CA	1:A:103:VAL:C	1:A:104:CYS:N	16	1.9
(1,143)	1:A:102:PHE:C	1:A:103:VAL:N	1:A:103:VAL:CA	1:A:103:VAL:C	5	1.9
(1,138)	1:A:100:ARG:N	1:A:100:ARG:CA	1:A:100:ARG:C	1:A:101:ASN:N	4	1.9
(1,138)	1:A:100:ARG:N	1:A:100:ARG:CA	1:A:100:ARG:C	1:A:101:ASN:N	13	1.9
(1,138)	1:A:100:ARG:N	1:A:100:ARG:CA	1:A:100:ARG:C	1:A:101:ASN:N	18	1.9
(1,136)	1:A:99:SER:N	1:A:99:SER:CA	1:A:99:SER:C	1:A:100:ARG:N	15	1.9
(1,130)	1:A:96:ARG:N	1:A:96:ARG:CA	1:A:96:ARG:C	1:A:97:CYS:N	8	1.9
(1,13)	1:A:9:VAL:C	1:A:10:CYS:N	1:A:10:CYS:CA	1:A:10:CYS:C	18	1.9
(1,128)	1:A:95:GLY:N	1:A:95:GLY:CA	1:A:95:GLY:C	1:A:96:ARG:N	20	1.9
(1,125)	1:A:93:SER:C	1:A:94:SER:N	1:A:94:SER:CA	1:A:94:SER:C	8	1.9
(1,114)	1:A:85:CYS:N	1:A:85:CYS:CA	1:A:85:CYS:C	1:A:86:SER:N	6	1.9
(1,99)	1:A:71:CYS:C	1:A:72:ASP:N	1:A:72:ASP:CA	1:A:72:ASP:C	19	1.8
(1,97)	1:A:70:ASP:C	1:A:71:CYS:N	1:A:71:CYS:CA	1:A:71:CYS:C	18	1.8
(1,95)	1:A:68:GLU:C	1:A:69:ASN:N	1:A:69:ASN:CA	1:A:69:ASN:C	4	1.8
(1,80)	1:A:60:PRO:N	1:A:60:PRO:CA	1:A:60:PRO:C	1:A:61:VAL:N	6	1.8
(1,70)	1:A:54:HIS:N	1:A:54:HIS:CA	1:A:54:HIS:C	1:A:55:SER:N	4	1.8
(1,7)	1:A:5:GLU:C	1:A:6:SER:N	1:A:6:SER:CA	1:A:6:SER:C	14	1.8
(1,55)	1:A:37:GLU:C	1:A:38:GLN:N	1:A:38:GLN:CA	1:A:38:GLN:C	9	1.8
(1,55)	1:A:37:GLU:C	1:A:38:GLN:N	1:A:38:GLN:CA	1:A:38:GLN:C	20	1.8
(1,54)	1:A:37:GLU:N	1:A:37:GLU:CA	1:A:37:GLU:C	1:A:38:GLN:N	6	1.8
(1,54)	1:A:37:GLU:N	1:A:37:GLU:CA	1:A:37:GLU:C	1:A:38:GLN:N	18	1.8
(1,51)	1:A:35:SER:C	1:A:36:PRO:N	1:A:36:PRO:CA	1:A:36:PRO:C	10	1.8
(1,32)	1:A:19:ARG:N	1:A:19:ARG:CA	1:A:19:ARG:C	1:A:20:TRP:N	3	1.8
(1,32)	1:A:19:ARG:N	1:A:19:ARG:CA	1:A:19:ARG:C	1:A:20:TRP:N	10	1.8
(1,30)	1:A:18:SER:N	1:A:18:SER:CA	1:A:18:SER:C	1:A:19:ARG:N	10	1.8

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,23)	1:A:14:GLN:C	1:A:15:CYS:N	1:A:15:CYS:CA	1:A:15:CYS:C	5	1.8
(1,23)	1:A:14:GLN:C	1:A:15:CYS:N	1:A:15:CYS:CA	1:A:15:CYS:C	14	1.8
(1,181)	1:A:111:SER:C	1:A:112:ASP:N	1:A:112:ASP:CA	1:A:112:ASP:C	6	1.8
(1,153)	1:A:110:CYS:C	1:A:111:SER:N	1:A:111:SER:CA	1:A:111:SER:C	14	1.8
(1,151)	1:A:109:ASP:C	1:A:110:CYS:N	1:A:110:CYS:CA	1:A:110:CYS:C	9	1.8
(1,150)	1:A:108:ASP:N	1:A:108:ASP:CA	1:A:108:ASP:C	1:A:109:ASP:N	11	1.8
(1,149)	1:A:107:GLN:C	1:A:108:ASP:N	1:A:108:ASP:CA	1:A:108:ASP:C	18	1.8
(1,145)	1:A:105:ASN:C	1:A:106:GLY:N	1:A:106:GLY:CA	1:A:106:GLY:C	11	1.8
(1,143)	1:A:102:PHE:C	1:A:103:VAL:N	1:A:103:VAL:CA	1:A:103:VAL:C	19	1.8
(1,13)	1:A:9:VAL:C	1:A:10:CYS:N	1:A:10:CYS:CA	1:A:10:CYS:C	19	1.8
(1,122)	1:A:90:PHE:N	1:A:90:PHE:CA	1:A:90:PHE:C	1:A:91:THR:N	6	1.8
(1,107)	1:A:77:GLU:C	1:A:78:GLU:N	1:A:78:GLU:CA	1:A:78:GLU:C	10	1.8
(1,80)	1:A:60:PRO:N	1:A:60:PRO:CA	1:A:60:PRO:C	1:A:61:VAL:N	15	1.7
(1,54)	1:A:37:GLU:N	1:A:37:GLU:CA	1:A:37:GLU:C	1:A:38:GLN:N	9	1.7
(1,50)	1:A:35:SER:N	1:A:35:SER:CA	1:A:35:SER:C	1:A:36:PRO:N	8	1.7
(1,49)	1:A:34:GLU:C	1:A:35:SER:N	1:A:35:SER:CA	1:A:35:SER:C	6	1.7
(1,49)	1:A:34:GLU:C	1:A:35:SER:N	1:A:35:SER:CA	1:A:35:SER:C	16	1.7
(1,49)	1:A:34:GLU:C	1:A:35:SER:N	1:A:35:SER:CA	1:A:35:SER:C	20	1.7
(1,44)	1:A:29:GLU:N	1:A:29:GLU:CA	1:A:29:GLU:C	1:A:30:ASP:N	16	1.7
(1,31)	1:A:18:SER:C	1:A:19:ARG:N	1:A:19:ARG:CA	1:A:19:ARG:C	6	1.7
(1,3)	1:A:2:THR:C	1:A:3:CYS:N	1:A:3:CYS:CA	1:A:3:CYS:C	8	1.7
(1,26)	1:A:16:VAL:N	1:A:16:VAL:CA	1:A:16:VAL:C	1:A:17:PRO:N	8	1.7
(1,150)	1:A:108:ASP:N	1:A:108:ASP:CA	1:A:108:ASP:C	1:A:109:ASP:N	13	1.7
(1,149)	1:A:107:GLN:C	1:A:108:ASP:N	1:A:108:ASP:CA	1:A:108:ASP:C	12	1.7
(1,145)	1:A:105:ASN:C	1:A:106:GLY:N	1:A:106:GLY:CA	1:A:106:GLY:C	14	1.7
(1,128)	1:A:95:GLY:N	1:A:95:GLY:CA	1:A:95:GLY:C	1:A:96:ARG:N	12	1.7
(1,128)	1:A:95:GLY:N	1:A:95:GLY:CA	1:A:95:GLY:C	1:A:96:ARG:N	15	1.7
(1,122)	1:A:90:PHE:N	1:A:90:PHE:CA	1:A:90:PHE:C	1:A:91:THR:N	9	1.7
(1,7)	1:A:5:GLU:C	1:A:6:SER:N	1:A:6:SER:CA	1:A:6:SER:C	20	1.6
(1,63)	1:A:48:GLU:C	1:A:49:ILE:N	1:A:49:ILE:CA	1:A:49:ILE:C	15	1.6
(1,6)	1:A:5:GLU:N	1:A:5:GLU:CA	1:A:5:GLU:C	1:A:6:SER:N	3	1.6
(1,5)	1:A:4:ALA:C	1:A:5:GLU:N	1:A:5:GLU:CA	1:A:5:GLU:C	1	1.6
(1,31)	1:A:18:SER:C	1:A:19:ARG:N	1:A:19:ARG:CA	1:A:19:ARG:C	13	1.6
(1,23)	1:A:14:GLN:C	1:A:15:CYS:N	1:A:15:CYS:CA	1:A:15:CYS:C	8	1.6
(1,23)	1:A:14:GLN:C	1:A:15:CYS:N	1:A:15:CYS:CA	1:A:15:CYS:C	9	1.6
(1,23)	1:A:14:GLN:C	1:A:15:CYS:N	1:A:15:CYS:CA	1:A:15:CYS:C	10	1.6
(1,23)	1:A:14:GLN:C	1:A:15:CYS:N	1:A:15:CYS:CA	1:A:15:CYS:C	13	1.6
(1,19)	1:A:12:ASN:C	1:A:13:GLY:N	1:A:13:GLY:CA	1:A:13:GLY:C	12	1.6
(1,181)	1:A:111:SER:C	1:A:112:ASP:N	1:A:112:ASP:CA	1:A:112:ASP:C	14	1.6
(1,161)	1:A:116:GLU:C	1:A:117:LEU:N	1:A:117:LEU:CA	1:A:117:LEU:C	11	1.6
(1,161)	1:A:116:GLU:C	1:A:117:LEU:N	1:A:117:LEU:CA	1:A:117:LEU:C	14	1.6
(1,157)	1:A:114:SER:C	1:A:115:ASP:N	1:A:115:ASP:CA	1:A:115:ASP:C	16	1.6
(1,15)	1:A:10:CYS:C	1:A:11:ASN:N	1:A:11:ASN:CA	1:A:11:ASN:C	5	1.6
(1,138)	1:A:100:ARG:N	1:A:100:ARG:CA	1:A:100:ARG:C	1:A:101:ASN:N	2	1.6
(1,138)	1:A:100:ARG:N	1:A:100:ARG:CA	1:A:100:ARG:C	1:A:101:ASN:N	6	1.6
(1,134)	1:A:98:ILE:N	1:A:98:ILE:CA	1:A:98:ILE:C	1:A:99:SER:N	10	1.6
(1,133)	1:A:97:CYS:C	1:A:98:ILE:N	1:A:98:ILE:CA	1:A:98:ILE:C	11	1.6
(1,13)	1:A:9:VAL:C	1:A:10:CYS:N	1:A:10:CYS:CA	1:A:10:CYS:C	7	1.6
(1,103)	1:A:75:GLU:C	1:A:76:ASP:N	1:A:76:ASP:CA	1:A:76:ASP:C	15	1.6
(1,97)	1:A:70:ASP:C	1:A:71:CYS:N	1:A:71:CYS:CA	1:A:71:CYS:C	14	1.5
(1,90)	1:A:66:ASP:N	1:A:66:ASP:CA	1:A:66:ASP:C	1:A:67:GLY:N	8	1.5

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,83)	1:A:61:VAL:C	1:A:62:SER:N	1:A:62:SER:CA	1:A:62:SER:C	15	1.5
(1,55)	1:A:37:GLU:C	1:A:38:GLN:N	1:A:38:GLN:CA	1:A:38:GLN:C	10	1.5
(1,55)	1:A:37:GLU:C	1:A:38:GLN:N	1:A:38:GLN:CA	1:A:38:GLN:C	11	1.5
(1,54)	1:A:37:GLU:N	1:A:37:GLU:CA	1:A:37:GLU:C	1:A:38:GLN:N	13	1.5
(1,5)	1:A:4:ALA:C	1:A:5:GLU:N	1:A:5:GLU:CA	1:A:5:GLU:C	2	1.5
(1,5)	1:A:4:ALA:C	1:A:5:GLU:N	1:A:5:GLU:CA	1:A:5:GLU:C	17	1.5
(1,42)	1:A:27:ASP:N	1:A:27:ASP:CA	1:A:27:ASP:C	1:A:28:CYS:N	4	1.5
(1,32)	1:A:19:ARG:N	1:A:19:ARG:CA	1:A:19:ARG:C	1:A:20:TRP:N	19	1.5
(1,30)	1:A:18:SER:N	1:A:18:SER:CA	1:A:18:SER:C	1:A:19:ARG:N	3	1.5
(1,30)	1:A:18:SER:N	1:A:18:SER:CA	1:A:18:SER:C	1:A:19:ARG:N	20	1.5
(1,149)	1:A:107:GLN:C	1:A:108:ASP:N	1:A:108:ASP:CA	1:A:108:ASP:C	9	1.5
(1,138)	1:A:100:ARG:N	1:A:100:ARG:CA	1:A:100:ARG:C	1:A:101:ASN:N	19	1.5
(1,136)	1:A:99:SER:N	1:A:99:SER:CA	1:A:99:SER:C	1:A:100:ARG:N	11	1.5
(1,132)	1:A:97:CYS:N	1:A:97:CYS:CA	1:A:97:CYS:C	1:A:98:ILE:N	9	1.5
(1,132)	1:A:97:CYS:N	1:A:97:CYS:CA	1:A:97:CYS:C	1:A:98:ILE:N	15	1.5
(1,128)	1:A:95:GLY:N	1:A:95:GLY:CA	1:A:95:GLY:C	1:A:96:ARG:N	13	1.5
(1,127)	1:A:94:SER:C	1:A:95:GLY:N	1:A:95:GLY:CA	1:A:95:GLY:C	15	1.5
(1,120)	1:A:89:GLU:N	1:A:89:GLU:CA	1:A:89:GLU:C	1:A:90:PHE:N	19	1.5
(1,109)	1:A:82:ASN:C	1:A:83:ILE:N	1:A:83:ILE:CA	1:A:83:ILE:C	10	1.5
(1,70)	1:A:54:HIS:N	1:A:54:HIS:CA	1:A:54:HIS:C	1:A:55:SER:N	13	1.4
(1,50)	1:A:35:SER:N	1:A:35:SER:CA	1:A:35:SER:C	1:A:36:PRO:N	14	1.4
(1,5)	1:A:4:ALA:C	1:A:5:GLU:N	1:A:5:GLU:CA	1:A:5:GLU:C	8	1.4
(1,49)	1:A:34:GLU:C	1:A:35:SER:N	1:A:35:SER:CA	1:A:35:SER:C	8	1.4
(1,35)	1:A:21:LYS:C	1:A:22:CYS:N	1:A:22:CYS:CA	1:A:22:CYS:C	9	1.4
(1,31)	1:A:18:SER:C	1:A:19:ARG:N	1:A:19:ARG:CA	1:A:19:ARG:C	17	1.4
(1,19)	1:A:12:ASN:C	1:A:13:GLY:N	1:A:13:GLY:CA	1:A:13:GLY:C	18	1.4
(1,177)	1:A:91:THR:C	1:A:92:CYS:N	1:A:92:CYS:CA	1:A:92:CYS:C	16	1.4
(1,161)	1:A:116:GLU:C	1:A:117:LEU:N	1:A:117:LEU:CA	1:A:117:LEU:C	15	1.4
(1,153)	1:A:110:CYS:C	1:A:111:SER:N	1:A:111:SER:CA	1:A:111:SER:C	13	1.4
(1,130)	1:A:96:ARG:N	1:A:96:ARG:CA	1:A:96:ARG:C	1:A:97:CYS:N	4	1.4
(1,125)	1:A:93:SER:C	1:A:94:SER:N	1:A:94:SER:CA	1:A:94:SER:C	1	1.4
(1,113)	1:A:84:THR:C	1:A:85:CYS:N	1:A:85:CYS:CA	1:A:85:CYS:C	10	1.4
(1,88)	1:A:65:CYS:N	1:A:65:CYS:CA	1:A:65:CYS:C	1:A:66:ASP:N	3	1.3
(1,8)	1:A:6:SER:N	1:A:6:SER:CA	1:A:6:SER:C	1:A:7:ASP:N	15	1.3
(1,72)	1:A:55:SER:N	1:A:55:SER:CA	1:A:55:SER:C	1:A:56:THR:N	10	1.3
(1,66)	1:A:50:SER:N	1:A:50:SER:CA	1:A:50:SER:C	1:A:51:CYS:N	8	1.3
(1,61)	1:A:47:HIS:C	1:A:48:GLU:N	1:A:48:GLU:CA	1:A:48:GLU:C	6	1.3
(1,32)	1:A:19:ARG:N	1:A:19:ARG:CA	1:A:19:ARG:C	1:A:20:TRP:N	17	1.3
(1,32)	1:A:19:ARG:N	1:A:19:ARG:CA	1:A:19:ARG:C	1:A:20:TRP:N	20	1.3
(1,31)	1:A:18:SER:C	1:A:19:ARG:N	1:A:19:ARG:CA	1:A:19:ARG:C	2	1.3
(1,30)	1:A:18:SER:N	1:A:18:SER:CA	1:A:18:SER:C	1:A:19:ARG:N	7	1.3
(1,30)	1:A:18:SER:N	1:A:18:SER:CA	1:A:18:SER:C	1:A:19:ARG:N	16	1.3
(1,27)	1:A:16:VAL:C	1:A:17:PRO:N	1:A:17:PRO:CA	1:A:17:PRO:C	6	1.3
(1,23)	1:A:14:GLN:C	1:A:15:CYS:N	1:A:15:CYS:CA	1:A:15:CYS:C	6	1.3
(1,21)	1:A:13:GLY:C	1:A:14:GLN:N	1:A:14:GLN:CA	1:A:14:GLN:C	4	1.3
(1,21)	1:A:13:GLY:C	1:A:14:GLN:N	1:A:14:GLN:CA	1:A:14:GLN:C	17	1.3
(1,2)	1:A:2:THR:N	1:A:2:THR:CA	1:A:2:THR:C	1:A:3:CYS:N	1	1.3
(1,182)	1:A:112:ASP:N	1:A:112:ASP:CA	1:A:112:ASP:C	1:A:113:GLY:N	15	1.3
(1,18)	1:A:12:ASN:N	1:A:12:ASN:CA	1:A:12:ASN:C	1:A:13:GLY:N	17	1.3
(1,160)	1:A:116:GLU:N	1:A:116:GLU:CA	1:A:116:GLU:C	1:A:117:LEU:N	4	1.3
(1,144)	1:A:103:VAL:N	1:A:103:VAL:CA	1:A:103:VAL:C	1:A:104:CYS:N	20	1.3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,135)	1:A:98:ILE:C	1:A:99:SER:N	1:A:99:SER:CA	1:A:99:SER:C	16	1.3
(1,131)	1:A:96:ARG:C	1:A:97:CYS:N	1:A:97:CYS:CA	1:A:97:CYS:C	12	1.3
(1,112)	1:A:84:THR:N	1:A:84:THR:CA	1:A:84:THR:C	1:A:85:CYS:N	1	1.3
(1,99)	1:A:71:CYS:C	1:A:72:ASP:N	1:A:72:ASP:CA	1:A:72:ASP:C	12	1.2
(1,7)	1:A:5:GLU:C	1:A:6:SER:N	1:A:6:SER:CA	1:A:6:SER:C	10	1.2
(1,7)	1:A:5:GLU:C	1:A:6:SER:N	1:A:6:SER:CA	1:A:6:SER:C	12	1.2
(1,64)	1:A:49:ILE:N	1:A:49:ILE:CA	1:A:49:ILE:C	1:A:50:SER:N	7	1.2
(1,55)	1:A:37:GLU:C	1:A:38:GLN:N	1:A:38:GLN:CA	1:A:38:GLN:C	16	1.2
(1,54)	1:A:37:GLU:N	1:A:37:GLU:CA	1:A:37:GLU:C	1:A:38:GLN:N	7	1.2
(1,50)	1:A:35:SER:N	1:A:35:SER:CA	1:A:35:SER:C	1:A:36:PRO:N	11	1.2
(1,49)	1:A:34:GLU:C	1:A:35:SER:N	1:A:35:SER:CA	1:A:35:SER:C	5	1.2
(1,45)	1:A:29:GLU:C	1:A:30:ASP:N	1:A:30:ASP:CA	1:A:30:ASP:C	12	1.2
(1,42)	1:A:27:ASP:N	1:A:27:ASP:CA	1:A:27:ASP:C	1:A:28:CYS:N	5	1.2
(1,4)	1:A:3:CYS:N	1:A:3:CYS:CA	1:A:3:CYS:C	1:A:4:ALA:N	10	1.2
(1,32)	1:A:19:ARG:N	1:A:19:ARG:CA	1:A:19:ARG:C	1:A:20:TRP:N	1	1.2
(1,27)	1:A:16:VAL:C	1:A:17:PRO:N	1:A:17:PRO:CA	1:A:17:PRO:C	8	1.2
(1,2)	1:A:2:THR:N	1:A:2:THR:CA	1:A:2:THR:C	1:A:3:CYS:N	8	1.2
(1,175)	1:A:90:PHE:C	1:A:91:THR:N	1:A:91:THR:CA	1:A:91:THR:C	20	1.2
(1,16)	1:A:11:ASN:N	1:A:11:ASN:CA	1:A:11:ASN:C	1:A:12:ASN:N	10	1.2
(1,153)	1:A:110:CYS:C	1:A:111:SER:N	1:A:111:SER:CA	1:A:111:SER:C	12	1.2
(1,132)	1:A:97:CYS:N	1:A:97:CYS:CA	1:A:97:CYS:C	1:A:98:ILE:N	16	1.2
(1,131)	1:A:96:ARG:C	1:A:97:CYS:N	1:A:97:CYS:CA	1:A:97:CYS:C	11	1.2
(1,126)	1:A:94:SER:N	1:A:94:SER:CA	1:A:94:SER:C	1:A:95:GLY:N	17	1.2
(1,121)	1:A:89:GLU:C	1:A:90:PHE:N	1:A:90:PHE:CA	1:A:90:PHE:C	2	1.2
(1,120)	1:A:89:GLU:N	1:A:89:GLU:CA	1:A:89:GLU:C	1:A:90:PHE:N	1	1.2
(1,120)	1:A:89:GLU:N	1:A:89:GLU:CA	1:A:89:GLU:C	1:A:90:PHE:N	2	1.2
(1,116)	1:A:87:PRO:N	1:A:87:PRO:CA	1:A:87:PRO:C	1:A:88:ASP:N	10	1.2
(1,113)	1:A:84:THR:C	1:A:85:CYS:N	1:A:85:CYS:CA	1:A:85:CYS:C	8	1.2
(1,113)	1:A:84:THR:C	1:A:85:CYS:N	1:A:85:CYS:CA	1:A:85:CYS:C	19	1.2
(1,107)	1:A:77:GLU:C	1:A:78:GLU:N	1:A:78:GLU:CA	1:A:78:GLU:C	8	1.2
(1,101)	1:A:74:GLY:C	1:A:75:GLU:N	1:A:75:GLU:CA	1:A:75:GLU:C	1	1.2
(1,99)	1:A:71:CYS:C	1:A:72:ASP:N	1:A:72:ASP:CA	1:A:72:ASP:C	15	1.1
(1,68)	1:A:53:ALA:N	1:A:53:ALA:CA	1:A:53:ALA:C	1:A:54:HIS:N	7	1.1
(1,61)	1:A:47:HIS:C	1:A:48:GLU:N	1:A:48:GLU:CA	1:A:48:GLU:C	2	1.1
(1,55)	1:A:37:GLU:C	1:A:38:GLN:N	1:A:38:GLN:CA	1:A:38:GLN:C	5	1.1
(1,54)	1:A:37:GLU:N	1:A:37:GLU:CA	1:A:37:GLU:C	1:A:38:GLN:N	11	1.1
(1,5)	1:A:4:ALA:C	1:A:5:GLU:N	1:A:5:GLU:CA	1:A:5:GLU:C	20	1.1
(1,49)	1:A:34:GLU:C	1:A:35:SER:N	1:A:35:SER:CA	1:A:35:SER:C	19	1.1
(1,4)	1:A:3:CYS:N	1:A:3:CYS:CA	1:A:3:CYS:C	1:A:4:ALA:N	16	1.1
(1,35)	1:A:21:LYS:C	1:A:22:CYS:N	1:A:22:CYS:CA	1:A:22:CYS:C	5	1.1
(1,30)	1:A:18:SER:N	1:A:18:SER:CA	1:A:18:SER:C	1:A:19:ARG:N	13	1.1
(1,26)	1:A:16:VAL:N	1:A:16:VAL:CA	1:A:16:VAL:C	1:A:17:PRO:N	1	1.1
(1,153)	1:A:110:CYS:C	1:A:111:SER:N	1:A:111:SER:CA	1:A:111:SER:C	20	1.1
(1,133)	1:A:97:CYS:C	1:A:98:ILE:N	1:A:98:ILE:CA	1:A:98:ILE:C	13	1.1
(1,127)	1:A:94:SER:C	1:A:95:GLY:N	1:A:95:GLY:CA	1:A:95:GLY:C	19	1.1
(1,123)	1:A:92:CYS:C	1:A:93:SER:N	1:A:93:SER:CA	1:A:93:SER:C	18	1.1
(1,122)	1:A:90:PHE:N	1:A:90:PHE:CA	1:A:90:PHE:C	1:A:91:THR:N	2	1.1
(1,12)	1:A:9:VAL:N	1:A:9:VAL:CA	1:A:9:VAL:C	1:A:10:CYS:N	2	1.1
(1,116)	1:A:87:PRO:N	1:A:87:PRO:CA	1:A:87:PRO:C	1:A:88:ASP:N	15	1.1
(1,104)	1:A:76:ASP:N	1:A:76:ASP:CA	1:A:76:ASP:C	1:A:77:GLU:N	17	1.1