



Full wwPDB NMR Structure Validation Report ⓘ

Apr 15, 2026 – 11:35 AM UTC

PDB ID : 2AYX / pdb_00002ayx
BMRB ID : 6810
Title : Solution structure of the E.coli RcsC C-terminus (residues 700-949) containing linker region and phosphoreceiver domain
Authors : Rogov, V.V.; Rogova, N.Y.; Bernhard, F.; Koglin, A.; Lohr, F.; Dotsch, V.
Deposited on : 2005-09-09

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 : 4-5-2 with Phenix2.0
Percentile statistics : 20250101.v01 (using entries in the PDB archive January 1st 2025)
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) : 2.49

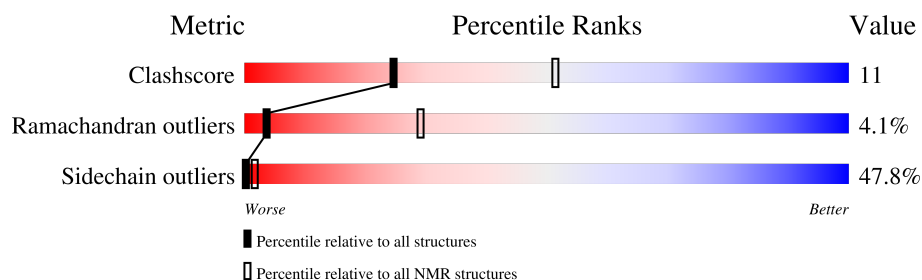
1 Overall quality at a glance

The following experimental techniques were used to determine the structure:

SOLUTION NMR

The overall completeness of chemical shifts assignment is 90%.

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	229148	14424
Ramachandran outliers	224038	12848
Sidechain outliers	223484	12823

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	254	31% 51% • 15%

2 Ensemble composition and analysis

This entry contains 20 models. Model 2 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 and fewest violation*.

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:705-A:800 (96)	0.91	12
2	A:824-A:878, A:883-A:948 (121)	1.18	2

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

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

The models can be grouped into 5 clusters. No single-model clusters were found.

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

3 Entry composition

There is only 1 type of molecule in this entry. The entry contains 3930 atoms, of which 1978 are hydrogens and 0 are deuteriums.

- Molecule 1 is a protein called Sensor kinase protein rcsC.

Mol	Chain	Residues	Atoms						Trace
1	A	254	Total	C	H	N	O	S	0
			3930	1213	1978	346	380	13	

There are 4 discrepancies between the modelled and reference sequences:

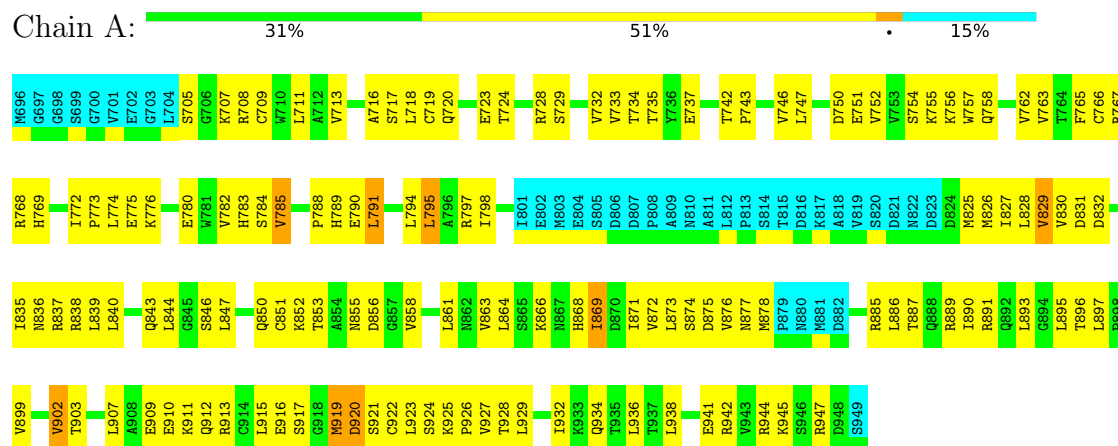
Chain	Residue	Modelled	Actual	Comment	Reference
A	696	MET	-	cloning artifact	UNP P14376
A	697	GLY	-	cloning artifact	UNP P14376
A	698	GLY	-	cloning artifact	UNP P14376
A	699	SER	-	cloning artifact	UNP P14376

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: Sensor kinase protein rcsC

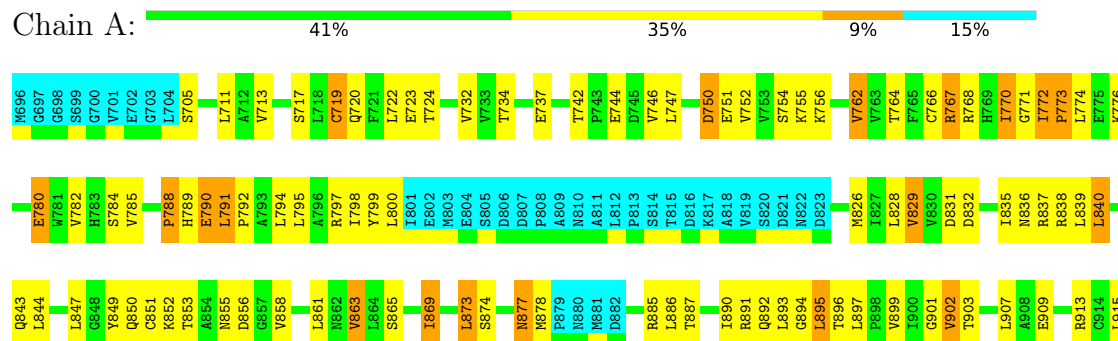


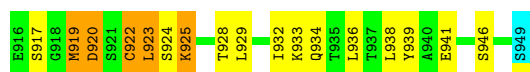
4.2 Scores per residue for each member of the ensemble

Colouring as in section 4.1 above.

4.2.1 Score per residue for model 1

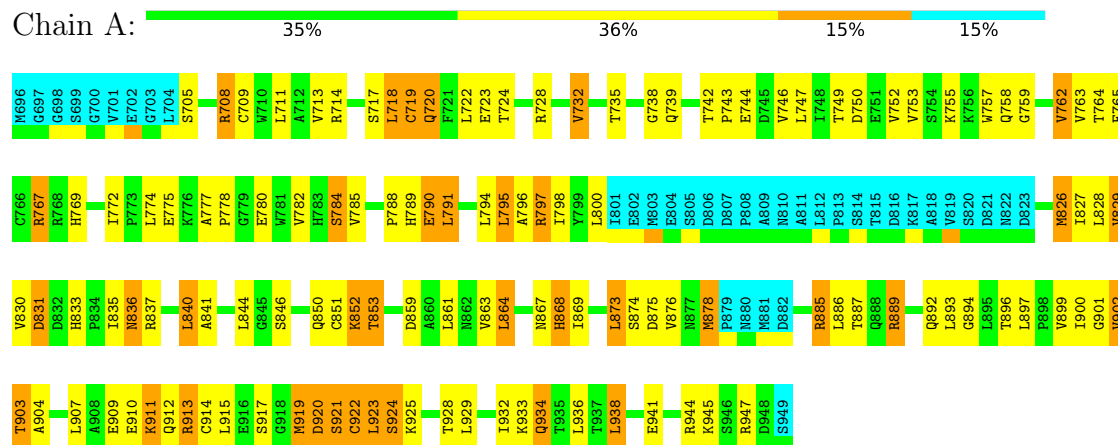
- Molecule 1: Sensor kinase protein rcsC





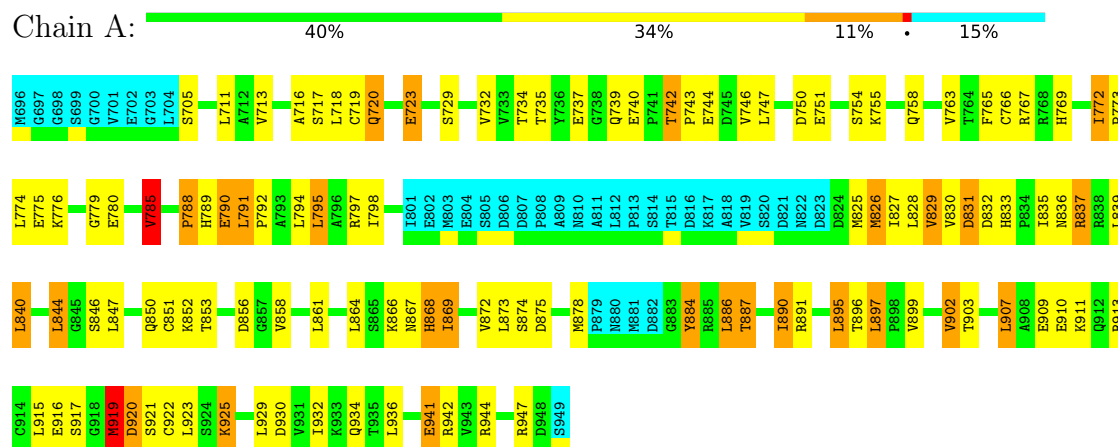
4.2.2 Score per residue for model 2 (medoid)

- Molecule 1: Sensor kinase protein rcsC



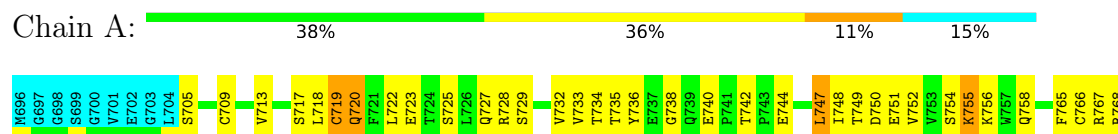
4.2.3 Score per residue for model 3

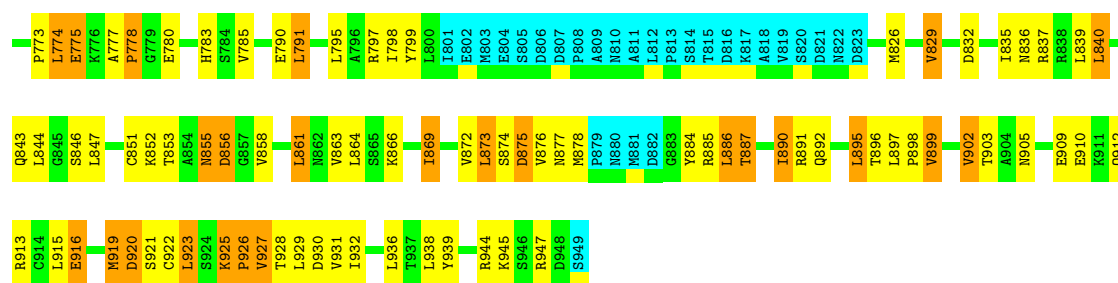
- Molecule 1: Sensor kinase protein rcsC



4.2.4 Score per residue for model 4

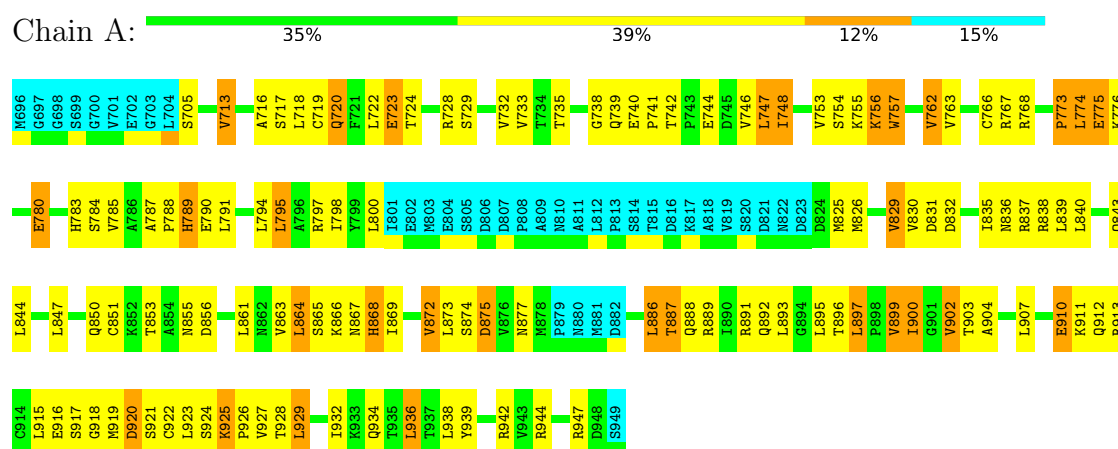
- Molecule 1: Sensor kinase protein rcsC





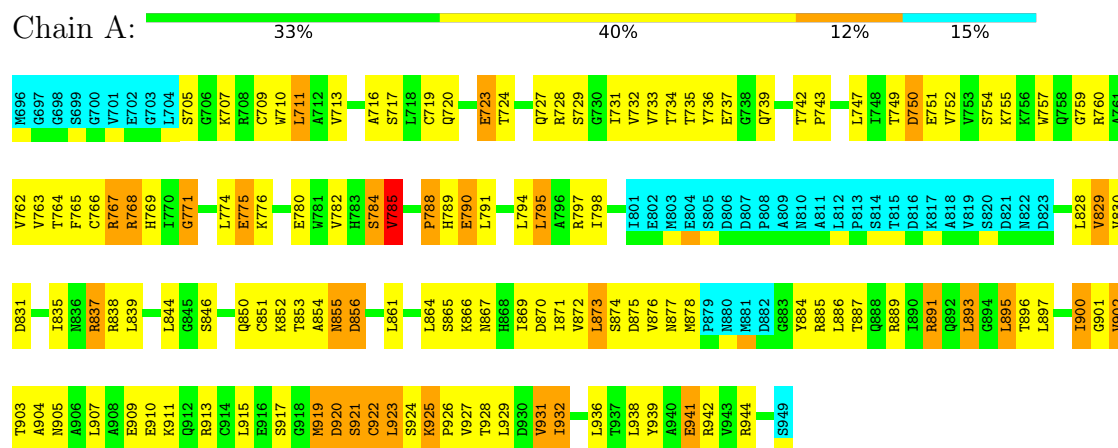
4.2.5 Score per residue for model 5

- Molecule 1: Sensor kinase protein rcsC



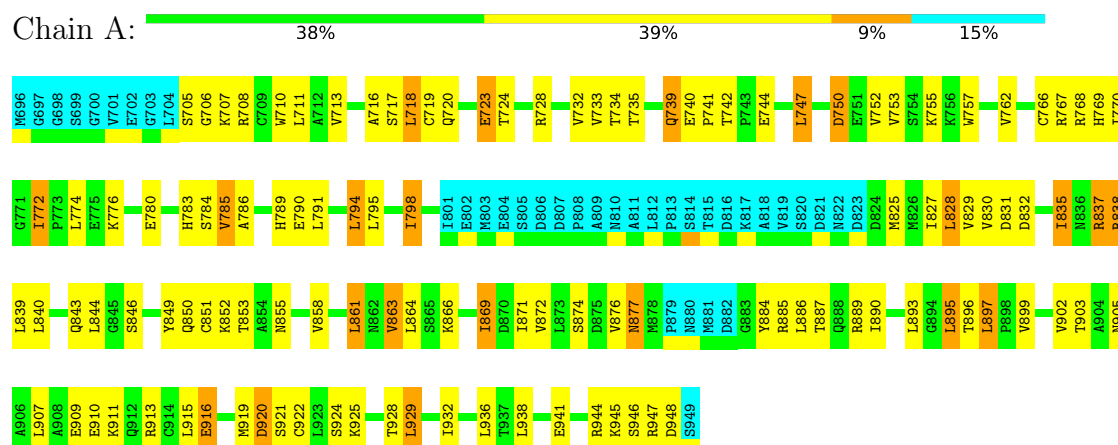
4.2.6 Score per residue for model 6

- Molecule 1: Sensor kinase protein rcsC



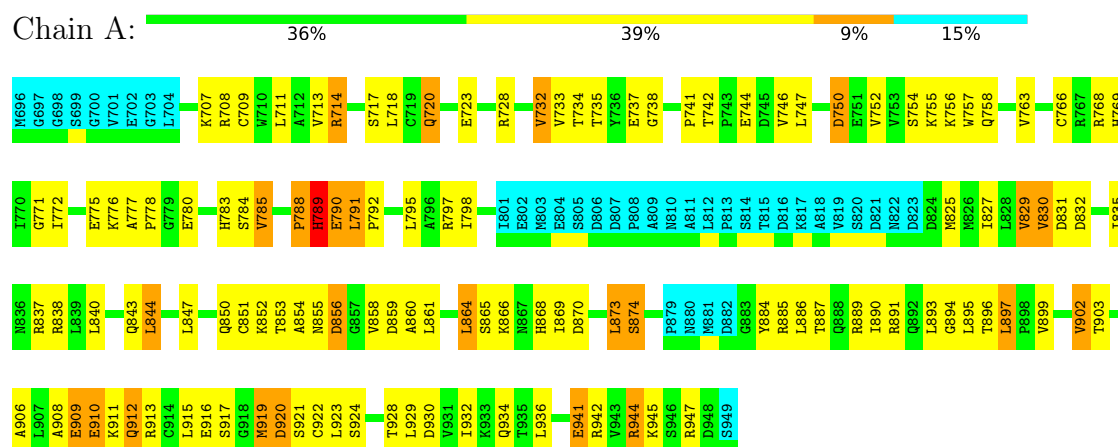
4.2.7 Score per residue for model 7

- Molecule 1: Sensor kinase protein rcsC



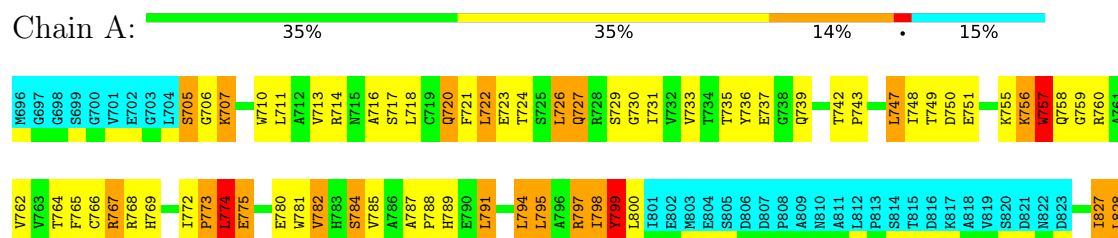
4.2.8 Score per residue for model 8

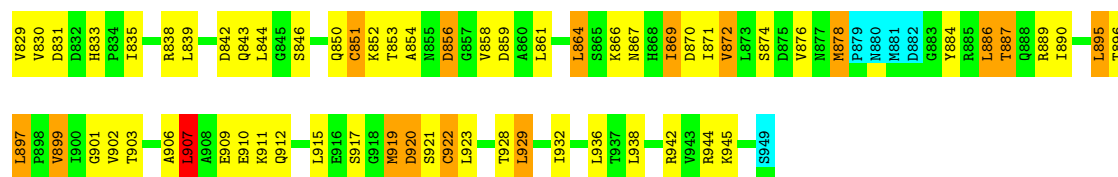
- Molecule 1: Sensor kinase protein rcsC



4.2.9 Score per residue for model 9

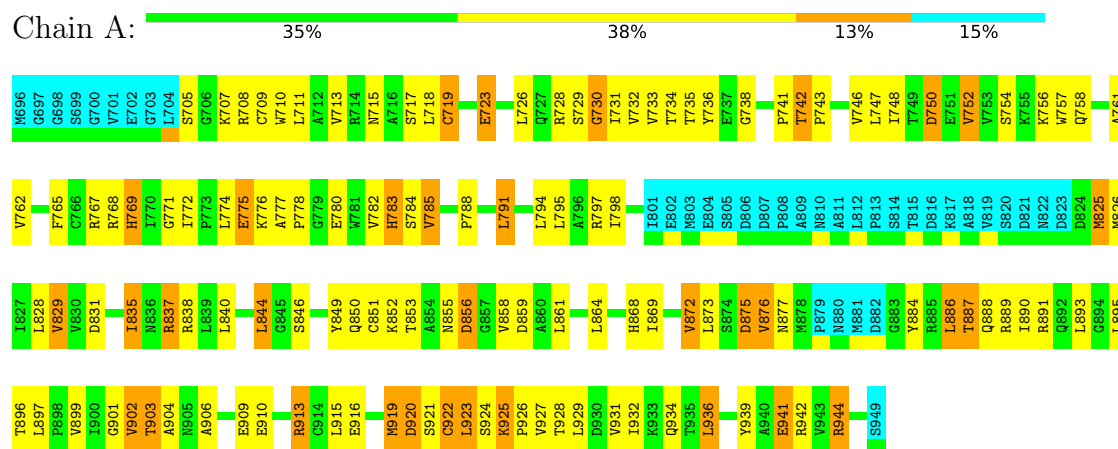
- Molecule 1: Sensor kinase protein rcsC





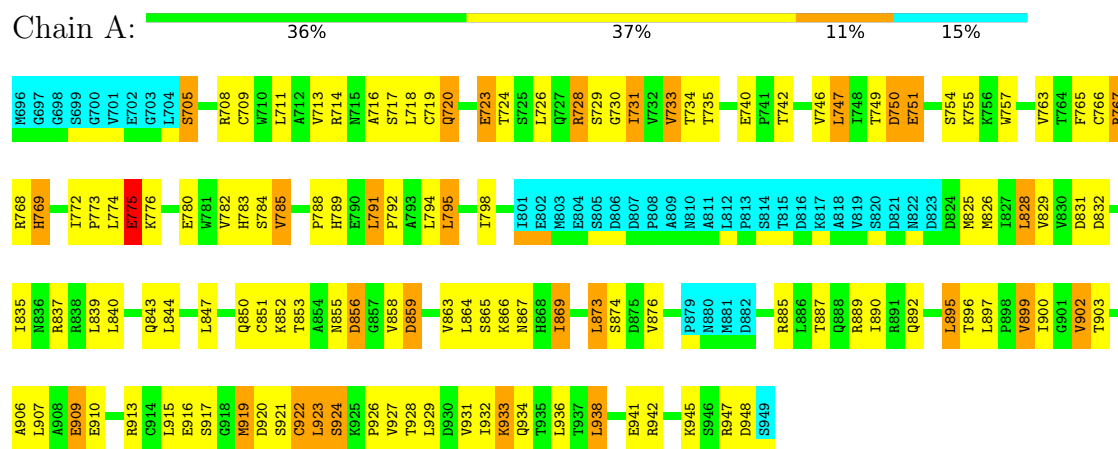
4.2.10 Score per residue for model 10

- Molecule 1: Sensor kinase protein rcsC



4.2.11 Score per residue for model 11

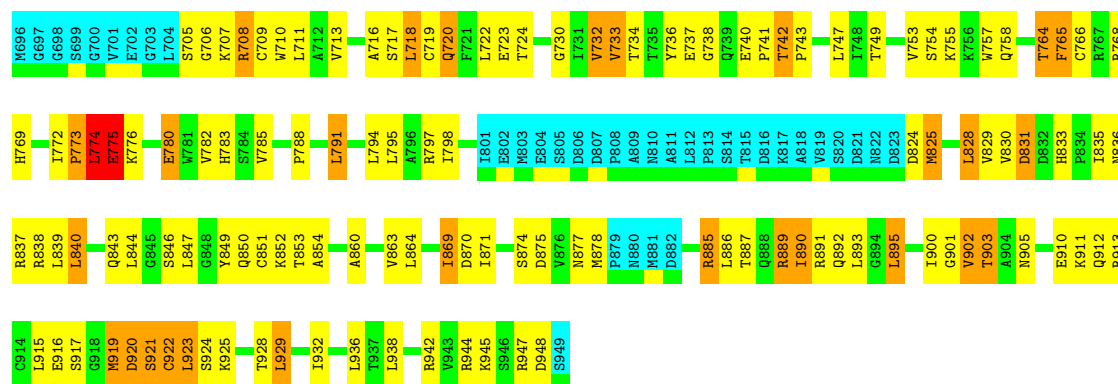
- Molecule 1: Sensor kinase protein rcsC



4.2.12 Score per residue for model 12

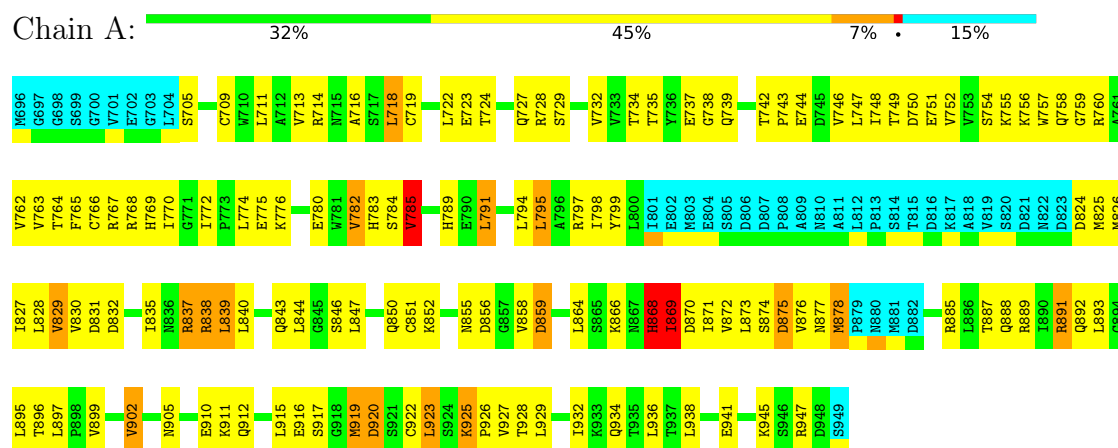
- Molecule 1: Sensor kinase protein rcsC





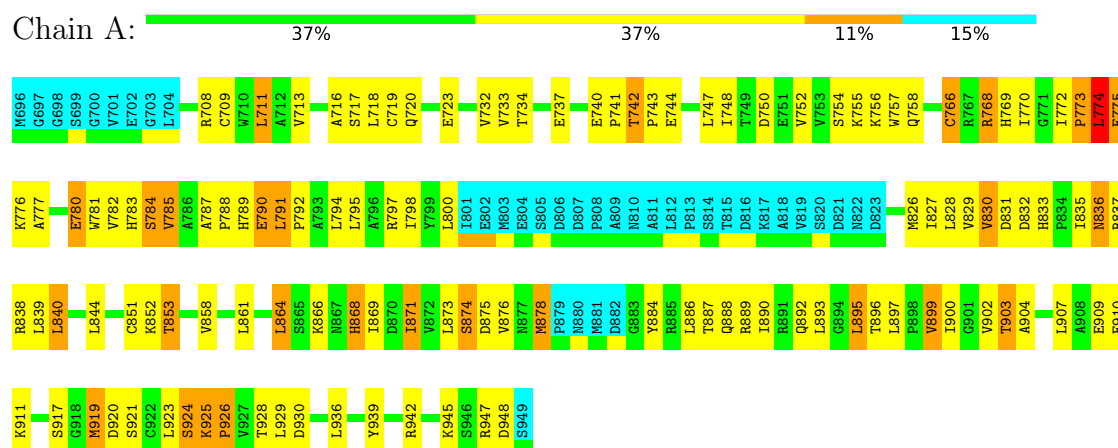
4.2.13 Score per residue for model 13

- Molecule 1: Sensor kinase protein rcsC



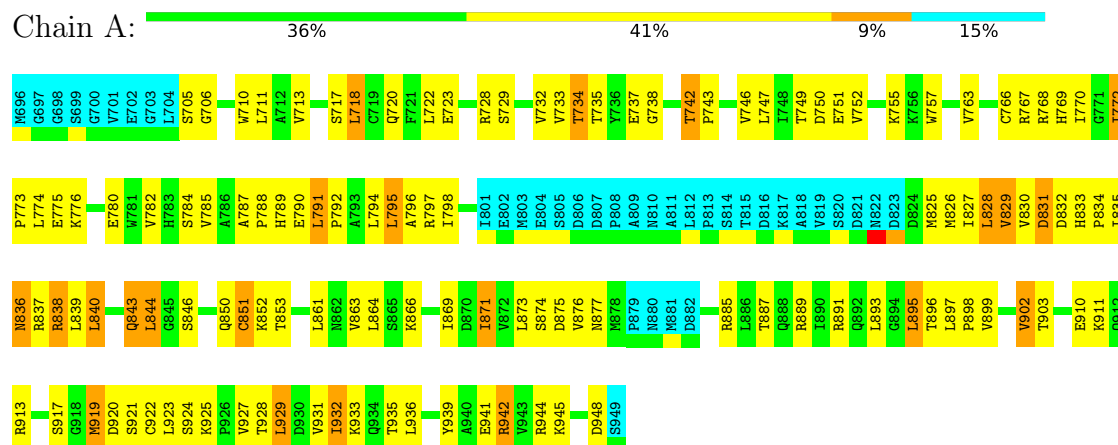
4.2.14 Score per residue for model 14

- Molecule 1: Sensor kinase protein rcsC



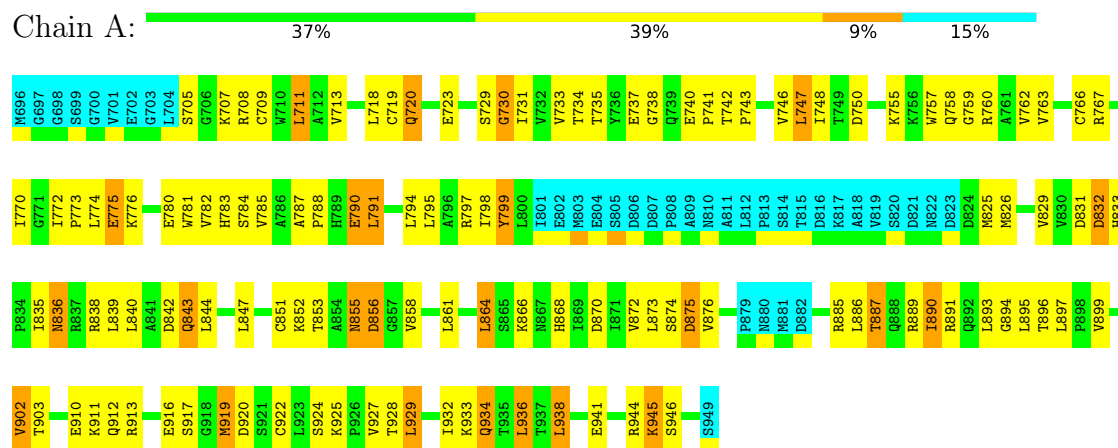
4.2.15 Score per residue for model 15

- Molecule 1: Sensor kinase protein rcsC



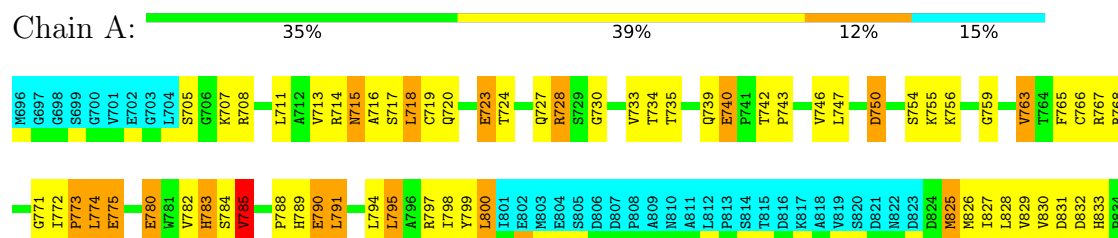
4.2.16 Score per residue for model 16

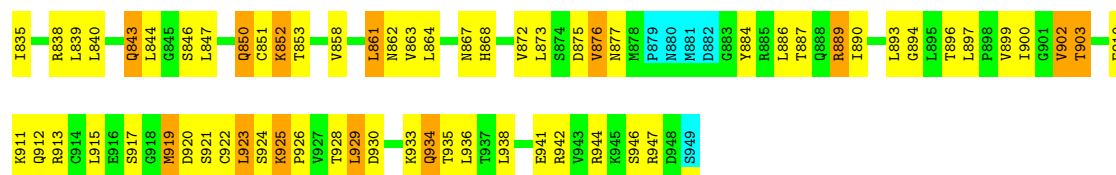
- Molecule 1: Sensor kinase protein rcsC



4.2.17 Score per residue for model 17

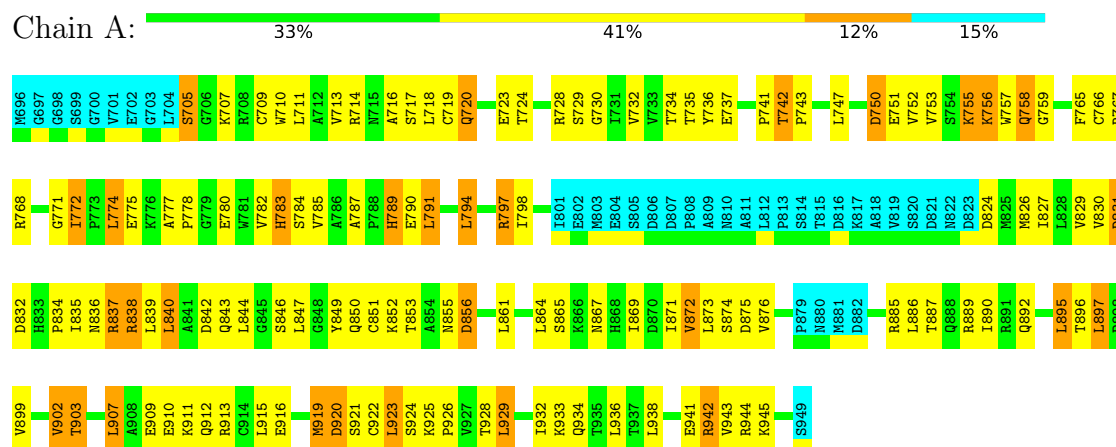
- Molecule 1: Sensor kinase protein rcsC





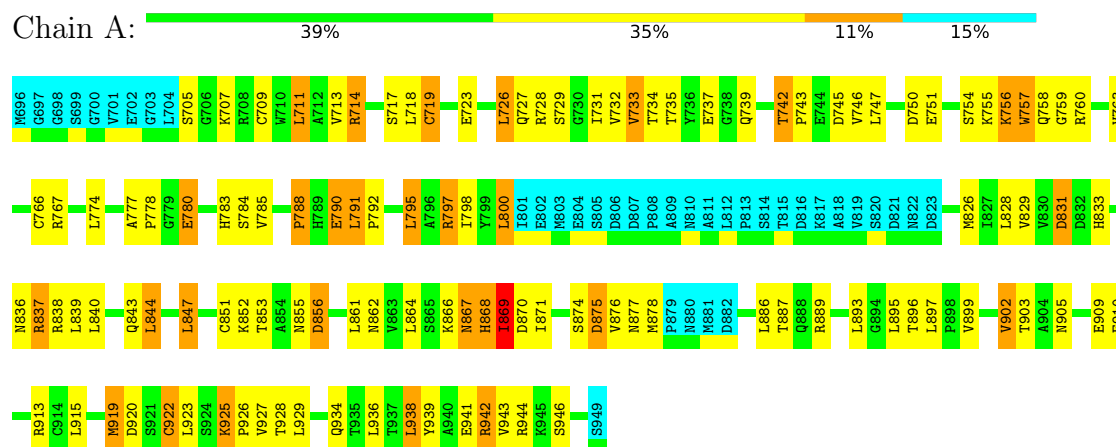
4.2.18 Score per residue for model 18

- Molecule 1: Sensor kinase protein rcsC



4.2.19 Score per residue for model 19

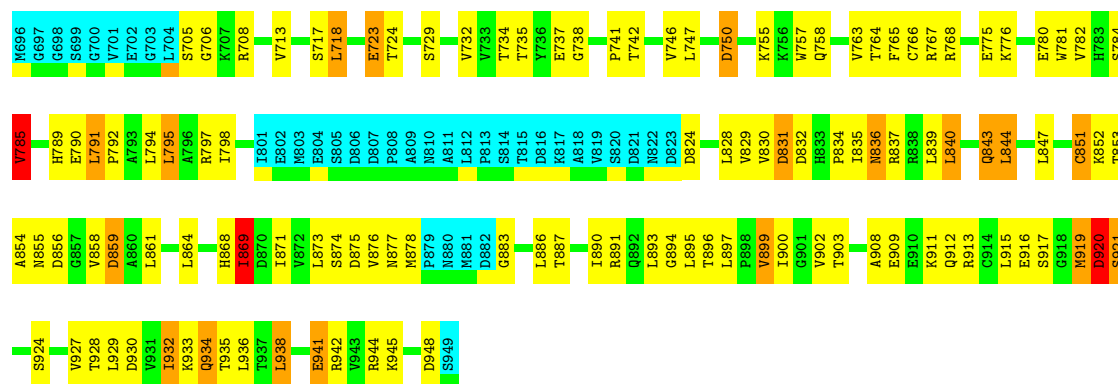
- Molecule 1: Sensor kinase protein rcsC



4.2.20 Score per residue for model 20

- Molecule 1: Sensor kinase protein rcsC





5 Refinement protocol and experimental data overview

The models were refined using the following method: *Energy minimization*.

Of the 30 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
DYANA	structure solution	1.5
CNS	refinement	1.1

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

Chemical shift file(s)	working_cs.cif
Number of chemical shift lists	1
Total number of shifts	3026
Number of shifts mapped to atoms	3026
Number of unparsed shifts	0
Number of shifts with mapping errors	0
Number of shifts with mapping warnings	0
Assignment completeness (well-defined parts)	90%

6 Model quality [i](#)

6.1 Standard geometry [i](#)

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

Chiral center outliers are detected by calculating the chiral volume of a chiral center and verifying if the center is modelled as a planar moiety or with the opposite hand. A planarity outlier is detected by checking planarity of atoms in a peptide group, atoms in a mainchain group or atoms of a sidechain that are expected to be planar.

Mol	Chain	Chirality	Planarity
1	A	0.0±0.0	0.1±0.2
All	All	0	1

There are no bond-length outliers.

There are no bond-angle outliers.

There are no chirality outliers.

All unique planar outliers are listed below.

Mol	Chain	Res	Type	Group	Models (Total)
1	A	799	TYR	Sidechain	1

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	1692	1745	1740	37±7
All	All	33840	34900	34800	731

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 11.

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

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:831:ASP:HB3	1:A:837:ARG:HB2	0.88	1.46	20	8
1:A:772:ILE:HG13	1:A:773:PRO:HD2	0.88	1.44	1	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:832:ASP:HB3	1:A:876:VAL:HB	0.85	1.45	16	1
1:A:743:PRO:HA	1:A:759:GLY:HA2	0.84	1.49	9	8
1:A:843:GLN:HG2	1:A:929:LEU:HD23	0.81	1.53	12	3
1:A:751:GLU:HG2	1:A:752:VAL:H	0.80	1.37	6	1
1:A:902:VAL:HB	1:A:923:LEU:HB2	0.80	1.53	8	3
1:A:827:ILE:HB	1:A:844:LEU:HD21	0.78	1.55	8	3
1:A:713:VAL:HA	1:A:750:ASP:HB2	0.78	1.54	19	6
1:A:711:LEU:HD21	1:A:733:VAL:HG13	0.76	1.57	19	1
1:A:843:GLN:HG2	1:A:929:LEU:HD12	0.76	1.56	8	1
1:A:751:GLU:HG2	1:A:767:ARG:HH21	0.75	1.41	9	2
1:A:891:ARG:HA	1:A:895:LEU:HB2	0.74	1.59	1	2
1:A:902:VAL:HB	1:A:923:LEU:HB3	0.74	1.57	18	1
1:A:752:VAL:HG21	1:A:770:ILE:HB	0.74	1.60	13	1
1:A:764:THR:HB	1:A:782:VAL:HG12	0.72	1.59	20	5
1:A:899:VAL:HB	1:A:919:MET:HA	0.71	1.59	1	12
1:A:829:VAL:HB	1:A:837:ARG:HD2	0.71	1.60	6	2
1:A:723:GLU:HA	1:A:733:VAL:HG21	0.70	1.60	6	1
1:A:828:LEU:HD23	1:A:869:ILE:HG12	0.70	1.62	7	1
1:A:877:ASN:HB2	1:A:925:LYS:HE3	0.70	1.62	12	1
1:A:887:THR:HG21	1:A:919:MET:HG2	0.70	1.63	3	1
1:A:713:VAL:HB	1:A:719:CYS:SG	0.69	2.27	19	3
1:A:765:PHE:HZ	1:A:791:LEU:HG	0.69	1.47	9	3
1:A:752:VAL:HG22	1:A:772:ILE:HB	0.69	1.64	10	1
1:A:765:PHE:CZ	1:A:791:LEU:HG	0.69	2.22	9	5
1:A:723:GLU:HB2	1:A:733:VAL:HG11	0.68	1.64	8	2
1:A:774:LEU:HA	1:A:782:VAL:HG13	0.68	1.65	14	5
1:A:899:VAL:HG13	1:A:919:MET:HA	0.68	1.65	4	5
1:A:777:ALA:HB1	1:A:778:PRO:HD2	0.67	1.66	10	6
1:A:861:LEU:HG	1:A:890:ILE:HA	0.67	1.65	7	1
1:A:726:LEU:HD23	1:A:731:ILE:HD12	0.67	1.65	19	1
1:A:902:VAL:HB	1:A:923:LEU:HD12	0.67	1.66	4	7
1:A:746:VAL:HG21	1:A:795:LEU:HD11	0.67	1.66	2	8
1:A:872:VAL:HB	1:A:899:VAL:HB	0.67	1.66	9	2
1:A:765:PHE:HE1	1:A:785:VAL:HG23	0.66	1.51	20	4
1:A:843:GLN:HG3	1:A:929:LEU:HD23	0.66	1.67	15	4
1:A:723:GLU:HA	1:A:733:VAL:HG11	0.66	1.66	11	2
1:A:788:PRO:HD2	1:A:790:GLU:OE1	0.66	1.91	8	6
1:A:861:LEU:HD23	1:A:890:ILE:HG13	0.65	1.69	7	1
1:A:713:VAL:HG13	1:A:750:ASP:HB3	0.65	1.68	1	9
1:A:713:VAL:HA	1:A:750:ASP:CB	0.65	2.21	13	5
1:A:767:ARG:HA	1:A:784:SER:HB3	0.64	1.69	2	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:742:THR:HG22	1:A:743:PRO:HD2	0.64	1.68	12	6
1:A:831:ASP:HB2	1:A:837:ARG:NE	0.64	2.08	6	2
1:A:913:ARG:HD2	1:A:922:CYS:HB2	0.64	1.70	11	1
1:A:705:SER:HA	1:A:730:GLY:O	0.64	1.93	18	3
1:A:720:GLN:HA	1:A:723:GLU:HG2	0.63	1.69	16	8
1:A:919:MET:O	1:A:920:ASP:HB2	0.63	1.92	20	13
1:A:785:VAL:HG13	1:A:787:ALA:H	0.63	1.54	14	4
1:A:752:VAL:HG13	1:A:772:ILE:HG13	0.63	1.70	18	2
1:A:904:ALA:HA	1:A:925:LYS:HB2	0.63	1.71	14	2
1:A:716:ALA:HA	1:A:719:CYS:SG	0.63	2.34	13	9
1:A:861:LEU:HD21	1:A:890:ILE:HA	0.63	1.70	18	2
1:A:762:VAL:HG13	1:A:780:GLU:HG2	0.62	1.69	1	1
1:A:861:LEU:HD13	1:A:890:ILE:HA	0.62	1.69	1	1
1:A:875:ASP:CG	1:A:925:LYS:HZ3	0.62	2.02	3	2
1:A:885:ARG:O	1:A:889:ARG:HB2	0.62	1.94	12	2
1:A:751:GLU:HG2	1:A:752:VAL:N	0.62	2.09	6	1
1:A:788:PRO:HG2	1:A:790:GLU:HG2	0.62	1.69	2	1
1:A:913:ARG:HA	1:A:919:MET:HE1	0.62	1.71	4	2
1:A:902:VAL:HG12	1:A:925:LYS:HA	0.62	1.71	19	1
1:A:831:ASP:HB2	1:A:875:ASP:HB3	0.61	1.72	12	4
1:A:873:LEU:HD11	1:A:936:LEU:HD11	0.61	1.71	16	1
1:A:899:VAL:HG22	1:A:919:MET:HB3	0.61	1.73	4	1
1:A:710:TRP:HB3	1:A:736:TYR:HB2	0.61	1.73	6	5
1:A:902:VAL:HG22	1:A:925:LYS:HE2	0.61	1.73	17	1
1:A:713:VAL:HB	1:A:719:CYS:HB3	0.61	1.73	5	3
1:A:841:ALA:HB2	1:A:853:THR:HG21	0.60	1.72	2	1
1:A:773:PRO:O	1:A:774:LEU:HB3	0.60	1.97	12	5
1:A:831:ASP:HA	1:A:875:ASP:HB2	0.60	1.72	16	2
1:A:764:THR:HG21	1:A:772:ILE:HG13	0.60	1.72	9	2
1:A:901:GLY:HA3	1:A:919:MET:SD	0.60	2.37	10	1
1:A:830:VAL:HG23	1:A:874:SER:HA	0.60	1.73	14	1
1:A:748:ILE:HG23	1:A:763:VAL:HB	0.59	1.73	5	1
1:A:861:LEU:HD21	1:A:893:LEU:HD12	0.59	1.73	1	1
1:A:713:VAL:HG13	1:A:750:ASP:HB2	0.59	1.75	4	3
1:A:872:VAL:HG23	1:A:897:LEU:HD11	0.58	1.73	16	4
1:A:828:LEU:HB3	1:A:872:VAL:HG22	0.58	1.75	13	2
1:A:924:SER:HB2	1:A:926:PRO:HD2	0.58	1.75	14	2
1:A:837:ARG:NH2	1:A:840:LEU:HD11	0.58	2.13	13	1
1:A:831:ASP:HA	1:A:875:ASP:O	0.58	1.97	3	7
1:A:888:GLN:HA	1:A:891:ARG:HD3	0.58	1.74	13	2
1:A:726:LEU:HB3	1:A:731:ILE:HB	0.58	1.75	10	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:855:ASN:O	1:A:856:ASP:HB2	0.57	1.99	19	8
1:A:910:GLU:HA	1:A:913:ARG:NH1	0.57	2.14	11	1
1:A:829:VAL:HG12	1:A:873:LEU:HD12	0.57	1.75	17	1
1:A:901:GLY:O	1:A:922:CYS:HA	0.57	1.98	10	6
1:A:830:VAL:HG22	1:A:854:ALA:HB3	0.57	1.76	20	3
1:A:708:ARG:HA	1:A:732:VAL:HG23	0.57	1.76	20	2
1:A:829:VAL:HG23	1:A:840:LEU:HD12	0.57	1.77	15	1
1:A:843:GLN:HB3	1:A:932:ILE:HG21	0.57	1.75	15	1
1:A:742:THR:HB	1:A:745:ASP:HB2	0.57	1.76	19	1
1:A:765:PHE:CE1	1:A:785:VAL:HG23	0.57	2.35	20	5
1:A:831:ASP:HB2	1:A:837:ARG:NH1	0.57	2.14	13	1
1:A:707:LYS:NZ	1:A:745:ASP:HA	0.56	2.15	19	1
1:A:886:LEU:HG	1:A:887:THR:N	0.56	2.16	10	4
1:A:875:ASP:OD1	1:A:925:LYS:HG2	0.56	2.01	10	2
1:A:856:ASP:HB3	1:A:859:ASP:HB2	0.56	1.78	20	6
1:A:899:VAL:HG22	1:A:919:MET:HG2	0.56	1.76	11	1
1:A:913:ARG:HB2	1:A:922:CYS:SG	0.56	2.41	12	2
1:A:837:ARG:HH21	1:A:840:LEU:HD11	0.56	1.59	13	1
1:A:826:MET:HG3	1:A:869:ILE:HA	0.56	1.77	4	2
1:A:906:ALA:HB3	1:A:909:GLU:HB3	0.56	1.76	11	1
1:A:828:LEU:HB2	1:A:869:ILE:HG12	0.55	1.77	13	2
1:A:864:LEU:HD21	1:A:897:LEU:HD11	0.55	1.78	9	3
1:A:877:ASN:HB2	1:A:925:LYS:HE2	0.55	1.78	1	1
1:A:831:ASP:OD1	1:A:837:ARG:HB2	0.55	2.00	19	2
1:A:831:ASP:HA	1:A:875:ASP:HB3	0.55	1.78	14	1
1:A:756:LYS:O	1:A:757:TRP:HB2	0.55	2.02	19	3
1:A:752:VAL:HG22	1:A:772:ILE:HG12	0.55	1.77	13	2
1:A:941:GLU:O	1:A:945:LYS:HG2	0.55	2.02	7	1
1:A:775:GLU:HA	1:A:780:GLU:O	0.54	2.02	14	9
1:A:864:LEU:HD23	1:A:869:ILE:HD12	0.54	1.77	2	1
1:A:895:LEU:O	1:A:895:LEU:HG	0.54	2.02	18	7
1:A:836:ASN:O	1:A:840:LEU:HG	0.54	2.03	2	9
1:A:716:ALA:O	1:A:720:GLN:HB2	0.54	2.02	12	5
1:A:831:ASP:HB2	1:A:837:ARG:HE	0.54	1.60	10	1
1:A:757:TRP:HB2	1:A:762:VAL:HB	0.54	1.79	5	1
1:A:775:GLU:HG3	1:A:781:TRP:HA	0.54	1.79	16	2
1:A:831:ASP:HB3	1:A:837:ARG:CB	0.54	2.29	20	1
1:A:713:VAL:HA	1:A:750:ASP:HB3	0.54	1.79	15	3
1:A:942:ARG:HG3	1:A:943:VAL:N	0.54	2.17	19	2
1:A:743:PRO:HA	1:A:759:GLY:CA	0.54	2.30	9	1
1:A:833:HIS:HB2	1:A:836:ASN:ND2	0.54	2.18	16	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:938:LEU:O	1:A:941:GLU:HG2	0.54	2.03	20	1
1:A:900:ILE:HG23	1:A:921:SER:HB2	0.54	1.80	20	5
1:A:788:PRO:HB2	1:A:790:GLU:OE2	0.53	2.03	19	1
1:A:844:LEU:HD13	1:A:851:CYS:HB3	0.53	1.80	20	1
1:A:909:GLU:HB3	1:A:922:CYS:HB2	0.53	1.80	10	1
1:A:912:GLN:O	1:A:916:GLU:HG2	0.53	2.03	13	1
1:A:898:PRO:HB2	1:A:939:TYR:HE2	0.53	1.64	4	1
1:A:864:LEU:HD13	1:A:897:LEU:HD21	0.53	1.81	7	1
1:A:867:ASN:O	1:A:868:HIS:HB2	0.53	2.02	19	1
1:A:826:MET:HE1	1:A:852:LYS:HB2	0.53	1.80	2	1
1:A:932:ILE:O	1:A:936:LEU:HB2	0.53	2.03	6	2
1:A:724:THR:O	1:A:728:ARG:HG3	0.53	2.04	13	2
1:A:708:ARG:HG3	1:A:732:VAL:HB	0.53	1.81	8	1
1:A:873:LEU:HD11	1:A:936:LEU:HD12	0.53	1.80	10	1
1:A:832:ASP:CB	1:A:876:VAL:HB	0.52	2.28	16	1
1:A:723:GLU:HG3	1:A:724:THR:N	0.52	2.17	18	7
1:A:763:VAL:HG11	1:A:791:LEU:HD21	0.52	1.80	8	6
1:A:904:ALA:HB2	1:A:925:LYS:HB2	0.52	1.79	2	2
1:A:837:ARG:NE	1:A:837:ARG:HA	0.52	2.19	6	2
1:A:724:THR:HA	1:A:727:GLN:HG2	0.52	1.80	9	1
1:A:709:CYS:SG	1:A:726:LEU:HD22	0.52	2.45	19	1
1:A:767:ARG:HB3	1:A:784:SER:HB3	0.52	1.82	9	1
1:A:927:VAL:HG13	1:A:931:VAL:HB	0.52	1.81	10	2
1:A:828:LEU:HD22	1:A:869:ILE:HD13	0.52	1.81	9	1
1:A:797:ARG:HA	1:A:800:LEU:HD23	0.52	1.82	17	1
1:A:775:GLU:HG3	1:A:780:GLU:O	0.52	2.05	16	7
1:A:705:SER:O	1:A:846:SER:HA	0.51	2.05	9	1
1:A:723:GLU:HB2	1:A:733:VAL:HG21	0.51	1.82	10	1
1:A:890:ILE:HG12	1:A:895:LEU:HG	0.51	1.82	1	1
1:A:708:ARG:HG2	1:A:732:VAL:HG13	0.51	1.80	2	1
1:A:910:GLU:HG2	1:A:911:LYS:N	0.51	2.20	2	2
1:A:875:ASP:HA	1:A:902:VAL:O	0.51	2.06	15	2
1:A:939:TYR:HA	1:A:942:ARG:HB2	0.51	1.81	15	1
1:A:868:HIS:O	1:A:869:ILE:HB	0.51	2.05	19	2
1:A:713:VAL:HB	1:A:719:CYS:HB2	0.51	1.81	1	4
1:A:741:PRO:HA	1:A:757:TRP:CH2	0.51	2.41	20	5
1:A:827:ILE:HD12	1:A:871:ILE:HB	0.51	1.83	18	2
1:A:785:VAL:HG12	1:A:787:ALA:H	0.51	1.66	9	1
1:A:723:GLU:HG2	1:A:724:THR:N	0.50	2.21	17	1
1:A:831:ASP:CB	1:A:837:ARG:HG2	0.50	2.36	13	1
1:A:886:LEU:O	1:A:890:ILE:HG13	0.50	2.06	10	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:860:ALA:O	1:A:864:LEU:HG	0.50	2.07	12	1
1:A:765:PHE:HE2	1:A:791:LEU:HD22	0.50	1.66	13	1
1:A:890:ILE:HG23	1:A:895:LEU:HD13	0.50	1.83	14	1
1:A:714:ARG:HH12	1:A:751:GLU:HG3	0.50	1.66	19	1
1:A:829:VAL:HG13	1:A:873:LEU:HD12	0.50	1.82	2	1
1:A:752:VAL:HG23	1:A:771:GLY:HA3	0.50	1.82	6	1
1:A:830:VAL:HA	1:A:854:ALA:O	0.50	2.06	12	2
1:A:833:HIS:HB2	1:A:836:ASN:HD21	0.50	1.66	16	1
1:A:765:PHE:HA	1:A:783:HIS:O	0.50	2.05	10	4
1:A:767:ARG:NE	1:A:767:ARG:HA	0.50	2.22	1	1
1:A:828:LEU:HB3	1:A:869:ILE:HD13	0.50	1.84	12	1
1:A:707:LYS:NZ	1:A:799:TYR:OH	0.50	2.44	9	1
1:A:752:VAL:HG13	1:A:772:ILE:HG12	0.50	1.83	10	1
1:A:829:VAL:HB	1:A:837:ARG:CZ	0.50	2.37	13	1
1:A:830:VAL:HG13	1:A:854:ALA:HB3	0.50	1.83	8	1
1:A:875:ASP:HA	1:A:902:VAL:HG13	0.50	1.82	12	1
1:A:941:GLU:O	1:A:945:LYS:HB3	0.50	2.07	16	1
1:A:934:GLN:O	1:A:938:LEU:HB2	0.50	2.06	20	5
1:A:828:LEU:HD12	1:A:852:LYS:HB3	0.50	1.84	17	1
1:A:777:ALA:HB3	1:A:780:GLU:HB2	0.49	1.84	19	3
1:A:831:ASP:OD2	1:A:836:ASN:HB3	0.49	2.07	5	1
1:A:906:ALA:HB3	1:A:909:GLU:HG3	0.49	1.84	8	1
1:A:774:LEU:O	1:A:780:GLU:HB3	0.49	2.08	4	3
1:A:906:ALA:O	1:A:907:LEU:HB2	0.49	2.06	9	1
1:A:791:LEU:N	1:A:792:PRO:HD2	0.49	2.22	1	8
1:A:829:VAL:HG12	1:A:873:LEU:HD11	0.49	1.84	6	3
1:A:774:LEU:HA	1:A:782:VAL:HB	0.49	1.85	9	1
1:A:832:ASP:HB3	1:A:877:ASN:HB3	0.49	1.83	7	1
1:A:938:LEU:O	1:A:942:ARG:HG2	0.49	2.07	20	1
1:A:875:ASP:HB2	1:A:925:LYS:HE2	0.49	1.85	5	1
1:A:751:GLU:HG2	1:A:752:VAL:HG12	0.49	1.84	6	1
1:A:899:VAL:HB	1:A:919:MET:CA	0.49	2.38	3	3
1:A:781:TRP:HZ3	1:A:794:LEU:HD13	0.49	1.67	20	1
1:A:751:GLU:HG3	1:A:752:VAL:H	0.48	1.68	1	2
1:A:925:LYS:N	1:A:926:PRO:HD2	0.48	2.23	4	5
1:A:826:MET:HB2	1:A:869:ILE:HA	0.48	1.85	3	1
1:A:742:THR:CG2	1:A:743:PRO:HD2	0.48	2.38	12	1
1:A:843:GLN:HG2	1:A:932:ILE:HG21	0.48	1.86	20	1
1:A:770:ILE:HG22	1:A:771:GLY:H	0.48	1.68	1	1
1:A:741:PRO:HA	1:A:757:TRP:CZ3	0.48	2.44	16	2
1:A:908:ALA:O	1:A:912:GLN:HB2	0.48	2.08	8	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:726:LEU:HD22	1:A:731:ILE:HD12	0.48	1.85	11	1
1:A:741:PRO:HB3	1:A:757:TRP:CH2	0.48	2.43	12	1
1:A:875:ASP:HA	1:A:902:VAL:HG22	0.48	1.84	16	1
1:A:927:VAL:HG13	1:A:931:VAL:HG12	0.48	1.86	6	1
1:A:912:GLN:O	1:A:916:GLU:HG3	0.48	2.09	18	1
1:A:766:CYS:O	1:A:784:SER:HA	0.48	2.09	14	2
1:A:772:ILE:HG12	1:A:773:PRO:HD2	0.48	1.84	3	1
1:A:747:LEU:HB2	1:A:757:TRP:CD2	0.47	2.44	5	3
1:A:720:GLN:O	1:A:723:GLU:HG3	0.47	2.09	5	1
1:A:864:LEU:HG	1:A:895:LEU:HD11	0.47	1.87	14	1
1:A:913:ARG:HA	1:A:916:GLU:OE2	0.47	2.10	18	1
1:A:941:GLU:HG3	1:A:942:ARG:N	0.47	2.24	6	3
1:A:749:THR:HG21	1:A:753:VAL:HB	0.47	1.87	12	1
1:A:903:THR:HG21	1:A:909:GLU:HG2	0.47	1.85	14	1
1:A:765:PHE:CE2	1:A:791:LEU:HD22	0.47	2.44	13	3
1:A:837:ARG:HA	1:A:837:ARG:NE	0.47	2.23	13	1
1:A:863:VAL:HG13	1:A:869:ILE:HD13	0.47	1.86	1	2
1:A:855:ASN:O	1:A:856:ASP:HB3	0.47	2.09	16	1
1:A:726:LEU:HD11	1:A:795:LEU:HD12	0.47	1.87	9	1
1:A:941:GLU:O	1:A:944:ARG:HG3	0.47	2.10	10	1
1:A:746:VAL:HG21	1:A:795:LEU:HD21	0.47	1.86	11	1
1:A:873:LEU:HD22	1:A:900:ILE:HD12	0.47	1.87	11	1
1:A:828:LEU:HD11	1:A:863:VAL:HG13	0.47	1.87	15	1
1:A:724:THR:O	1:A:728:ARG:HB2	0.47	2.10	17	1
1:A:757:TRP:HB3	1:A:762:VAL:HB	0.47	1.86	2	1
1:A:710:TRP:C	1:A:711:LEU:HD23	0.47	2.35	18	1
1:A:906:ALA:HB3	1:A:909:GLU:CG	0.47	2.40	8	1
1:A:904:ALA:HB2	1:A:925:LYS:HG3	0.47	1.84	10	1
1:A:741:PRO:HG2	1:A:758:GLN:HB2	0.47	1.87	12	1
1:A:707:LYS:HB2	1:A:731:ILE:HG12	0.47	1.87	16	1
1:A:886:LEU:HD13	1:A:887:THR:N	0.47	2.24	9	1
1:A:903:THR:HB	1:A:906:ALA:HB2	0.47	1.86	10	1
1:A:829:VAL:HB	1:A:837:ARG:CD	0.46	2.40	10	2
1:A:708:ARG:HG2	1:A:732:VAL:HG23	0.46	1.87	12	1
1:A:765:PHE:CZ	1:A:791:LEU:HD13	0.46	2.46	13	1
1:A:863:VAL:HA	1:A:866:LYS:HB2	0.46	1.87	15	1
1:A:877:ASN:ND2	1:A:904:ALA:HB3	0.46	2.24	5	1
1:A:829:VAL:HB	1:A:873:LEU:HD12	0.46	1.87	1	1
1:A:826:MET:HG2	1:A:868:HIS:O	0.46	2.11	2	1
1:A:887:THR:O	1:A:890:ILE:HG22	0.46	2.10	3	1
1:A:887:THR:HB	1:A:916:GLU:OE1	0.46	2.10	4	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:752:VAL:CG2	1:A:769:HIS:HA	0.46	2.40	10	1
1:A:844:LEU:HA	1:A:847:LEU:HD23	0.46	1.87	19	1
1:A:718:LEU:HD21	1:A:765:PHE:CD2	0.46	2.45	20	1
1:A:741:PRO:HB2	1:A:758:GLN:O	0.46	2.10	18	1
1:A:757:TRP:CB	1:A:762:VAL:HB	0.46	2.40	5	1
1:A:899:VAL:HB	1:A:919:MET:HB3	0.46	1.87	7	1
1:A:891:ARG:HA	1:A:895:LEU:HD23	0.46	1.86	6	2
1:A:930:ASP:O	1:A:934:GLN:HG2	0.46	2.11	8	1
1:A:707:LYS:CE	1:A:799:TYR:OH	0.46	2.64	9	1
1:A:747:LEU:HB3	1:A:762:VAL:HG23	0.46	1.87	9	2
1:A:711:LEU:HD11	1:A:719:CYS:SG	0.46	2.51	16	1
1:A:831:ASP:OD2	1:A:837:ARG:HB2	0.46	2.11	12	2
1:A:714:ARG:HD2	1:A:750:ASP:OD2	0.46	2.11	8	1
1:A:757:TRP:HA	1:A:757:TRP:CE3	0.46	2.45	9	1
1:A:887:THR:HB	1:A:916:GLU:HB3	0.46	1.88	16	1
1:A:837:ARG:NH2	1:A:853:THR:HB	0.46	2.26	2	1
1:A:781:TRP:CZ3	1:A:794:LEU:HD11	0.46	2.46	9	1
1:A:705:SER:HA	1:A:730:GLY:HA3	0.46	1.87	10	1
1:A:752:VAL:HG11	1:A:771:GLY:H	0.46	1.71	10	1
1:A:864:LEU:HG	1:A:890:ILE:HD11	0.46	1.87	16	1
1:A:747:LEU:HD22	1:A:749:THR:HG23	0.45	1.86	4	1
1:A:724:THR:HA	1:A:727:GLN:CG	0.45	2.40	6	1
1:A:886:LEU:HD13	1:A:887:THR:H	0.45	1.71	9	1
1:A:751:GLU:CD	1:A:769:HIS:HB2	0.45	2.36	15	1
1:A:831:ASP:HB2	1:A:875:ASP:HB2	0.45	1.88	19	1
1:A:765:PHE:CE1	1:A:785:VAL:HB	0.45	2.46	9	1
1:A:934:GLN:HG3	1:A:935:THR:N	0.45	2.26	17	1
1:A:887:THR:HG21	1:A:916:GLU:HB2	0.45	1.88	7	1
1:A:828:LEU:HB2	1:A:869:ILE:HG21	0.45	1.87	6	3
1:A:888:GLN:O	1:A:891:ARG:HG2	0.45	2.11	10	1
1:A:837:ARG:HG3	1:A:853:THR:HG22	0.45	1.88	14	1
1:A:876:VAL:HB	1:A:903:THR:HG23	0.45	1.88	17	1
1:A:787:ALA:N	1:A:788:PRO:HD3	0.45	2.26	9	2
1:A:825:MET:O	1:A:850:GLN:HB2	0.45	2.12	17	2
1:A:774:LEU:HB2	1:A:782:VAL:HG22	0.45	1.88	16	1
1:A:774:LEU:HB3	1:A:782:VAL:HG22	0.45	1.89	15	2
1:A:718:LEU:HD11	1:A:786:ALA:HA	0.45	1.88	7	1
1:A:829:VAL:HB	1:A:853:THR:HG23	0.45	1.88	2	1
1:A:923:LEU:HD11	1:A:935:THR:HG21	0.45	1.87	15	1
1:A:831:ASP:HB3	1:A:837:ARG:HG3	0.45	1.88	18	1
1:A:897:LEU:HD22	1:A:897:LEU:N	0.44	2.26	7	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:711:LEU:O	1:A:711:LEU:HG	0.44	2.12	15	2
1:A:752:VAL:HG22	1:A:771:GLY:H	0.44	1.73	8	1
1:A:891:ARG:HB3	1:A:918:GLY:HA2	0.44	1.88	5	1
1:A:747:LEU:HD12	1:A:757:TRP:CE3	0.44	2.48	9	1
1:A:890:ILE:HG21	1:A:919:MET:HE2	0.44	1.89	7	1
1:A:869:ILE:O	1:A:897:LEU:HD12	0.44	2.12	7	1
1:A:843:GLN:HG3	1:A:929:LEU:CD2	0.44	2.43	16	1
1:A:902:VAL:HA	1:A:923:LEU:O	0.44	2.13	17	2
1:A:829:VAL:HG21	1:A:840:LEU:HD11	0.43	1.90	5	1
1:A:710:TRP:CZ3	1:A:739:GLN:HG3	0.43	2.48	7	1
1:A:713:VAL:HG11	1:A:718:LEU:HB3	0.43	1.88	13	2
1:A:890:ILE:HG12	1:A:895:LEU:HD13	0.43	1.88	12	1
1:A:789:HIS:HA	1:A:792:PRO:HG2	0.43	1.90	15	1
1:A:871:ILE:HG12	1:A:939:TYR:HD2	0.43	1.73	14	1
1:A:788:PRO:O	1:A:789:HIS:HB3	0.43	2.14	8	1
1:A:753:VAL:HG13	1:A:755:LYS:HB2	0.43	1.91	18	1
1:A:838:ARG:C	1:A:838:ARG:HD3	0.43	2.38	18	1
1:A:772:ILE:HG13	1:A:773:PRO:CD	0.43	2.32	1	1
1:A:711:LEU:HD21	1:A:719:CYS:HB2	0.43	1.89	6	1
1:A:718:LEU:HD21	1:A:765:PHE:HD2	0.43	1.74	12	1
1:A:919:MET:HB3	1:A:920:ASP:H	0.43	1.45	13	1
1:A:872:VAL:HG22	1:A:897:LEU:HD12	0.43	1.91	18	1
1:A:789:HIS:CD2	1:A:789:HIS:C	0.43	2.97	5	1
1:A:875:ASP:HB3	1:A:902:VAL:HG22	0.43	1.90	5	1
1:A:722:LEU:HD13	1:A:748:ILE:HG21	0.43	1.91	13	1
1:A:867:ASN:O	1:A:868:HIS:CB	0.43	2.67	19	1
1:A:736:TYR:HE2	1:A:755:LYS:HD3	0.43	1.74	4	1
1:A:751:GLU:HG2	1:A:767:ARG:NH2	0.43	2.20	9	1
1:A:871:ILE:HG13	1:A:898:PRO:HG2	0.43	1.89	15	1
1:A:794:LEU:HA	1:A:797:ARG:HD3	0.43	1.90	18	1
1:A:928:THR:OG1	1:A:931:VAL:HB	0.43	2.14	6	1
1:A:909:GLU:O	1:A:922:CYS:HB2	0.43	2.14	7	1
1:A:903:THR:O	1:A:924:SER:HA	0.42	2.14	2	3
1:A:719:CYS:O	1:A:723:GLU:HB3	0.42	2.14	3	1
1:A:794:LEU:O	1:A:798:ILE:HB	0.42	2.14	7	1
1:A:718:LEU:O	1:A:722:LEU:HG	0.42	2.14	9	1
1:A:877:ASN:CB	1:A:925:LYS:HE3	0.42	2.40	12	1
1:A:715:ASN:HB3	1:A:718:LEU:HB2	0.42	1.90	17	1
1:A:740:GLU:H	1:A:740:GLU:CD	0.42	2.22	17	1
1:A:756:LYS:O	1:A:756:LYS:HD2	0.42	2.13	18	1
1:A:795:LEU:HD22	1:A:795:LEU:HA	0.42	1.75	17	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:774:LEU:HG	1:A:776:LYS:HG2	0.42	1.91	7	1
1:A:797:ARG:HA	1:A:800:LEU:HD13	0.42	1.89	2	1
1:A:718:LEU:HD11	1:A:765:PHE:HD2	0.42	1.73	2	1
1:A:829:VAL:HG21	1:A:840:LEU:HD12	0.42	1.90	3	1
1:A:875:ASP:OD1	1:A:875:ASP:N	0.42	2.52	5	1
1:A:872:VAL:HB	1:A:899:VAL:HG13	0.42	1.91	7	1
1:A:705:SER:CB	1:A:730:GLY:HA3	0.42	2.45	10	1
1:A:711:LEU:HD12	1:A:719:CYS:SG	0.42	2.54	10	1
1:A:847:LEU:HD21	1:A:933:LYS:HG2	0.42	1.90	11	1
1:A:900:ILE:CG2	1:A:923:LEU:HG	0.42	2.45	5	1
1:A:797:ARG:HG3	1:A:798:ILE:N	0.42	2.29	9	1
1:A:861:LEU:HD11	1:A:889:ARG:HB3	0.42	1.92	17	1
1:A:830:VAL:HG11	1:A:860:ALA:HB2	0.42	1.92	8	1
1:A:835:ILE:O	1:A:838:ARG:HG3	0.42	2.15	15	3
1:A:889:ARG:HD3	1:A:892:GLN:OE1	0.42	2.15	5	1
1:A:844:LEU:HD22	1:A:851:CYS:HB3	0.42	1.90	15	1
1:A:945:LYS:HB2	1:A:945:LYS:HE2	0.42	1.37	16	1
1:A:757:TRP:CD1	1:A:762:VAL:HB	0.41	2.49	13	2
1:A:830:VAL:O	1:A:874:SER:HA	0.41	2.15	8	1
1:A:830:VAL:HG13	1:A:874:SER:HA	0.41	1.92	13	1
1:A:790:GLU:H	1:A:790:GLU:CD	0.41	2.23	16	1
1:A:750:ASP:O	1:A:751:GLU:HB2	0.41	2.15	18	1
1:A:774:LEU:CB	1:A:782:VAL:HG22	0.41	2.45	2	1
1:A:828:LEU:HD23	1:A:872:VAL:HG13	0.41	1.91	10	1
1:A:825:MET:O	1:A:849:TYR:HB3	0.41	2.14	12	1
1:A:772:ILE:CG1	1:A:773:PRO:HD2	0.41	2.37	15	1
1:A:707:LYS:HB3	1:A:799:TYR:CE2	0.41	2.50	16	1
1:A:840:LEU:HA	1:A:843:GLN:NE2	0.41	2.29	18	1
1:A:902:VAL:CG2	1:A:925:LYS:HA	0.41	2.46	13	1
1:A:756:LYS:HD2	1:A:756:LYS:C	0.41	2.39	18	1
1:A:768:ARG:HA	1:A:768:ARG:HD2	0.41	1.73	7	1
1:A:707:LYS:HE2	1:A:799:TYR:CE2	0.41	2.50	9	1
1:A:724:THR:O	1:A:728:ARG:HB3	0.41	2.16	11	1
1:A:944:ARG:HG3	1:A:945:LYS:N	0.41	2.29	8	1
1:A:844:LEU:HD13	1:A:849:TYR:HB2	0.41	1.93	10	1
1:A:875:ASP:HB3	1:A:925:LYS:HE3	0.41	1.93	13	1
1:A:887:THR:O	1:A:891:ARG:HG2	0.41	2.15	5	1
1:A:705:SER:HA	1:A:730:GLY:C	0.41	2.41	11	1
1:A:869:ILE:O	1:A:897:LEU:HD22	0.41	2.16	18	1
1:A:934:GLN:HG2	1:A:935:THR:N	0.41	2.29	20	1
1:A:720:GLN:O	1:A:723:GLU:HG2	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:764:THR:HB	1:A:782:VAL:HG22	0.41	1.91	9	1
1:A:931:VAL:O	1:A:934:GLN:HG2	0.41	2.16	11	1
1:A:838:ARG:HG3	1:A:839:LEU:N	0.41	2.30	13	1
1:A:719:CYS:SG	1:A:720:GLN:N	0.41	2.94	14	1
1:A:751:GLU:OE1	1:A:767:ARG:HB2	0.41	2.15	15	1
1:A:711:LEU:HD22	1:A:733:VAL:CG1	0.41	2.46	16	1
1:A:826:MET:HG3	1:A:868:HIS:O	0.41	2.16	16	1
1:A:913:ARG:HG3	1:A:914:CYS:N	0.41	2.30	2	1
1:A:746:VAL:HA	1:A:761:ALA:O	0.41	2.16	10	1
1:A:834:PRO:HA	1:A:837:ARG:HD3	0.41	1.92	18	1
1:A:923:LEU:HD12	1:A:923:LEU:HA	0.40	1.77	18	1
1:A:910:GLU:H	1:A:910:GLU:HG3	0.40	1.52	5	2
1:A:861:LEU:HD21	1:A:893:LEU:HG	0.40	1.93	6	1
1:A:726:LEU:HD23	1:A:731:ILE:HG21	0.40	1.93	9	1
1:A:876:VAL:HG22	1:A:878:MET:H	0.40	1.76	13	1
1:A:913:ARG:NH1	1:A:921:SER:HA	0.40	2.31	4	1
1:A:710:TRP:CZ3	1:A:734:THR:HB	0.40	2.52	15	1
1:A:718:LEU:HG	1:A:787:ALA:HB2	0.40	1.92	15	1
1:A:836:ASN:HB3	1:A:925:LYS:HZ2	0.40	1.74	19	1
1:A:827:ILE:O	1:A:851:CYS:HA	0.40	2.17	9	1
1:A:773:PRO:HB2	1:A:774:LEU:H	0.40	1.59	14	1
1:A:913:ARG:HD2	1:A:913:ARG:O	0.40	2.16	10	1
1:A:756:LYS:O	1:A:757:TRP:HB3	0.40	2.16	18	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	217/254 (85%)	185±3 (85±1%)	23±3 (11±1%)	9±2 (4±1%)	4	29
All	All	4340/5080 (85%)	3705 (85%)	459 (11%)	176 (4%)	4	29

All 36 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	920	ASP	20
1	A	775	GLU	15
1	A	856	ASP	11
1	A	788	PRO	10
1	A	738	GLY	10
1	A	785	VAL	10
1	A	773	PRO	9
1	A	789	HIS	8
1	A	869	ILE	8
1	A	774	LEU	7
1	A	894	GLY	6
1	A	868	HIS	6
1	A	919	MET	6
1	A	926	PRO	5
1	A	706	GLY	5
1	A	757	TRP	4
1	A	884	TYR	3
1	A	907	LEU	3
1	A	771	GLY	3
1	A	730	GLY	3
1	A	824	ASP	3
1	A	770	ILE	3
1	A	867	ASN	2
1	A	768	ARG	2
1	A	769	HIS	2
1	A	834	PRO	2
1	A	779	GLY	1
1	A	778	PRO	1
1	A	905	ASN	1
1	A	767	ARG	1
1	A	948	ASP	1
1	A	878	MET	1
1	A	705	SER	1
1	A	800	LEU	1
1	A	883	GLY	1
1	A	908	ALA	1

6.3.2 Protein sidechains

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

Mol	Chain	Analysed	Rotameric	Outliers	Percentiles	
1	A	189/219 (86%)	99±4 (52±2%)	90±4 (48±2%)	0	2
All	All	3780/4380 (86%)	1974 (52%)	1806 (48%)	0	2

All 170 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	742	THR	20
1	A	747	LEU	20
1	A	791	LEU	20
1	A	798	ILE	20
1	A	844	LEU	20
1	A	851	CYS	20
1	A	902	VAL	20
1	A	755	LYS	19
1	A	795	LEU	19
1	A	829	VAL	19
1	A	852	LYS	19
1	A	853	THR	19
1	A	887	THR	19
1	A	896	THR	19
1	A	903	THR	19
1	A	929	LEU	19
1	A	936	LEU	19
1	A	717	SER	18
1	A	835	ILE	18
1	A	895	LEU	18
1	A	928	THR	18
1	A	734	THR	17
1	A	766	CYS	17
1	A	784	SER	17
1	A	797	ARG	17
1	A	839	LEU	17
1	A	874	SER	17
1	A	886	LEU	17
1	A	915	LEU	17
1	A	922	CYS	17
1	A	718	LEU	17
1	A	735	THR	17
1	A	864	LEU	17
1	A	767	ARG	16
1	A	794	LEU	16
1	A	840	LEU	16

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	897	LEU	16
1	A	932	ILE	16
1	A	944	ARG	16
1	A	732	VAL	15
1	A	768	ARG	15
1	A	785	VAL	15
1	A	790	GLU	15
1	A	917	SER	15
1	A	938	LEU	15
1	A	889	ARG	15
1	A	910	GLU	15
1	A	705	SER	14
1	A	711	LEU	14
1	A	838	ARG	14
1	A	850	GLN	14
1	A	923	LEU	14
1	A	861	LEU	14
1	A	893	LEU	14
1	A	911	LYS	14
1	A	921	SER	14
1	A	737	GLU	13
1	A	754	SER	13
1	A	776	LYS	13
1	A	832	ASP	13
1	A	858	VAL	13
1	A	873	LEU	13
1	A	919	MET	13
1	A	924	SER	13
1	A	925	LYS	13
1	A	941	GLU	13
1	A	720	GLN	13
1	A	876	VAL	13
1	A	847	LEU	12
1	A	885	ARG	12
1	A	758	GLN	12
1	A	723	GLU	12
1	A	729	SER	12
1	A	866	LYS	12
1	A	783	HIS	12
1	A	756	LYS	11
1	A	780	GLU	11
1	A	826	MET	11

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	878	MET	11
1	A	909	GLU	11
1	A	913	ARG	11
1	A	709	CYS	11
1	A	728	ARG	11
1	A	846	SER	11
1	A	945	LYS	11
1	A	947	ARG	11
1	A	825	MET	11
1	A	772	ILE	10
1	A	828	LEU	10
1	A	877	ASN	10
1	A	907	LEU	10
1	A	934	GLN	10
1	A	769	HIS	10
1	A	942	ARG	10
1	A	744	GLU	9
1	A	750	ASP	9
1	A	843	GLN	9
1	A	869	ILE	9
1	A	739	GLN	9
1	A	830	VAL	9
1	A	912	GLN	9
1	A	740	GLU	9
1	A	837	ARG	9
1	A	890	ILE	9
1	A	916	GLU	9
1	A	733	VAL	9
1	A	863	VAL	8
1	A	892	GLN	8
1	A	933	LYS	8
1	A	708	ARG	8
1	A	714	ARG	8
1	A	789	HIS	8
1	A	831	ASP	8
1	A	833	HIS	8
1	A	868	HIS	8
1	A	774	LEU	8
1	A	927	VAL	8
1	A	707	LYS	8
1	A	871	ILE	8
1	A	722	LEU	7

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	867	ASN	7
1	A	884	TYR	7
1	A	855	ASN	7
1	A	875	ASP	7
1	A	891	ARG	7
1	A	870	ASP	7
1	A	799	TYR	6
1	A	865	SER	6
1	A	749	THR	6
1	A	748	ILE	6
1	A	899	VAL	6
1	A	763	VAL	6
1	A	719	CYS	5
1	A	762	VAL	5
1	A	800	LEU	5
1	A	939	TYR	5
1	A	946	SER	5
1	A	827	ILE	5
1	A	836	ASN	5
1	A	930	ASP	5
1	A	727	GLN	5
1	A	872	VAL	5
1	A	905	ASN	5
1	A	948	ASP	5
1	A	859	ASP	4
1	A	900	ILE	4
1	A	760	ARG	4
1	A	782	VAL	4
1	A	746	VAL	3
1	A	849	TYR	3
1	A	753	VAL	3
1	A	751	GLU	3
1	A	842	ASP	3
1	A	752	VAL	3
1	A	775	GLU	3
1	A	770	ILE	2
1	A	888	GLN	2
1	A	731	ILE	2
1	A	931	VAL	2
1	A	726	LEU	2
1	A	715	ASN	2
1	A	862	ASN	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	725	SER	1
1	A	713	VAL	1
1	A	721	PHE	1
1	A	757	TRP	1
1	A	764	THR	1
1	A	765	PHE	1
1	A	824	ASP	1
1	A	920	ASP	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 oligosaccharides in this entry.

6.6 Ligand geometry [i](#)

There are no ligands in this entry.

6.7 Other polymers [i](#)

There are no such molecules in this entry.

6.8 Polymer linkage issues [i](#)

There are no chain breaks in this entry.

7 Chemical shift validation

The completeness of assignment taking into account all chemical shift lists is 90% for the well-defined parts and 88% for the entire structure.

7.1 Chemical shift list 1

File name: working_cs.cif

Chemical shift list name: *assigned_chem_shift_list_1*

7.1.1 Bookkeeping

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	3026
Number of shifts mapped to atoms	3026
Number of unparsed shifts	0
Number of shifts with mapping errors	0
Number of shifts with mapping warnings	0
Number of shift outliers (ShiftChecker)	4

7.1.2 Chemical shift referencing

The following table shows the suggested chemical shift referencing corrections.

Nucleus	# values	Correction $\pm$ precision, ppm	Suggested action
$^{13}\text{C}_\alpha$	250	-0.11 ± 0.12	None needed (< 0.5 ppm)
$^{13}\text{C}_\beta$	234	0.40 ± 0.10	None needed (< 0.5 ppm)
$^{13}\text{C}'$	244	0.00 ± 0.12	None needed (< 0.5 ppm)
^{15}N	230	-0.48 ± 0.18	None needed (< 0.5 ppm)

7.1.3 Completeness of resonance assignments

The following table shows the completeness of the chemical shift assignments for the well-defined regions of the structure. The overall completeness is 90%, i.e. 2705 atoms were assigned a chemical shift out of a possible 3015. 0 out of 49 assigned methyl groups (LEU and VAL) were assigned stereospecifically.

	Total	^1H	^{13}C	^{15}N
Backbone	1065/1080 (99%)	434/438 (99%)	429/434 (99%)	202/208 (97%)
Sidechain	1537/1794 (86%)	1057/1172 (90%)	474/547 (87%)	6/75 (8%)

Continued on next page...

Continued from previous page...

	Total	¹ H	¹³ C	¹⁵ N
Aromatic	103/141 (73%)	52/68 (76%)	47/60 (78%)	4/13 (31%)
Overall	2705/3015 (90%)	1543/1678 (92%)	950/1041 (91%)	212/296 (72%)

The following table shows the completeness of the chemical shift assignments for the full structure. The overall completeness is 88%, i.e. 3026 atoms were assigned a chemical shift out of a possible 3426. 0 out of 53 assigned methyl groups (LEU and VAL) were assigned stereospecifically.

	Total	¹ H	¹³ C	¹⁵ N
Backbone	1218/1263 (96%)	494/513 (96%)	494/508 (97%)	230/242 (95%)
Sidechain	1705/2022 (84%)	1171/1319 (89%)	527/624 (84%)	7/79 (9%)
Aromatic	103/141 (73%)	52/68 (76%)	47/60 (78%)	4/13 (31%)
Overall	3026/3426 (88%)	1717/1900 (90%)	1068/1192 (90%)	241/334 (72%)

7.1.4 Statistically unusual chemical shifts ⓘ

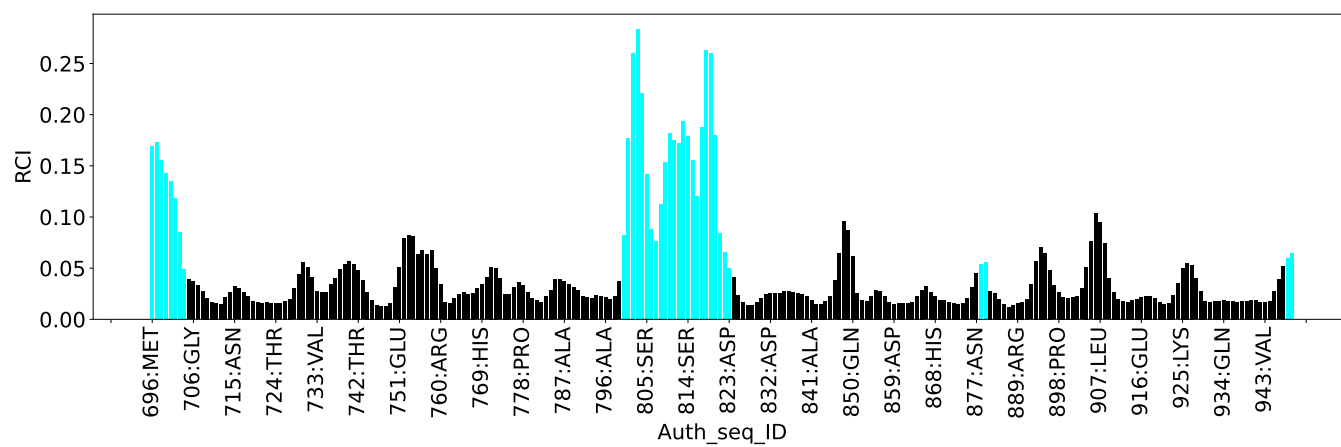
The following table lists the statistically unusual chemical shifts. These are statistical measures, and large deviations from the mean do not necessarily imply incorrect assignments. Molecules containing paramagnetic centres or hemes are expected to give rise to anomalous chemical shifts.

List Id	Chain	Res	Type	Atom	Shift, ppm	Expected range, ppm	Z-score
1	A	775	GLU	HB3	-0.57	0.95 – 3.05	-12.2
1	A	775	GLU	HG3	0.28	1.20 – 3.30	-9.4
1	A	747	LEU	HB3	-1.22	-0.26 – 3.31	-7.7
1	A	741	PRO	HG3	-0.20	0.33 – 3.48	-6.7

7.1.5 Random Coil Index (RCI) plots ⓘ

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	3459
Intra-residue ($ i-j =0$)	370
Sequential ($ i-j =1$)	938
Medium range ($ i-j >1$ and $ i-j <5$)	810
Long range ($ i-j \geq 5$)	1137
Inter-chain	0
Hydrogen bond restraints	204
Disulfide bond restraints	0
Total dihedral-angle restraints	276
Number of unmapped restraints	0
Number of restraints per residue	14.7
Number of long range restraints per residue ¹	4.8

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)	27.3	0.2
0.2-0.5 (Medium)	21.9	0.5
>0.5 (Large)	1.9	1.76

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)	68.5	10.0
10.0-20.0 (Medium)	21.1	19.8
>20.0 (Large)	3.0	26.51

9 Distance violation analysis ⓘ

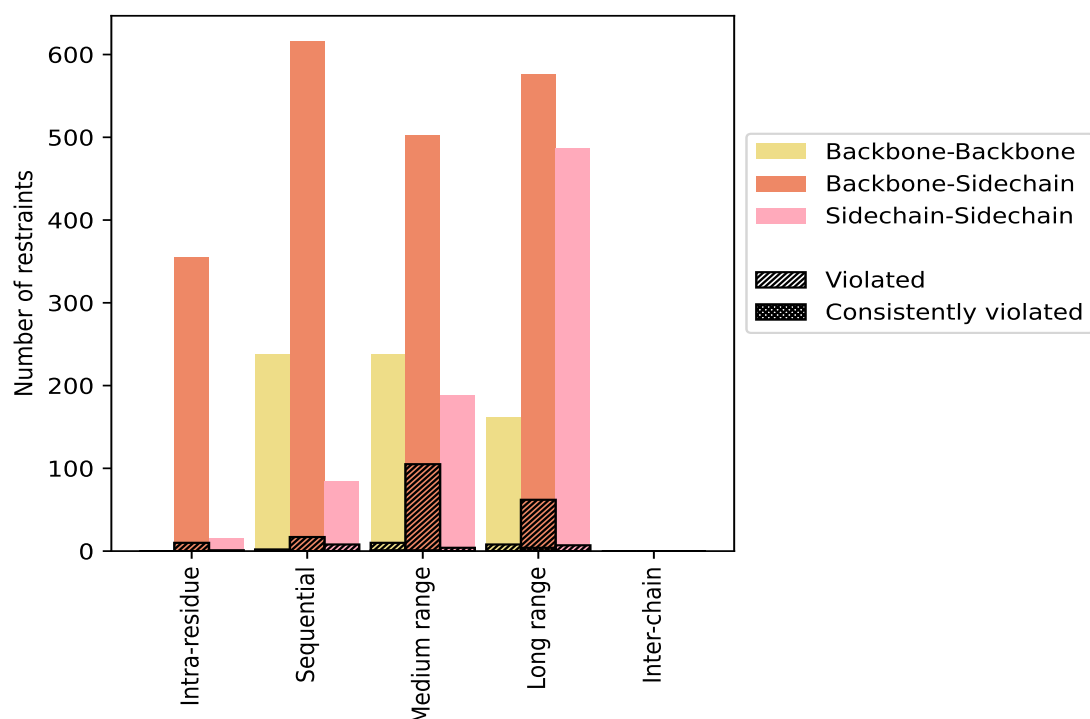
9.1 Summary of distance violations ⓘ

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

Restrains type	Count	% ¹	Violated ³			Consistently Violated ⁴		
			Count	% ²	% ¹	Count	% ²	% ¹
Intra-residue ($i-j =0$)	370	10.7	11	3.0	0.3	0	0.0	0.0
Backbone-Backbone	0	0.0	0	0.0	0.0	0	0.0	0.0
Backbone-Sidechain	355	10.3	10	2.8	0.3	0	0.0	0.0
Sidechain-Sidechain	15	0.4	1	6.7	0.0	0	0.0	0.0
Sequential ($i-j =1$)	938	27.1	27	2.9	0.8	0	0.0	0.0
Backbone-Backbone	238	6.9	2	0.8	0.1	0	0.0	0.0
Backbone-Sidechain	616	17.8	17	2.8	0.5	0	0.0	0.0
Sidechain-Sidechain	84	2.4	8	9.5	0.2	0	0.0	0.0
Medium range ($i-j >1$ & $i-j <5$)	810	23.4	29	3.6	0.8	1	0.1	0.0
Backbone-Backbone	238	6.9	10	4.2	0.3	1	0.4	0.0
Backbone-Sidechain	384	11.1	15	3.9	0.4	0	0.0	0.0
Sidechain-Sidechain	188	5.4	4	2.1	0.1	0	0.0	0.0
Long range ($i-j \geq 5$)	1137	32.9	29	2.6	0.8	0	0.0	0.0
Backbone-Backbone	161	4.7	8	5.0	0.2	0	0.0	0.0
Backbone-Sidechain	492	14.2	16	3.3	0.5	0	0.0	0.0
Sidechain-Sidechain	484	14.0	5	1.0	0.1	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	204	5.9	138	67.6	4.0	5	2.5	0.1
Disulfide bond	0	0.0	0	0.0	0.0	0	0.0	0.0
Total	3459	100.0	234	6.8	6.8	6	0.2	0.2
Backbone-Backbone	637	18.4	20	3.1	0.6	1	0.2	0.0
Backbone-Sidechain	2049	59.2	194	9.5	5.6	5	0.2	0.1
Sidechain-Sidechain	773	22.3	20	2.6	0.6	0	0.0	0.0

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

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



Violated and consistently violated restraints are shown using different hatch patterns in their respective categories. The hydrogen bonds and 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						Mean (Å)	Max (Å)	SD ⁶ (Å)	Median (Å)
	IR ¹	SQ ²	MR ³	LR ⁴	IC ⁵	Total				
1	2	6	28	18	0	54	0.19	0.69	0.1	0.16
2	1	4	30	14	0	49	0.29	1.76	0.33	0.21
3	1	3	33	14	0	51	0.23	1.09	0.16	0.2
4	1	5	28	25	0	59	0.19	0.72	0.09	0.19
5	0	7	32	24	0	63	0.19	0.35	0.06	0.17
6	2	3	30	26	0	61	0.21	1.27	0.19	0.17
7	1	3	31	21	0	56	0.25	1.35	0.23	0.21
8	1	7	28	16	0	52	0.21	1.07	0.15	0.19
9	2	3	29	23	0	57	0.24	1.4	0.22	0.19
10	0	7	30	24	0	61	0.2	0.89	0.11	0.19

Continued on next page...

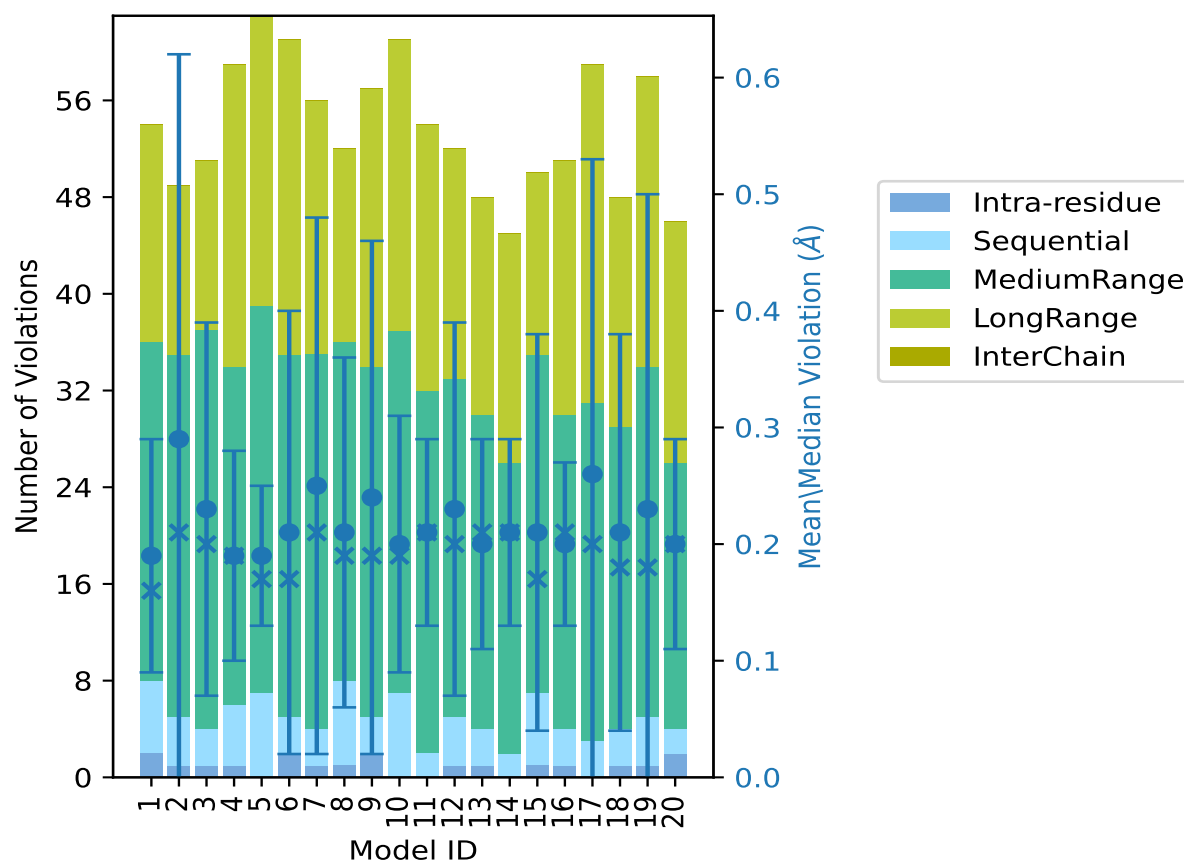
Continued from previous page...

Model ID	Number of violations						Mean (Å)	Max (Å)	SD ⁶ (Å)	Median (Å)
	IR ¹	SQ ²	MR ³	LR ⁴	IC ⁵	Total				
11	0	2	30	22	0	54	0.21	0.51	0.08	0.21
12	1	4	28	19	0	52	0.23	1.14	0.16	0.2
13	1	3	26	18	0	48	0.2	0.67	0.09	0.21
14	0	2	24	19	0	45	0.21	0.52	0.08	0.21
15	1	6	28	15	0	50	0.21	1.11	0.17	0.17
16	1	3	26	21	0	51	0.2	0.51	0.07	0.21
17	0	3	28	28	0	59	0.26	1.58	0.27	0.2
18	1	3	25	19	0	48	0.21	1.24	0.17	0.18
19	1	4	29	24	0	58	0.23	1.6	0.27	0.18
20	2	2	22	20	0	46	0.2	0.71	0.09	0.2

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 ⓘ



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

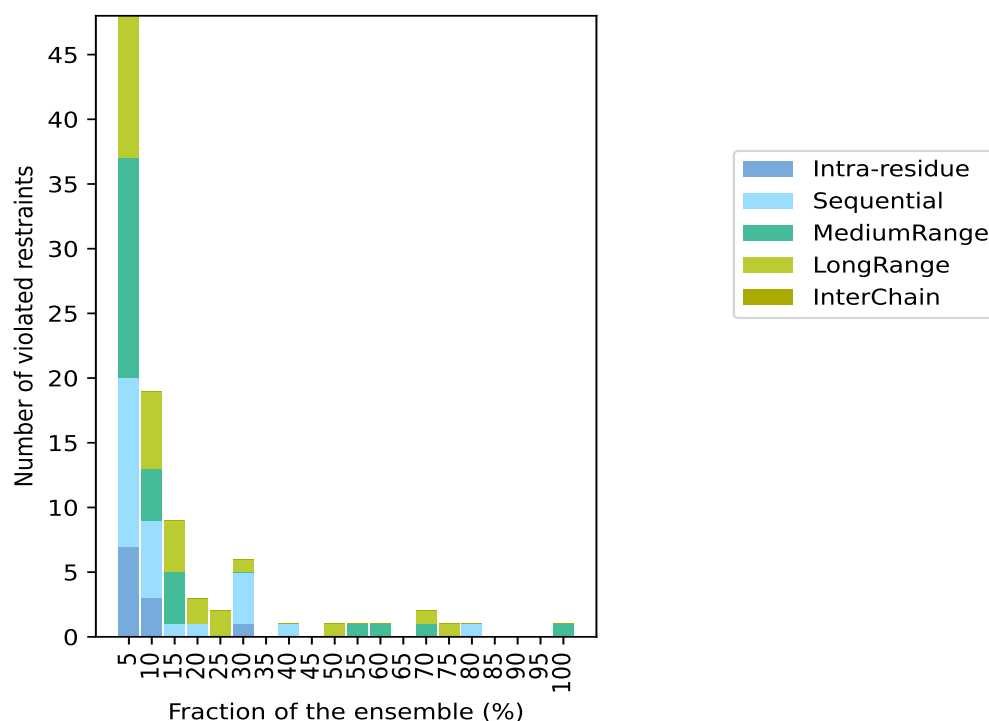
Violation analysis may find that some restraints are violated in few models and some are violated in most of models. The following table provides this information as number of violated restraints for a given fraction of the ensemble. In total, 3159(IR:359, SQ:911, MR:781, LR:1108, IC:0) restraints are 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	%
7	13	17	11	0	48	1	5.0
3	6	4	6	0	19	2	10.0
0	1	4	4	0	9	3	15.0
0	1	0	2	0	3	4	20.0
0	0	0	2	0	2	5	25.0
1	4	0	1	0	6	6	30.0
0	0	0	0	0	0	7	35.0
0	1	0	0	0	1	8	40.0
0	0	0	0	0	0	9	45.0
0	0	0	1	0	1	10	50.0
0	0	1	0	0	1	11	55.0
0	0	1	0	0	1	12	60.0
0	0	0	0	0	0	13	65.0
0	0	1	1	0	2	14	70.0
0	0	0	1	0	1	15	75.0
0	1	0	0	0	1	16	80.0
0	0	0	0	0	0	17	85.0
0	0	0	0	0	0	18	90.0
0	0	0	0	0	0	19	95.0
0	0	1	0	0	1	20	100.0

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

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

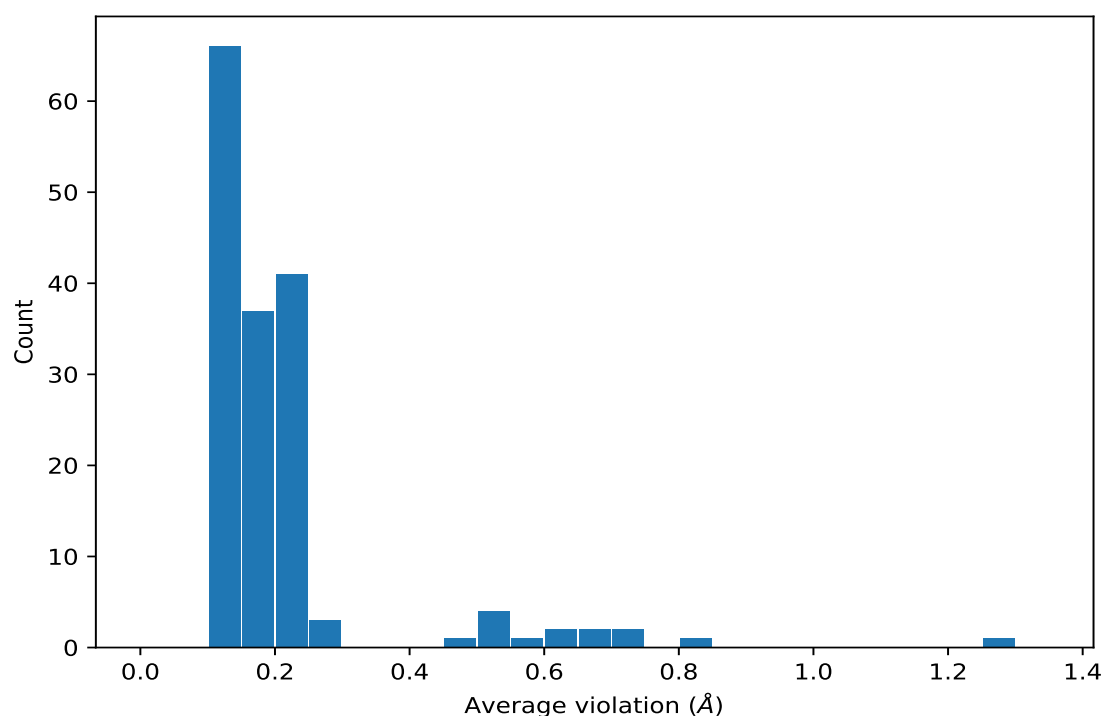
9.3.1 Bar graph : Distance violation statistics for the ensemble [i](#)



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

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

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



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

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

Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)	Median (Å)
(1,147)	1:899:A:VAL:H	1:919:A:MET:O	20	0.28	0.03	0.28
(1,95)	1:835:A:ILE:O	1:839:A:LEU:H	20	0.26	0.04	0.24
(1,125)	1:872:A:VAL:H	1:898:A:PRO:O	20	0.24	0.03	0.24
(1,148)	1:899:A:VAL:N	1:919:A:MET:O	20	0.21	0.03	0.22
(1,126)	1:872:A:VAL:N	1:898:A:PRO:O	20	0.21	0.03	0.2
(2,254)	1:716:A:ALA:H	1:720:A:GLN:H	20	0.16	0.03	0.16
(1,89)	1:831:A:ASP:H	1:854:A:ALA:O	19	0.27	0.03	0.26
(1,197)	1:942:A:ARG:O	1:946:A:SER:H	18	0.23	0.05	0.22
(1,22)	1:717:A:SER:O	1:721:A:PHE:H	18	0.23	0.02	0.22
(1,68)	1:795:A:LEU:O	1:799:A:TYR:H	17	0.22	0.04	0.22
(1,30)	1:721:A:PHE:O	1:725:A:SER:H	17	0.21	0.04	0.21
(1,18)	1:712:A:ALA:O	1:750:A:ASP:H	16	0.24	0.03	0.24
(1,149)	1:899:A:VAL:O	1:921:A:SER:H	16	0.23	0.04	0.24
(1,121)	1:862:A:ASN:O	1:866:A:LYS:H	16	0.22	0.04	0.22
(1,103)	1:839:A:LEU:O	1:843:A:GLN:H	16	0.21	0.05	0.22
(2,956)	1:775:A:GLU:HG2	1:776:A:LYS:H	16	0.16	0.03	0.16

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)	Median (Å)
(3,665)	1:857:A:GLY:HA2	1:886:A:LEU:H	15	0.71	0.38	0.51
(1,91)	1:832:A:ASP:H	1:875:A:ASP:O	15	0.24	0.06	0.23
(1,69)	1:825:A:MET:O	1:850:A:GLN:H	15	0.23	0.05	0.23
(1,111)	1:843:A:GLN:O	1:847:A:LEU:H	15	0.22	0.04	0.22
(1,24)	1:718:A:LEU:O	1:722:A:LEU:H	15	0.2	0.05	0.23
(1,150)	1:899:A:VAL:O	1:921:A:SER:N	15	0.17	0.04	0.16
(2,508)	1:736:A:TYR:HE1	1:738:A:GLY:HA3	14	0.61	0.4	0.51
(2,508)	1:736:A:TYR:HE2	1:738:A:GLY:HA3	14	0.61	0.4	0.51
(1,56)	1:766:A:CYS:H	1:783:A:HIS:O	14	0.23	0.06	0.22
(1,161)	1:910:A:GLU:O	1:914:A:CYS:H	14	0.22	0.04	0.22
(3,347)	1:775:A:GLU:H	1:780:A:GLU:HA	14	0.14	0.02	0.14
(1,21)	1:717:A:SER:O	1:721:A:PHE:N	14	0.13	0.02	0.13
(1,23)	1:718:A:LEU:O	1:722:A:LEU:N	13	0.19	0.04	0.2
(1,29)	1:721:A:PHE:O	1:725:A:SER:N	13	0.14	0.02	0.13
(2,776)	1:759:A:GLY:HA2	1:761:A:ALA:H	12	0.23	0.08	0.23
(1,17)	1:712:A:ALA:O	1:750:A:ASP:N	12	0.16	0.03	0.16
(2,1771)	1:883:A:GLY:HA3	1:886:A:LEU:H	11	0.54	0.34	0.38
(1,189)	1:938:A:LEU:O	1:942:A:ARG:H	11	0.21	0.05	0.21
(1,119)	1:861:A:LEU:O	1:865:A:SER:H	11	0.2	0.04	0.21
(1,117)	1:860:A:ALA:O	1:864:A:LEU:H	11	0.19	0.06	0.19
(1,141)	1:887:A:THR:O	1:891:A:ARG:H	10	0.2	0.05	0.21
(1,104)	1:839:A:LEU:O	1:843:A:GLN:N	10	0.17	0.03	0.16
(1,96)	1:835:A:ILE:O	1:839:A:LEU:N	10	0.16	0.05	0.14
(1,90)	1:831:A:ASP:N	1:854:A:ALA:O	10	0.14	0.02	0.15
(2,936)	1:774:A:LEU:HG	1:781:A:TRP:HA	10	0.12	0.01	0.12
(1,193)	1:940:A:ALA:O	1:944:A:ARG:H	9	0.2	0.05	0.2
(1,99)	1:837:A:ARG:O	1:841:A:ALA:H	9	0.19	0.05	0.21
(1,62)	1:792:A:PRO:O	1:796:A:ALA:H	9	0.19	0.04	0.19
(1,162)	1:910:A:GLU:O	1:914:A:CYS:N	9	0.14	0.03	0.14
(1,71)	1:826:A:MET:O	1:870:A:ASP:H	8	0.22	0.07	0.21
(1,157)	1:908:A:ALA:O	1:912:A:GLN:H	8	0.2	0.04	0.21
(1,109)	1:842:A:ASP:O	1:846:A:SER:H	8	0.2	0.04	0.2
(1,142)	1:887:A:THR:O	1:891:A:ARG:N	8	0.17	0.02	0.18
(2,575)	1:744:A:GLU:HG3	1:745:A:ASP:H	8	0.16	0.05	0.15
(1,203)	1:831:A:ASP:OD1	1:925:A:LYS:HZ3	7	0.85	0.69	0.32
(1,201)	1:944:A:ARG:O	1:948:A:ASP:H	7	0.17	0.05	0.19
(1,195)	1:941:A:GLU:O	1:945:A:LYS:H	6	0.21	0.02	0.21
(1,64)	1:793:A:ALA:O	1:797:A:ARG:H	6	0.2	0.05	0.22
(1,198)	1:942:A:ARG:O	1:946:A:SER:N	6	0.2	0.04	0.21
(2,1141)	1:798:A:ILE:H	1:798:A:ILE:HG12	6	0.19	0.04	0.2
(1,11)	1:711:A:LEU:H	1:734:A:THR:O	6	0.16	0.04	0.16
(2,482)	1:734:A:THR:HA	1:735:A:THR:HB	6	0.15	0.04	0.15

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)	Median (Å)
(2,1448)	1:840:A:LEU:HG	1:841:A:ALA:HA	6	0.14	0.03	0.14
(1,158)	1:908:A:ALA:O	1:912:A:GLN:N	6	0.14	0.03	0.14
(2,1774)	1:884:A:TYR:H	1:885:A:ARG:HD2	6	0.14	0.02	0.14
(2,1005)	1:781:A:TRP:HE3	1:794:A:LEU:HB2	6	0.13	0.04	0.11
(2,585)	1:745:A:ASP:HA	1:746:A:VAL:HB	6	0.12	0.01	0.12
(2,18)	1:706:A:GLY:H	1:730:A:GLY:HA2	5	0.59	0.25	0.71
(3,4)	1:704:A:LEU:HD21	1:730:A:GLY:HA2	5	0.53	0.26	0.47
(3,4)	1:704:A:LEU:HD22	1:730:A:GLY:HA2	5	0.53	0.26	0.47
(3,4)	1:704:A:LEU:HD23	1:730:A:GLY:HA2	5	0.53	0.26	0.47
(1,113)	1:858:A:VAL:O	1:862:A:ASN:H	5	0.22	0.02	0.21
(1,131)	1:874:A:SER:O	1:902:A:VAL:H	5	0.2	0.04	0.2
(1,129)	1:874:A:SER:H	1:900:A:ILE:O	5	0.18	0.04	0.21
(1,163)	1:911:A:LYS:O	1:915:A:LEU:H	5	0.18	0.07	0.14
(1,92)	1:832:A:ASP:N	1:875:A:ASP:O	5	0.16	0.05	0.18
(1,114)	1:858:A:VAL:O	1:862:A:ASN:N	5	0.13	0.03	0.11
(1,70)	1:825:A:MET:O	1:850:A:GLN:N	5	0.12	0.02	0.11
(1,204)	1:831:A:ASP:OD1	1:925:A:LYS:NZ	4	1.27	0.66	1.59
(1,199)	1:943:A:VAL:O	1:947:A:ARG:H	4	0.22	0.04	0.22
(1,2)	1:707:A:LYS:O	1:732:A:VAL:H	4	0.22	0.05	0.22
(1,143)	1:888:A:GLN:O	1:892:A:GLN:H	4	0.21	0.04	0.21
(1,101)	1:838:A:ARG:O	1:842:A:ASP:H	4	0.21	0.02	0.22
(1,8)	1:710:A:TRP:H	1:746:A:VAL:O	4	0.19	0.04	0.18
(1,72)	1:826:A:MET:O	1:870:A:ASP:N	4	0.18	0.04	0.18
(1,54)	1:764:A:THR:O	1:783:A:HIS:H	4	0.17	0.05	0.17
(1,63)	1:793:A:ALA:O	1:797:A:ARG:N	4	0.16	0.04	0.16
(1,32)	1:722:A:LEU:O	1:726:A:LEU:H	4	0.16	0.05	0.16
(1,139)	1:886:A:LEU:O	1:890:A:ILE:H	4	0.15	0.03	0.15
(1,77)	1:828:A:LEU:H	1:871:A:ILE:O	4	0.14	0.05	0.12
(3,58)	1:711:A:LEU:HG	1:734:A:THR:H	4	0.13	0.01	0.12
(2,1304)	1:828:A:LEU:HB3	1:852:A:LYS:H	4	0.13	0.03	0.11
(2,2009)	1:922:A:CYS:HA	1:923:A:LEU:HB3	4	0.11	0.0	0.11
(2,16)	1:705:A:SER:HB2	1:730:A:GLY:HA2	3	0.7	0.33	0.8
(2,16)	1:705:A:SER:HB3	1:730:A:GLY:HA2	3	0.7	0.33	0.8
(2,759)	1:757:A:TRP:HD1	1:759:A:GLY:HA2	3	0.46	0.25	0.63
(2,1096)	1:794:A:LEU:HD11	1:798:A:ILE:H	3	0.18	0.04	0.17
(2,1096)	1:794:A:LEU:HD12	1:798:A:ILE:H	3	0.18	0.04	0.17
(2,1096)	1:794:A:LEU:HD13	1:798:A:ILE:H	3	0.18	0.04	0.17
(1,83)	1:829:A:VAL:O	1:854:A:ALA:H	3	0.17	0.04	0.16
(2,1922)	1:903:A:THR:HB	1:906:A:ALA:HB1	3	0.15	0.01	0.16
(2,1922)	1:903:A:THR:HB	1:906:A:ALA:HB2	3	0.15	0.01	0.16
(2,1922)	1:903:A:THR:HB	1:906:A:ALA:HB3	3	0.15	0.01	0.16
(1,190)	1:938:A:LEU:O	1:942:A:ARG:N	3	0.15	0.03	0.15

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)	Median (Å)
(2,1230)	1:824:A:ASP:H	1:825:A:MET:H	3	0.14	0.05	0.11
(1,85)	1:830:A:VAL:H	1:873:A:LEU:O	3	0.14	0.06	0.1
(1,38)	1:747:A:LEU:H	1:761:A:ALA:O	3	0.14	0.02	0.13
(3,356)	1:775:A:GLU:HG3	1:779:A:GLY:H	3	0.13	0.02	0.12
(2,692)	1:749:A:THR:HG21	1:764:A:THR:HB	3	0.12	0.02	0.13
(2,692)	1:749:A:THR:HG22	1:764:A:THR:HB	3	0.12	0.02	0.13
(2,692)	1:749:A:THR:HG23	1:764:A:THR:HB	3	0.12	0.02	0.13
(3,269)	1:752:A:VAL:HB	1:770:A:ILE:HA	3	0.11	0.01	0.11
(1,12)	1:711:A:LEU:N	1:734:A:THR:O	3	0.11	0.0	0.11
(3,540)	1:831:A:ASP:HA	1:856:A:ASP:H	3	0.11	0.0	0.11
(2,1497)	1:845:A:GLY:HA3	1:848:A:GLY:H	2	0.74	0.09	0.74
(1,115)	1:859:A:ASP:O	1:863:A:VAL:H	2	0.22	0.02	0.22
(2,1399)	1:837:A:ARG:HA	1:837:A:ARG:HG3	2	0.22	0.12	0.22
(1,167)	1:913:A:ARG:O	1:917:A:SER:H	2	0.22	0.01	0.22
(1,165)	1:912:A:GLN:O	1:916:A:GLU:H	2	0.21	0.01	0.21
(1,137)	1:885:A:ARG:O	1:889:A:ARG:H	2	0.2	0.03	0.2
(1,179)	1:933:A:LYS:O	1:937:A:THR:H	2	0.2	0.0	0.2
(2,1193)	1:802:A:GLU:HA	1:803:A:MET:H	2	0.2	0.04	0.2
(1,87)	1:830:A:VAL:O	1:875:A:ASP:H	2	0.19	0.05	0.19
(1,93)	1:834:A:PRO:O	1:838:A:ARG:H	2	0.18	0.02	0.18
(1,116)	1:859:A:ASP:O	1:863:A:VAL:N	2	0.18	0.01	0.18
(1,123)	1:863:A:VAL:O	1:867:A:ASN:H	2	0.18	0.02	0.18
(1,169)	1:928:A:THR:O	1:932:A:ILE:H	2	0.18	0.03	0.18
(1,183)	1:935:A:THR:O	1:939:A:TYR:H	2	0.18	0.04	0.18
(1,166)	1:912:A:GLN:O	1:916:A:GLU:N	2	0.16	0.01	0.16
(1,34)	1:723:A:GLU:O	1:727:A:GLN:H	2	0.16	0.03	0.16
(1,97)	1:836:A:ASN:O	1:840:A:LEU:H	2	0.16	0.04	0.16
(1,67)	1:795:A:LEU:O	1:799:A:TYR:N	2	0.16	0.02	0.16
(2,134)	1:711:A:LEU:H	1:711:A:LEU:HG	2	0.15	0.03	0.15
(1,194)	1:940:A:ALA:O	1:944:A:ARG:N	2	0.15	0.03	0.15
(3,386)	1:787:A:ALA:H	1:791:A:LEU:H	2	0.15	0.02	0.15
(1,61)	1:792:A:PRO:O	1:796:A:ALA:N	2	0.14	0.01	0.14
(1,187)	1:937:A:THR:O	1:941:A:GLU:H	2	0.14	0.01	0.14
(2,708)	1:751:A:GLU:HG3	1:752:A:VAL:HG21	2	0.14	0.03	0.14
(2,708)	1:751:A:GLU:HG3	1:752:A:VAL:HG22	2	0.14	0.03	0.14
(2,708)	1:751:A:GLU:HG3	1:752:A:VAL:HG23	2	0.14	0.03	0.14
(2,1014)	1:782:A:VAL:HG21	1:783:A:HIS:HD2	2	0.14	0.04	0.14
(2,1014)	1:782:A:VAL:HG22	1:783:A:HIS:HD2	2	0.14	0.04	0.14
(2,1014)	1:782:A:VAL:HG23	1:783:A:HIS:HD2	2	0.14	0.04	0.14
(2,1176)	1:801:A:ILE:H	1:803:A:MET:H	2	0.14	0.01	0.14
(1,110)	1:842:A:ASP:O	1:846:A:SER:N	2	0.14	0.01	0.14
(2,166)	1:711:A:LEU:HD21	1:736:A:TYR:H	2	0.14	0.04	0.14

Continued on next page...

Continued from previous page...

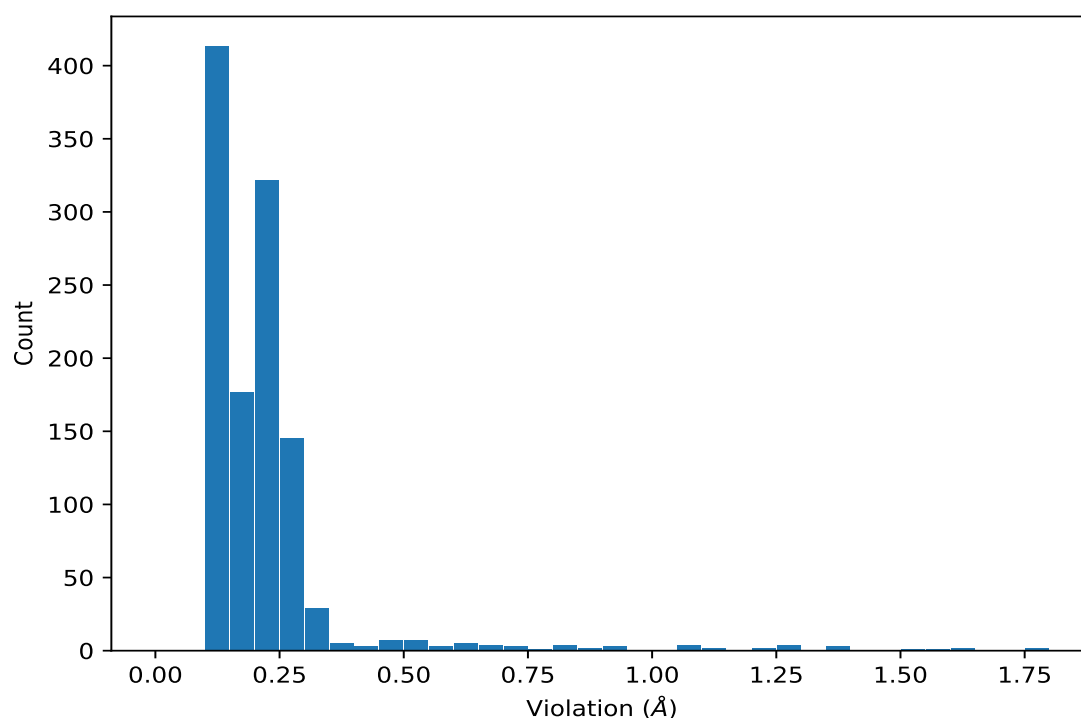
Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)	Median (Å)
(2,166)	1:711:A:LEU:HD22	1:736:A:TYR:H	2	0.14	0.04	0.14
(2,166)	1:711:A:LEU:HD23	1:736:A:TYR:H	2	0.14	0.04	0.14
(2,686)	1:749:A:THR:HB	1:753:A:VAL:HB	2	0.14	0.02	0.14
(1,155)	1:903:A:THR:H	1:923:A:LEU:O	2	0.13	0.03	0.13
(1,84)	1:829:A:VAL:O	1:854:A:ALA:N	2	0.12	0.02	0.12
(2,1239)	1:825:A:MET:H	1:849:A:TYR:HA	2	0.12	0.02	0.12
(2,23)	1:707:A:LYS:H	1:707:A:LYS:HG3	2	0.12	0.02	0.12
(1,55)	1:766:A:CYS:N	1:783:A:HIS:O	2	0.12	0.01	0.12
(1,135)	1:884:A:TYR:O	1:888:A:GLN:H	2	0.12	0.01	0.12
(3,381)	1:783:A:HIS:HD2	1:784:A:SER:HB3	2	0.12	0.02	0.12
(3,264)	1:750:A:ASP:HB3	1:765:A:PHE:H	2	0.12	0.0	0.12
(1,180)	1:933:A:LYS:O	1:937:A:THR:N	2	0.11	0.0	0.11
(3,197)	1:742:A:THR:HA	1:760:A:ARG:H	2	0.11	0.0	0.11
(3,702)	1:864:A:LEU:HG	1:865:A:SER:HA	2	0.11	0.0	0.11
(2,930)	1:774:A:LEU:HB3	1:782:A:VAL:HB	2	0.11	0.0	0.11
(3,327)	1:765:A:PHE:HB2	1:784:A:SER:HA	2	0.11	0.0	0.11
(1,7)	1:710:A:TRP:N	1:746:A:VAL:O	2	0.1	0.0	0.1
(2,1139)	1:797:A:ARG:HD2	1:798:A:ILE:HB	2	0.1	0.0	0.1
(2,1139)	1:797:A:ARG:HD3	1:798:A:ILE:HB	2	0.1	0.0	0.1

¹Number of violated models, ²Standard deviation

9.5 All violated distance restraints ⓘ

9.5.1 Histogram : Distribution of distance violations ⓘ

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



9.5.2 Table : All distance violations [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)
(1,203)	1:831:A:ASP:OD1	1:925:A:LYS:HZ3	2	1.76
(1,204)	1:831:A:ASP:OD1	1:925:A:LYS:NZ	2	1.75
(1,204)	1:831:A:ASP:OD1	1:925:A:LYS:NZ	19	1.6
(1,203)	1:831:A:ASP:OD1	1:925:A:LYS:HZ3	19	1.6
(1,204)	1:831:A:ASP:OD1	1:925:A:LYS:NZ	17	1.58
(1,203)	1:831:A:ASP:OD1	1:925:A:LYS:HZ3	17	1.54
(2,508)	1:736:A:TYR:HE1	1:738:A:GLY:HA3	9	1.4
(2,508)	1:736:A:TYR:HE2	1:738:A:GLY:HA3	9	1.4
(3,665)	1:857:A:GLY:HA2	1:886:A:LEU:H	7	1.35
(2,508)	1:736:A:TYR:HE1	1:738:A:GLY:HA3	6	1.27
(2,508)	1:736:A:TYR:HE2	1:738:A:GLY:HA3	6	1.27
(2,508)	1:736:A:TYR:HE1	1:738:A:GLY:HA3	7	1.26
(2,508)	1:736:A:TYR:HE2	1:738:A:GLY:HA3	7	1.26
(3,665)	1:857:A:GLY:HA2	1:886:A:LEU:H	18	1.24
(2,1771)	1:883:A:GLY:HA3	1:886:A:LEU:H	9	1.24
(3,665)	1:857:A:GLY:HA2	1:886:A:LEU:H	12	1.14

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,665)	1:857:A:GLY:HA2	1:886:A:LEU:H	15	1.11
(2,1771)	1:883:A:GLY:HA3	1:886:A:LEU:H	3	1.09
(3,665)	1:857:A:GLY:HA2	1:886:A:LEU:H	8	1.07
(2,16)	1:705:A:SER:HB2	1:730:A:GLY:HA2	6	1.05
(2,16)	1:705:A:SER:HB3	1:730:A:GLY:HA2	6	1.05
(3,4)	1:704:A:LEU:HD21	1:730:A:GLY:HA2	2	0.94
(3,4)	1:704:A:LEU:HD22	1:730:A:GLY:HA2	2	0.94
(3,4)	1:704:A:LEU:HD23	1:730:A:GLY:HA2	2	0.94
(3,665)	1:857:A:GLY:HA2	1:886:A:LEU:H	10	0.89
(2,18)	1:706:A:GLY:H	1:730:A:GLY:HA2	7	0.88
(2,1497)	1:845:A:GLY:HA3	1:848:A:GLY:H	3	0.84
(2,1771)	1:883:A:GLY:HA3	1:886:A:LEU:H	17	0.81
(2,16)	1:705:A:SER:HB2	1:730:A:GLY:HA2	17	0.8
(2,16)	1:705:A:SER:HB3	1:730:A:GLY:HA2	17	0.8
(2,18)	1:706:A:GLY:H	1:730:A:GLY:HA2	15	0.78
(2,508)	1:736:A:TYR:HE1	1:738:A:GLY:HA3	4	0.72
(2,508)	1:736:A:TYR:HE2	1:738:A:GLY:HA3	4	0.72
(2,18)	1:706:A:GLY:H	1:730:A:GLY:HA2	20	0.71
(2,508)	1:736:A:TYR:HE1	1:738:A:GLY:HA3	1	0.69
(2,508)	1:736:A:TYR:HE2	1:738:A:GLY:HA3	1	0.69
(3,665)	1:857:A:GLY:HA2	1:886:A:LEU:H	13	0.67
(2,1497)	1:845:A:GLY:HA3	1:848:A:GLY:H	12	0.65
(2,759)	1:757:A:TRP:HD1	1:759:A:GLY:HA2	8	0.64
(3,4)	1:704:A:LEU:HD21	1:730:A:GLY:HA2	9	0.63
(3,4)	1:704:A:LEU:HD22	1:730:A:GLY:HA2	9	0.63
(3,4)	1:704:A:LEU:HD23	1:730:A:GLY:HA2	9	0.63
(2,759)	1:757:A:TRP:HD1	1:759:A:GLY:HA2	15	0.63
(2,1771)	1:883:A:GLY:HA3	1:886:A:LEU:H	12	0.6
(2,508)	1:736:A:TYR:HE1	1:738:A:GLY:HA3	18	0.6
(2,508)	1:736:A:TYR:HE2	1:738:A:GLY:HA3	18	0.6
(2,508)	1:736:A:TYR:HE1	1:738:A:GLY:HA3	14	0.52
(2,508)	1:736:A:TYR:HE2	1:738:A:GLY:HA3	14	0.52
(3,665)	1:857:A:GLY:HA2	1:886:A:LEU:H	2	0.51
(3,665)	1:857:A:GLY:HA2	1:886:A:LEU:H	11	0.51
(3,665)	1:857:A:GLY:HA2	1:886:A:LEU:H	16	0.51
(2,508)	1:736:A:TYR:HE1	1:738:A:GLY:HA3	11	0.5
(2,508)	1:736:A:TYR:HE2	1:738:A:GLY:HA3	11	0.5
(3,665)	1:857:A:GLY:HA2	1:886:A:LEU:H	1	0.48
(3,4)	1:704:A:LEU:HD21	1:730:A:GLY:HA2	19	0.47
(3,4)	1:704:A:LEU:HD22	1:730:A:GLY:HA2	19	0.47
(3,4)	1:704:A:LEU:HD23	1:730:A:GLY:HA2	19	0.47
(3,4)	1:704:A:LEU:HD21	1:730:A:GLY:HA2	11	0.46

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,4)	1:704:A:LEU:HD22	1:730:A:GLY:HA2	11	0.46
(3,4)	1:704:A:LEU:HD23	1:730:A:GLY:HA2	11	0.46
(2,508)	1:736:A:TYR:HE1	1:738:A:GLY:HA3	2	0.44
(2,508)	1:736:A:TYR:HE2	1:738:A:GLY:HA3	2	0.44
(2,1771)	1:883:A:GLY:HA3	1:886:A:LEU:H	14	0.42
(3,665)	1:857:A:GLY:HA2	1:886:A:LEU:H	6	0.38
(2,1771)	1:883:A:GLY:HA3	1:886:A:LEU:H	2	0.38
(2,1771)	1:883:A:GLY:HA3	1:886:A:LEU:H	4	0.36
(2,1771)	1:883:A:GLY:HA3	1:886:A:LEU:H	10	0.36
(1,95)	1:835:A:ILE:O	1:839:A:LEU:H	12	0.36
(3,665)	1:857:A:GLY:HA2	1:886:A:LEU:H	5	0.35
(2,776)	1:759:A:GLY:HA2	1:761:A:ALA:H	3	0.35
(1,117)	1:860:A:ALA:O	1:864:A:LEU:H	1	0.35
(1,91)	1:832:A:ASP:H	1:875:A:ASP:O	14	0.35
(1,89)	1:831:A:ASP:H	1:854:A:ALA:O	17	0.35
(1,71)	1:826:A:MET:O	1:870:A:ASP:H	8	0.35
(2,1572)	1:857:A:GLY:HA2	1:886:A:LEU:HG	7	0.34
(2,1399)	1:837:A:ARG:HA	1:837:A:ARG:HG3	13	0.34
(2,18)	1:706:A:GLY:H	1:730:A:GLY:HA2	10	0.34
(1,147)	1:899:A:VAL:H	1:919:A:MET:O	10	0.34
(1,95)	1:835:A:ILE:O	1:839:A:LEU:H	19	0.34
(1,91)	1:832:A:ASP:H	1:875:A:ASP:O	17	0.34
(1,89)	1:831:A:ASP:H	1:854:A:ALA:O	14	0.33
(2,776)	1:759:A:GLY:HA2	1:761:A:ALA:H	9	0.32
(1,203)	1:831:A:ASP:OD1	1:925:A:LYS:HZ3	8	0.32
(1,197)	1:942:A:ARG:O	1:946:A:SER:H	6	0.32
(1,147)	1:899:A:VAL:H	1:919:A:MET:O	14	0.32
(1,95)	1:835:A:ILE:O	1:839:A:LEU:H	11	0.32
(1,89)	1:831:A:ASP:H	1:854:A:ALA:O	4	0.32
(1,69)	1:825:A:MET:O	1:850:A:GLN:H	2	0.32
(2,1771)	1:883:A:GLY:HA3	1:886:A:LEU:H	5	0.31
(1,197)	1:942:A:ARG:O	1:946:A:SER:H	1	0.31
(1,147)	1:899:A:VAL:H	1:919:A:MET:O	3	0.31
(1,147)	1:899:A:VAL:H	1:919:A:MET:O	12	0.31
(1,95)	1:835:A:ILE:O	1:839:A:LEU:H	16	0.31
(1,89)	1:831:A:ASP:H	1:854:A:ALA:O	11	0.31
(1,69)	1:825:A:MET:O	1:850:A:GLN:H	7	0.31
(1,56)	1:766:A:CYS:H	1:783:A:HIS:O	2	0.31
(1,56)	1:766:A:CYS:H	1:783:A:HIS:O	13	0.31
(2,776)	1:759:A:GLY:HA2	1:761:A:ALA:H	5	0.3
(2,776)	1:759:A:GLY:HA2	1:761:A:ALA:H	7	0.3
(2,776)	1:759:A:GLY:HA2	1:761:A:ALA:H	12	0.3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,147)	1:899:A:VAL:H	1:919:A:MET:O	16	0.3
(1,147)	1:899:A:VAL:H	1:919:A:MET:O	17	0.3
(1,103)	1:839:A:LEU:O	1:843:A:GLN:H	10	0.3
(1,56)	1:766:A:CYS:H	1:783:A:HIS:O	3	0.3
(1,193)	1:940:A:ALA:O	1:944:A:ARG:H	17	0.29
(1,189)	1:938:A:LEU:O	1:942:A:ARG:H	6	0.29
(1,189)	1:938:A:LEU:O	1:942:A:ARG:H	8	0.29
(1,149)	1:899:A:VAL:O	1:921:A:SER:H	20	0.29
(1,147)	1:899:A:VAL:H	1:919:A:MET:O	6	0.29
(1,125)	1:872:A:VAL:H	1:898:A:PRO:O	8	0.29
(1,91)	1:832:A:ASP:H	1:875:A:ASP:O	5	0.29
(1,89)	1:831:A:ASP:H	1:854:A:ALA:O	1	0.29
(1,68)	1:795:A:LEU:O	1:799:A:TYR:H	7	0.29
(1,68)	1:795:A:LEU:O	1:799:A:TYR:H	9	0.29
(1,18)	1:712:A:ALA:O	1:750:A:ASP:H	17	0.29
(1,2)	1:707:A:LYS:O	1:732:A:VAL:H	7	0.29
(2,508)	1:736:A:TYR:HE1	1:738:A:GLY:HA3	8	0.28
(2,508)	1:736:A:TYR:HE2	1:738:A:GLY:HA3	8	0.28
(1,203)	1:831:A:ASP:OD1	1:925:A:LYS:HZ3	13	0.28
(1,163)	1:911:A:LYS:O	1:915:A:LEU:H	12	0.28
(1,161)	1:910:A:GLU:O	1:914:A:CYS:H	7	0.28
(1,161)	1:910:A:GLU:O	1:914:A:CYS:H	8	0.28
(1,157)	1:908:A:ALA:O	1:912:A:GLN:H	14	0.28
(1,149)	1:899:A:VAL:O	1:921:A:SER:H	9	0.28
(1,147)	1:899:A:VAL:H	1:919:A:MET:O	1	0.28
(1,147)	1:899:A:VAL:H	1:919:A:MET:O	8	0.28
(1,147)	1:899:A:VAL:H	1:919:A:MET:O	19	0.28
(1,95)	1:835:A:ILE:O	1:839:A:LEU:H	3	0.28
(1,91)	1:832:A:ASP:H	1:875:A:ASP:O	10	0.28
(1,89)	1:831:A:ASP:H	1:854:A:ALA:O	7	0.28
(1,69)	1:825:A:MET:O	1:850:A:GLN:H	1	0.28
(1,56)	1:766:A:CYS:H	1:783:A:HIS:O	11	0.28
(1,18)	1:712:A:ALA:O	1:750:A:ASP:H	1	0.28
(1,18)	1:712:A:ALA:O	1:750:A:ASP:H	3	0.28
(2,1771)	1:883:A:GLY:HA3	1:886:A:LEU:H	20	0.27
(2,508)	1:736:A:TYR:HE1	1:738:A:GLY:HA3	10	0.27
(2,508)	1:736:A:TYR:HE2	1:738:A:GLY:HA3	10	0.27
(1,199)	1:943:A:VAL:O	1:947:A:ARG:H	11	0.27
(1,197)	1:942:A:ARG:O	1:946:A:SER:H	3	0.27
(1,197)	1:942:A:ARG:O	1:946:A:SER:H	7	0.27
(1,197)	1:942:A:ARG:O	1:946:A:SER:H	19	0.27
(1,147)	1:899:A:VAL:H	1:919:A:MET:O	5	0.27

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,147)	1:899:A:VAL:H	1:919:A:MET:O	7	0.27
(1,147)	1:899:A:VAL:H	1:919:A:MET:O	9	0.27
(1,147)	1:899:A:VAL:H	1:919:A:MET:O	11	0.27
(1,147)	1:899:A:VAL:H	1:919:A:MET:O	13	0.27
(1,147)	1:899:A:VAL:H	1:919:A:MET:O	15	0.27
(1,143)	1:888:A:GLN:O	1:892:A:GLN:H	3	0.27
(1,125)	1:872:A:VAL:H	1:898:A:PRO:O	1	0.27
(1,125)	1:872:A:VAL:H	1:898:A:PRO:O	7	0.27
(1,121)	1:862:A:ASN:O	1:866:A:LYS:H	8	0.27
(1,121)	1:862:A:ASN:O	1:866:A:LYS:H	12	0.27
(1,113)	1:858:A:VAL:O	1:862:A:ASN:H	4	0.27
(1,111)	1:843:A:GLN:O	1:847:A:LEU:H	13	0.27
(1,95)	1:835:A:ILE:O	1:839:A:LEU:H	7	0.27
(1,89)	1:831:A:ASP:H	1:854:A:ALA:O	5	0.27
(1,89)	1:831:A:ASP:H	1:854:A:ALA:O	20	0.27
(1,71)	1:826:A:MET:O	1:870:A:ASP:H	9	0.27
(1,24)	1:718:A:LEU:O	1:722:A:LEU:H	3	0.27
(1,22)	1:717:A:SER:O	1:721:A:PHE:H	5	0.27
(1,18)	1:712:A:ALA:O	1:750:A:ASP:H	11	0.27
(1,18)	1:712:A:ALA:O	1:750:A:ASP:H	12	0.27
(2,575)	1:744:A:GLU:HG3	1:745:A:ASP:H	19	0.26
(2,508)	1:736:A:TYR:HE1	1:738:A:GLY:HA3	16	0.26
(2,508)	1:736:A:TYR:HE2	1:738:A:GLY:HA3	16	0.26
(2,18)	1:706:A:GLY:H	1:730:A:GLY:HA2	19	0.26
(1,197)	1:942:A:ARG:O	1:946:A:SER:H	14	0.26
(1,149)	1:899:A:VAL:O	1:921:A:SER:H	4	0.26
(1,149)	1:899:A:VAL:O	1:921:A:SER:H	11	0.26
(1,149)	1:899:A:VAL:O	1:921:A:SER:H	14	0.26
(1,147)	1:899:A:VAL:H	1:919:A:MET:O	2	0.26
(1,147)	1:899:A:VAL:H	1:919:A:MET:O	4	0.26
(1,147)	1:899:A:VAL:H	1:919:A:MET:O	18	0.26
(1,126)	1:872:A:VAL:N	1:898:A:PRO:O	8	0.26
(1,125)	1:872:A:VAL:H	1:898:A:PRO:O	4	0.26
(1,125)	1:872:A:VAL:H	1:898:A:PRO:O	16	0.26
(1,125)	1:872:A:VAL:H	1:898:A:PRO:O	19	0.26
(1,121)	1:862:A:ASN:O	1:866:A:LYS:H	7	0.26
(1,119)	1:861:A:LEU:O	1:865:A:SER:H	1	0.26
(1,111)	1:843:A:GLN:O	1:847:A:LEU:H	9	0.26
(1,109)	1:842:A:ASP:O	1:846:A:SER:H	12	0.26
(1,103)	1:839:A:LEU:O	1:843:A:GLN:H	13	0.26
(1,95)	1:835:A:ILE:O	1:839:A:LEU:H	1	0.26
(1,95)	1:835:A:ILE:O	1:839:A:LEU:H	15	0.26

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,89)	1:831:A:ASP:H	1:854:A:ALA:O	3	0.26
(1,89)	1:831:A:ASP:H	1:854:A:ALA:O	8	0.26
(1,89)	1:831:A:ASP:H	1:854:A:ALA:O	10	0.26
(1,89)	1:831:A:ASP:H	1:854:A:ALA:O	15	0.26
(1,89)	1:831:A:ASP:H	1:854:A:ALA:O	16	0.26
(1,69)	1:825:A:MET:O	1:850:A:GLN:H	17	0.26
(1,68)	1:795:A:LEU:O	1:799:A:TYR:H	5	0.26
(1,64)	1:793:A:ALA:O	1:797:A:ARG:H	2	0.26
(1,30)	1:721:A:PHE:O	1:725:A:SER:H	9	0.26
(1,30)	1:721:A:PHE:O	1:725:A:SER:H	11	0.26
(1,30)	1:721:A:PHE:O	1:725:A:SER:H	18	0.26
(1,24)	1:718:A:LEU:O	1:722:A:LEU:H	9	0.26
(1,22)	1:717:A:SER:O	1:721:A:PHE:H	13	0.26
(1,18)	1:712:A:ALA:O	1:750:A:ASP:H	5	0.26
(1,18)	1:712:A:ALA:O	1:750:A:ASP:H	15	0.26
(2,1368)	1:832:A:ASP:HA	1:876:A:VAL:HA	16	0.25
(2,776)	1:759:A:GLY:HA2	1:761:A:ALA:H	2	0.25
(2,16)	1:705:A:SER:HB2	1:730:A:GLY:HA2	16	0.25
(2,16)	1:705:A:SER:HB3	1:730:A:GLY:HA2	16	0.25
(1,199)	1:943:A:VAL:O	1:947:A:ARG:H	16	0.25
(1,197)	1:942:A:ARG:O	1:946:A:SER:H	9	0.25
(1,189)	1:938:A:LEU:O	1:942:A:ARG:H	14	0.25
(1,159)	1:909:A:GLU:O	1:913:A:ARG:H	9	0.25
(1,149)	1:899:A:VAL:O	1:921:A:SER:H	5	0.25
(1,149)	1:899:A:VAL:O	1:921:A:SER:H	6	0.25
(1,149)	1:899:A:VAL:O	1:921:A:SER:H	8	0.25
(1,148)	1:899:A:VAL:N	1:919:A:MET:O	11	0.25
(1,141)	1:887:A:THR:O	1:891:A:ARG:H	17	0.25
(1,133)	1:876:A:VAL:H	1:902:A:VAL:O	5	0.25
(1,131)	1:874:A:SER:O	1:902:A:VAL:H	16	0.25
(1,126)	1:872:A:VAL:N	1:898:A:PRO:O	1	0.25
(1,126)	1:872:A:VAL:N	1:898:A:PRO:O	4	0.25
(1,126)	1:872:A:VAL:N	1:898:A:PRO:O	7	0.25
(1,125)	1:872:A:VAL:H	1:898:A:PRO:O	11	0.25
(1,125)	1:872:A:VAL:H	1:898:A:PRO:O	14	0.25
(1,125)	1:872:A:VAL:H	1:898:A:PRO:O	17	0.25
(1,125)	1:872:A:VAL:H	1:898:A:PRO:O	18	0.25
(1,121)	1:862:A:ASN:O	1:866:A:LYS:H	2	0.25
(1,121)	1:862:A:ASN:O	1:866:A:LYS:H	4	0.25
(1,121)	1:862:A:ASN:O	1:866:A:LYS:H	19	0.25
(1,111)	1:843:A:GLN:O	1:847:A:LEU:H	18	0.25
(1,103)	1:839:A:LEU:O	1:843:A:GLN:H	5	0.25

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,103)	1:839:A:LEU:O	1:843:A:GLN:H	12	0.25
(1,103)	1:839:A:LEU:O	1:843:A:GLN:H	16	0.25
(1,95)	1:835:A:ILE:O	1:839:A:LEU:H	9	0.25
(1,95)	1:835:A:ILE:O	1:839:A:LEU:H	18	0.25
(1,91)	1:832:A:ASP:H	1:875:A:ASP:O	4	0.25
(1,91)	1:832:A:ASP:H	1:875:A:ASP:O	18	0.25
(1,89)	1:831:A:ASP:H	1:854:A:ALA:O	2	0.25
(1,89)	1:831:A:ASP:H	1:854:A:ALA:O	9	0.25
(1,89)	1:831:A:ASP:H	1:854:A:ALA:O	12	0.25
(1,69)	1:825:A:MET:O	1:850:A:GLN:H	13	0.25
(1,69)	1:825:A:MET:O	1:850:A:GLN:H	18	0.25
(1,62)	1:792:A:PRO:O	1:796:A:ALA:H	6	0.25
(1,56)	1:766:A:CYS:H	1:783:A:HIS:O	12	0.25
(1,30)	1:721:A:PHE:O	1:725:A:SER:H	5	0.25
(1,22)	1:717:A:SER:O	1:721:A:PHE:H	3	0.25
(1,8)	1:710:A:TRP:H	1:746:A:VAL:O	17	0.25
(2,1193)	1:802:A:GLU:HA	1:803:A:MET:H	5	0.24
(1,189)	1:938:A:LEU:O	1:942:A:ARG:H	2	0.24
(1,163)	1:911:A:LYS:O	1:915:A:LEU:H	20	0.24
(1,161)	1:910:A:GLU:O	1:914:A:CYS:H	14	0.24
(1,161)	1:910:A:GLU:O	1:914:A:CYS:H	17	0.24
(1,149)	1:899:A:VAL:O	1:921:A:SER:H	16	0.24
(1,148)	1:899:A:VAL:N	1:919:A:MET:O	4	0.24
(1,148)	1:899:A:VAL:N	1:919:A:MET:O	9	0.24
(1,148)	1:899:A:VAL:N	1:919:A:MET:O	14	0.24
(1,141)	1:887:A:THR:O	1:891:A:ARG:H	6	0.24
(1,137)	1:885:A:ARG:O	1:889:A:ARG:H	3	0.24
(1,125)	1:872:A:VAL:H	1:898:A:PRO:O	3	0.24
(1,125)	1:872:A:VAL:H	1:898:A:PRO:O	10	0.24
(1,121)	1:862:A:ASN:O	1:866:A:LYS:H	6	0.24
(1,115)	1:859:A:ASP:O	1:863:A:VAL:H	11	0.24
(1,111)	1:843:A:GLN:O	1:847:A:LEU:H	7	0.24
(1,109)	1:842:A:ASP:O	1:846:A:SER:H	10	0.24
(1,103)	1:839:A:LEU:O	1:843:A:GLN:H	6	0.24
(1,99)	1:837:A:ARG:O	1:841:A:ALA:H	15	0.24
(1,95)	1:835:A:ILE:O	1:839:A:LEU:H	2	0.24
(1,95)	1:835:A:ILE:O	1:839:A:LEU:H	4	0.24
(1,95)	1:835:A:ILE:O	1:839:A:LEU:H	10	0.24
(1,95)	1:835:A:ILE:O	1:839:A:LEU:H	17	0.24
(1,95)	1:835:A:ILE:O	1:839:A:LEU:H	20	0.24
(1,91)	1:832:A:ASP:H	1:875:A:ASP:O	16	0.24
(1,89)	1:831:A:ASP:H	1:854:A:ALA:O	18	0.24

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,87)	1:830:A:VAL:O	1:875:A:ASP:H	5	0.24
(1,69)	1:825:A:MET:O	1:850:A:GLN:H	16	0.24
(1,68)	1:795:A:LEU:O	1:799:A:TYR:H	16	0.24
(1,68)	1:795:A:LEU:O	1:799:A:TYR:H	17	0.24
(1,64)	1:793:A:ALA:O	1:797:A:ARG:H	17	0.24
(1,62)	1:792:A:PRO:O	1:796:A:ALA:H	17	0.24
(1,56)	1:766:A:CYS:H	1:783:A:HIS:O	10	0.24
(1,30)	1:721:A:PHE:O	1:725:A:SER:H	13	0.24
(1,24)	1:718:A:LEU:O	1:722:A:LEU:H	8	0.24
(1,24)	1:718:A:LEU:O	1:722:A:LEU:H	17	0.24
(1,23)	1:718:A:LEU:O	1:722:A:LEU:N	3	0.24
(1,22)	1:717:A:SER:O	1:721:A:PHE:H	15	0.24
(1,22)	1:717:A:SER:O	1:721:A:PHE:H	20	0.24
(1,18)	1:712:A:ALA:O	1:750:A:ASP:H	7	0.24
(1,18)	1:712:A:ALA:O	1:750:A:ASP:H	18	0.24
(1,18)	1:712:A:ALA:O	1:750:A:ASP:H	20	0.24
(2,1569)	1:856:A:ASP:H	1:856:A:ASP:HB2	16	0.23
(2,1141)	1:798:A:ILE:H	1:798:A:ILE:HG12	18	0.23
(2,1141)	1:798:A:ILE:H	1:798:A:ILE:HG12	20	0.23
(2,1096)	1:794:A:LEU:HD11	1:798:A:ILE:H	17	0.23
(2,1096)	1:794:A:LEU:HD12	1:798:A:ILE:H	17	0.23
(2,1096)	1:794:A:LEU:HD13	1:798:A:ILE:H	17	0.23
(2,956)	1:775:A:GLU:HG2	1:776:A:LYS:H	8	0.23
(2,482)	1:734:A:THR:HA	1:735:A:THR:HB	16	0.23
(2,254)	1:716:A:ALA:H	1:720:A:GLN:H	17	0.23
(1,198)	1:942:A:ARG:O	1:946:A:SER:N	1	0.23
(1,198)	1:942:A:ARG:O	1:946:A:SER:N	6	0.23
(1,197)	1:942:A:ARG:O	1:946:A:SER:H	12	0.23
(1,197)	1:942:A:ARG:O	1:946:A:SER:H	18	0.23
(1,195)	1:941:A:GLU:O	1:945:A:LYS:H	1	0.23
(1,195)	1:941:A:GLU:O	1:945:A:LYS:H	8	0.23
(1,189)	1:938:A:LEU:O	1:942:A:ARG:H	15	0.23
(1,161)	1:910:A:GLU:O	1:914:A:CYS:H	2	0.23
(1,161)	1:910:A:GLU:O	1:914:A:CYS:H	12	0.23
(1,157)	1:908:A:ALA:O	1:912:A:GLN:H	6	0.23
(1,150)	1:899:A:VAL:O	1:921:A:SER:N	4	0.23
(1,149)	1:899:A:VAL:O	1:921:A:SER:H	19	0.23
(1,148)	1:899:A:VAL:N	1:919:A:MET:O	1	0.23
(1,148)	1:899:A:VAL:N	1:919:A:MET:O	12	0.23
(1,141)	1:887:A:THR:O	1:891:A:ARG:H	5	0.23
(1,131)	1:874:A:SER:O	1:902:A:VAL:H	3	0.23
(1,126)	1:872:A:VAL:N	1:898:A:PRO:O	3	0.23

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,126)	1:872:A:VAL:N	1:898:A:PRO:O	19	0.23
(1,125)	1:872:A:VAL:H	1:898:A:PRO:O	9	0.23
(1,125)	1:872:A:VAL:H	1:898:A:PRO:O	15	0.23
(1,119)	1:861:A:LEU:O	1:865:A:SER:H	5	0.23
(1,111)	1:843:A:GLN:O	1:847:A:LEU:H	1	0.23
(1,111)	1:843:A:GLN:O	1:847:A:LEU:H	6	0.23
(1,111)	1:843:A:GLN:O	1:847:A:LEU:H	10	0.23
(1,109)	1:842:A:ASP:O	1:846:A:SER:H	3	0.23
(1,103)	1:839:A:LEU:O	1:843:A:GLN:H	9	0.23
(1,103)	1:839:A:LEU:O	1:843:A:GLN:H	14	0.23
(1,101)	1:838:A:ARG:O	1:842:A:ASP:H	6	0.23
(1,101)	1:838:A:ARG:O	1:842:A:ASP:H	13	0.23
(1,96)	1:835:A:ILE:O	1:839:A:LEU:N	19	0.23
(1,92)	1:832:A:ASP:N	1:875:A:ASP:O	14	0.23
(1,91)	1:832:A:ASP:H	1:875:A:ASP:O	3	0.23
(1,91)	1:832:A:ASP:H	1:875:A:ASP:O	13	0.23
(1,91)	1:832:A:ASP:H	1:875:A:ASP:O	19	0.23
(1,89)	1:831:A:ASP:H	1:854:A:ALA:O	6	0.23
(1,83)	1:829:A:VAL:O	1:854:A:ALA:H	11	0.23
(1,71)	1:826:A:MET:O	1:870:A:ASP:H	6	0.23
(1,71)	1:826:A:MET:O	1:870:A:ASP:H	19	0.23
(1,69)	1:825:A:MET:O	1:850:A:GLN:H	15	0.23
(1,68)	1:795:A:LEU:O	1:799:A:TYR:H	19	0.23
(1,64)	1:793:A:ALA:O	1:797:A:ARG:H	20	0.23
(1,56)	1:766:A:CYS:H	1:783:A:HIS:O	9	0.23
(1,54)	1:764:A:THR:O	1:783:A:HIS:H	4	0.23
(1,30)	1:721:A:PHE:O	1:725:A:SER:H	10	0.23
(1,24)	1:718:A:LEU:O	1:722:A:LEU:H	6	0.23
(1,24)	1:718:A:LEU:O	1:722:A:LEU:H	11	0.23
(1,24)	1:718:A:LEU:O	1:722:A:LEU:H	12	0.23
(1,24)	1:718:A:LEU:O	1:722:A:LEU:H	13	0.23
(1,23)	1:718:A:LEU:O	1:722:A:LEU:N	9	0.23
(1,22)	1:717:A:SER:O	1:721:A:PHE:H	4	0.23
(2,1465)	1:842:A:ASP:HA	1:845:A:GLY:HA2	12	0.22
(2,1230)	1:824:A:ASP:H	1:825:A:MET:H	4	0.22
(2,1005)	1:781:A:TRP:HE3	1:794:A:LEU:HB2	9	0.22
(2,254)	1:716:A:ALA:H	1:720:A:GLN:H	11	0.22
(1,203)	1:831:A:ASP:OD1	1:925:A:LYS:HZ3	14	0.22
(1,201)	1:944:A:ARG:O	1:948:A:ASP:H	13	0.22
(1,201)	1:944:A:ARG:O	1:948:A:ASP:H	18	0.22
(1,198)	1:942:A:ARG:O	1:946:A:SER:N	19	0.22
(1,197)	1:942:A:ARG:O	1:946:A:SER:H	2	0.22

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,197)	1:942:A:ARG:O	1:946:A:SER:H	17	0.22
(1,195)	1:941:A:GLU:O	1:945:A:LYS:H	16	0.22
(1,193)	1:940:A:ALA:O	1:944:A:ARG:H	1	0.22
(1,183)	1:935:A:THR:O	1:939:A:TYR:H	4	0.22
(1,173)	1:930:A:ASP:O	1:934:A:GLN:H	10	0.22
(1,167)	1:913:A:ARG:O	1:917:A:SER:H	7	0.22
(1,165)	1:912:A:GLN:O	1:916:A:GLU:H	5	0.22
(1,161)	1:910:A:GLU:O	1:914:A:CYS:H	1	0.22
(1,161)	1:910:A:GLU:O	1:914:A:CYS:H	9	0.22
(1,157)	1:908:A:ALA:O	1:912:A:GLN:H	20	0.22
(1,153)	1:901:A:GLY:O	1:923:A:LEU:H	7	0.22
(1,150)	1:899:A:VAL:O	1:921:A:SER:N	14	0.22
(1,149)	1:899:A:VAL:O	1:921:A:SER:H	3	0.22
(1,149)	1:899:A:VAL:O	1:921:A:SER:H	10	0.22
(1,149)	1:899:A:VAL:O	1:921:A:SER:H	13	0.22
(1,148)	1:899:A:VAL:N	1:919:A:MET:O	3	0.22
(1,148)	1:899:A:VAL:N	1:919:A:MET:O	5	0.22
(1,148)	1:899:A:VAL:N	1:919:A:MET:O	6	0.22
(1,148)	1:899:A:VAL:N	1:919:A:MET:O	10	0.22
(1,143)	1:888:A:GLN:O	1:892:A:GLN:H	11	0.22
(1,141)	1:887:A:THR:O	1:891:A:ARG:H	8	0.22
(1,129)	1:874:A:SER:H	1:900:A:ILE:O	10	0.22
(1,129)	1:874:A:SER:H	1:900:A:ILE:O	14	0.22
(1,126)	1:872:A:VAL:N	1:898:A:PRO:O	14	0.22
(1,126)	1:872:A:VAL:N	1:898:A:PRO:O	16	0.22
(1,125)	1:872:A:VAL:H	1:898:A:PRO:O	13	0.22
(1,121)	1:862:A:ASN:O	1:866:A:LYS:H	13	0.22
(1,121)	1:862:A:ASN:O	1:866:A:LYS:H	16	0.22
(1,121)	1:862:A:ASN:O	1:866:A:LYS:H	18	0.22
(1,121)	1:862:A:ASN:O	1:866:A:LYS:H	20	0.22
(1,119)	1:861:A:LEU:O	1:865:A:SER:H	8	0.22
(1,118)	1:860:A:ALA:O	1:864:A:LEU:N	1	0.22
(1,113)	1:858:A:VAL:O	1:862:A:ASN:H	5	0.22
(1,111)	1:843:A:GLN:O	1:847:A:LEU:H	2	0.22
(1,111)	1:843:A:GLN:O	1:847:A:LEU:H	4	0.22
(1,111)	1:843:A:GLN:O	1:847:A:LEU:H	5	0.22
(1,111)	1:843:A:GLN:O	1:847:A:LEU:H	20	0.22
(1,107)	1:841:A:ALA:O	1:845:A:GLY:H	4	0.22
(1,104)	1:839:A:LEU:O	1:843:A:GLN:N	10	0.22
(1,101)	1:838:A:ARG:O	1:842:A:ASP:H	3	0.22
(1,99)	1:837:A:ARG:O	1:841:A:ALA:H	1	0.22
(1,99)	1:837:A:ARG:O	1:841:A:ALA:H	2	0.22

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,99)	1:837:A:ARG:O	1:841:A:ALA:H	7	0.22
(1,96)	1:835:A:ILE:O	1:839:A:LEU:N	11	0.22
(1,96)	1:835:A:ILE:O	1:839:A:LEU:N	12	0.22
(1,95)	1:835:A:ILE:O	1:839:A:LEU:H	6	0.22
(1,95)	1:835:A:ILE:O	1:839:A:LEU:H	8	0.22
(1,95)	1:835:A:ILE:O	1:839:A:LEU:H	13	0.22
(1,95)	1:835:A:ILE:O	1:839:A:LEU:H	14	0.22
(1,91)	1:832:A:ASP:H	1:875:A:ASP:O	7	0.22
(1,89)	1:831:A:ASP:H	1:854:A:ALA:O	19	0.22
(1,85)	1:830:A:VAL:H	1:873:A:LEU:O	16	0.22
(1,77)	1:828:A:LEU:H	1:871:A:ILE:O	12	0.22
(1,72)	1:826:A:MET:O	1:870:A:ASP:N	9	0.22
(1,68)	1:795:A:LEU:O	1:799:A:TYR:H	13	0.22
(1,68)	1:795:A:LEU:O	1:799:A:TYR:H	18	0.22
(1,68)	1:795:A:LEU:O	1:799:A:TYR:H	20	0.22
(1,64)	1:793:A:ALA:O	1:797:A:ARG:H	11	0.22
(1,63)	1:793:A:ALA:O	1:797:A:ARG:N	2	0.22
(1,62)	1:792:A:PRO:O	1:796:A:ALA:H	11	0.22
(1,30)	1:721:A:PHE:O	1:725:A:SER:H	3	0.22
(1,30)	1:721:A:PHE:O	1:725:A:SER:H	16	0.22
(1,24)	1:718:A:LEU:O	1:722:A:LEU:H	7	0.22
(1,24)	1:718:A:LEU:O	1:722:A:LEU:H	10	0.22
(1,22)	1:717:A:SER:O	1:721:A:PHE:H	1	0.22
(1,22)	1:717:A:SER:O	1:721:A:PHE:H	2	0.22
(1,22)	1:717:A:SER:O	1:721:A:PHE:H	6	0.22
(1,22)	1:717:A:SER:O	1:721:A:PHE:H	7	0.22
(1,22)	1:717:A:SER:O	1:721:A:PHE:H	8	0.22
(1,22)	1:717:A:SER:O	1:721:A:PHE:H	16	0.22
(1,22)	1:717:A:SER:O	1:721:A:PHE:H	17	0.22
(1,22)	1:717:A:SER:O	1:721:A:PHE:H	19	0.22
(1,18)	1:712:A:ALA:O	1:750:A:ASP:H	4	0.22
(1,18)	1:712:A:ALA:O	1:750:A:ASP:H	9	0.22
(1,18)	1:712:A:ALA:O	1:750:A:ASP:H	10	0.22
(1,17)	1:712:A:ALA:O	1:750:A:ASP:N	20	0.22
(1,2)	1:707:A:LYS:O	1:732:A:VAL:H	10	0.22
(3,665)	1:857:A:GLY:HA2	1:886:A:LEU:H	20	0.21
(2,1141)	1:798:A:ILE:H	1:798:A:ILE:HG12	12	0.21
(2,776)	1:759:A:GLY:HA2	1:761:A:ALA:H	19	0.21
(2,575)	1:744:A:GLU:HG3	1:745:A:ASP:H	13	0.21
(1,201)	1:944:A:ARG:O	1:948:A:ASP:H	7	0.21
(1,197)	1:942:A:ARG:O	1:946:A:SER:H	11	0.21
(1,197)	1:942:A:ARG:O	1:946:A:SER:H	16	0.21

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,193)	1:940:A:ALA:O	1:944:A:ARG:H	7	0.21
(1,193)	1:940:A:ALA:O	1:944:A:ARG:H	13	0.21
(1,189)	1:938:A:LEU:O	1:942:A:ARG:H	4	0.21
(1,179)	1:933:A:LYS:O	1:937:A:THR:H	5	0.21
(1,169)	1:928:A:THR:O	1:932:A:ILE:H	16	0.21
(1,167)	1:913:A:ARG:O	1:917:A:SER:H	16	0.21
(1,162)	1:910:A:GLU:O	1:914:A:CYS:N	8	0.21
(1,157)	1:908:A:ALA:O	1:912:A:GLN:H	4	0.21
(1,157)	1:908:A:ALA:O	1:912:A:GLN:H	19	0.21
(1,150)	1:899:A:VAL:O	1:921:A:SER:N	9	0.21
(1,150)	1:899:A:VAL:O	1:921:A:SER:N	11	0.21
(1,150)	1:899:A:VAL:O	1:921:A:SER:N	20	0.21
(1,149)	1:899:A:VAL:O	1:921:A:SER:H	17	0.21
(1,148)	1:899:A:VAL:N	1:919:A:MET:O	2	0.21
(1,148)	1:899:A:VAL:N	1:919:A:MET:O	13	0.21
(1,148)	1:899:A:VAL:N	1:919:A:MET:O	16	0.21
(1,148)	1:899:A:VAL:N	1:919:A:MET:O	17	0.21
(1,147)	1:899:A:VAL:H	1:919:A:MET:O	20	0.21
(1,141)	1:887:A:THR:O	1:891:A:ARG:H	2	0.21
(1,141)	1:887:A:THR:O	1:891:A:ARG:H	12	0.21
(1,141)	1:887:A:THR:O	1:891:A:ARG:H	18	0.21
(1,129)	1:874:A:SER:H	1:900:A:ILE:O	13	0.21
(1,126)	1:872:A:VAL:N	1:898:A:PRO:O	15	0.21
(1,126)	1:872:A:VAL:N	1:898:A:PRO:O	18	0.21
(1,125)	1:872:A:VAL:H	1:898:A:PRO:O	2	0.21
(1,125)	1:872:A:VAL:H	1:898:A:PRO:O	20	0.21
(1,119)	1:861:A:LEU:O	1:865:A:SER:H	2	0.21
(1,119)	1:861:A:LEU:O	1:865:A:SER:H	11	0.21
(1,119)	1:861:A:LEU:O	1:865:A:SER:H	12	0.21
(1,119)	1:861:A:LEU:O	1:865:A:SER:H	17	0.21
(1,117)	1:860:A:ALA:O	1:864:A:LEU:H	11	0.21
(1,115)	1:859:A:ASP:O	1:863:A:VAL:H	19	0.21
(1,113)	1:858:A:VAL:O	1:862:A:ASN:H	13	0.21
(1,113)	1:858:A:VAL:O	1:862:A:ASN:H	14	0.21
(1,111)	1:843:A:GLN:O	1:847:A:LEU:H	17	0.21
(1,104)	1:839:A:LEU:O	1:843:A:GLN:N	12	0.21
(1,103)	1:839:A:LEU:O	1:843:A:GLN:H	7	0.21
(1,103)	1:839:A:LEU:O	1:843:A:GLN:H	11	0.21
(1,99)	1:837:A:ARG:O	1:841:A:ALA:H	14	0.21
(1,95)	1:835:A:ILE:O	1:839:A:LEU:H	5	0.21
(1,91)	1:832:A:ASP:H	1:875:A:ASP:O	20	0.21
(1,69)	1:825:A:MET:O	1:850:A:GLN:H	4	0.21

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,69)	1:825:A:MET:O	1:850:A:GLN:H	8	0.21
(1,68)	1:795:A:LEU:O	1:799:A:TYR:H	2	0.21
(1,68)	1:795:A:LEU:O	1:799:A:TYR:H	14	0.21
(1,56)	1:766:A:CYS:H	1:783:A:HIS:O	5	0.21
(1,56)	1:766:A:CYS:H	1:783:A:HIS:O	16	0.21
(1,50)	1:762:A:VAL:O	1:781:A:TRP:H	12	0.21
(1,32)	1:722:A:LEU:O	1:726:A:LEU:H	6	0.21
(1,30)	1:721:A:PHE:O	1:725:A:SER:H	1	0.21
(1,30)	1:721:A:PHE:O	1:725:A:SER:H	6	0.21
(1,30)	1:721:A:PHE:O	1:725:A:SER:H	7	0.21
(1,30)	1:721:A:PHE:O	1:725:A:SER:H	8	0.21
(1,30)	1:721:A:PHE:O	1:725:A:SER:H	15	0.21
(1,30)	1:721:A:PHE:O	1:725:A:SER:H	17	0.21
(1,23)	1:718:A:LEU:O	1:722:A:LEU:N	8	0.21
(1,23)	1:718:A:LEU:O	1:722:A:LEU:N	13	0.21
(1,23)	1:718:A:LEU:O	1:722:A:LEU:N	17	0.21
(1,22)	1:717:A:SER:O	1:721:A:PHE:H	11	0.21
(1,22)	1:717:A:SER:O	1:721:A:PHE:H	14	0.21
(1,22)	1:717:A:SER:O	1:721:A:PHE:H	18	0.21
(1,18)	1:712:A:ALA:O	1:750:A:ASP:H	6	0.21
(1,11)	1:711:A:LEU:H	1:734:A:THR:O	5	0.21
(1,8)	1:710:A:TRP:H	1:746:A:VAL:O	11	0.21
(1,2)	1:707:A:LYS:O	1:732:A:VAL:H	20	0.21
(1,1)	1:707:A:LYS:O	1:732:A:VAL:N	7	0.21
(2,1141)	1:798:A:ILE:H	1:798:A:ILE:HG12	3	0.2
(2,508)	1:736:A:TYR:HE1	1:738:A:GLY:HA3	3	0.2
(2,508)	1:736:A:TYR:HE2	1:738:A:GLY:HA3	3	0.2
(2,254)	1:716:A:ALA:H	1:720:A:GLN:H	12	0.2
(1,203)	1:831:A:ASP:OD1	1:925:A:LYS:HZ3	4	0.2
(1,199)	1:943:A:VAL:O	1:947:A:ARG:H	5	0.2
(1,198)	1:942:A:ARG:O	1:946:A:SER:N	3	0.2
(1,198)	1:942:A:ARG:O	1:946:A:SER:N	7	0.2
(1,197)	1:942:A:ARG:O	1:946:A:SER:H	4	0.2
(1,197)	1:942:A:ARG:O	1:946:A:SER:H	15	0.2
(1,195)	1:941:A:GLU:O	1:945:A:LYS:H	2	0.2
(1,195)	1:941:A:GLU:O	1:945:A:LYS:H	7	0.2
(1,193)	1:940:A:ALA:O	1:944:A:ARG:H	5	0.2
(1,193)	1:940:A:ALA:O	1:944:A:ARG:H	15	0.2
(1,193)	1:940:A:ALA:O	1:944:A:ARG:H	19	0.2
(1,189)	1:938:A:LEU:O	1:942:A:ARG:H	3	0.2
(1,189)	1:938:A:LEU:O	1:942:A:ARG:H	16	0.2
(1,179)	1:933:A:LYS:O	1:937:A:THR:H	10	0.2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,165)	1:912:A:GLN:O	1:916:A:GLU:H	10	0.2
(1,161)	1:910:A:GLU:O	1:914:A:CYS:H	11	0.2
(1,161)	1:910:A:GLU:O	1:914:A:CYS:H	13	0.2
(1,161)	1:910:A:GLU:O	1:914:A:CYS:H	15	0.2
(1,150)	1:899:A:VAL:O	1:921:A:SER:N	5	0.2
(1,149)	1:899:A:VAL:O	1:921:A:SER:H	15	0.2
(1,148)	1:899:A:VAL:N	1:919:A:MET:O	15	0.2
(1,143)	1:888:A:GLN:O	1:892:A:GLN:H	20	0.2
(1,142)	1:887:A:THR:O	1:891:A:ARG:N	17	0.2
(1,131)	1:874:A:SER:O	1:902:A:VAL:H	4	0.2
(1,126)	1:872:A:VAL:N	1:898:A:PRO:O	2	0.2
(1,126)	1:872:A:VAL:N	1:898:A:PRO:O	9	0.2
(1,126)	1:872:A:VAL:N	1:898:A:PRO:O	11	0.2
(1,126)	1:872:A:VAL:N	1:898:A:PRO:O	13	0.2
(1,126)	1:872:A:VAL:N	1:898:A:PRO:O	17	0.2
(1,125)	1:872:A:VAL:H	1:898:A:PRO:O	6	0.2
(1,123)	1:863:A:VAL:O	1:867:A:ASN:H	2	0.2
(1,121)	1:862:A:ASN:O	1:866:A:LYS:H	9	0.2
(1,121)	1:862:A:ASN:O	1:866:A:LYS:H	11	0.2
(1,119)	1:861:A:LEU:O	1:865:A:SER:H	9	0.2
(1,119)	1:861:A:LEU:O	1:865:A:SER:H	15	0.2
(1,117)	1:860:A:ALA:O	1:864:A:LEU:H	6	0.2
(1,117)	1:860:A:ALA:O	1:864:A:LEU:H	7	0.2
(1,117)	1:860:A:ALA:O	1:864:A:LEU:H	10	0.2
(1,113)	1:858:A:VAL:O	1:862:A:ASN:H	2	0.2
(1,109)	1:842:A:ASP:O	1:846:A:SER:H	4	0.2
(1,103)	1:839:A:LEU:O	1:843:A:GLN:H	15	0.2
(1,97)	1:836:A:ASN:O	1:840:A:LEU:H	19	0.2
(1,93)	1:834:A:PRO:O	1:838:A:ARG:H	18	0.2
(1,72)	1:826:A:MET:O	1:870:A:ASP:N	19	0.2
(1,69)	1:825:A:MET:O	1:850:A:GLN:H	10	0.2
(1,68)	1:795:A:LEU:O	1:799:A:TYR:H	4	0.2
(1,68)	1:795:A:LEU:O	1:799:A:TYR:H	10	0.2
(1,68)	1:795:A:LEU:O	1:799:A:TYR:H	12	0.2
(1,62)	1:792:A:PRO:O	1:796:A:ALA:H	2	0.2
(1,56)	1:766:A:CYS:H	1:783:A:HIS:O	4	0.2
(1,56)	1:766:A:CYS:H	1:783:A:HIS:O	20	0.2
(1,29)	1:721:A:PHE:O	1:725:A:SER:N	18	0.2
(1,23)	1:718:A:LEU:O	1:722:A:LEU:N	6	0.2
(1,23)	1:718:A:LEU:O	1:722:A:LEU:N	12	0.2
(1,18)	1:712:A:ALA:O	1:750:A:ASP:H	13	0.2
(1,17)	1:712:A:ALA:O	1:750:A:ASP:N	3	0.2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,17)	1:712:A:ALA:O	1:750:A:ASP:N	18	0.2
(1,11)	1:711:A:LEU:H	1:734:A:THR:O	19	0.2
(3,347)	1:775:A:GLU:H	1:780:A:GLU:HA	11	0.19
(2,956)	1:775:A:GLU:HG2	1:776:A:LYS:H	3	0.19
(2,956)	1:775:A:GLU:HG2	1:776:A:LYS:H	15	0.19
(2,956)	1:775:A:GLU:HG2	1:776:A:LYS:H	18	0.19
(2,254)	1:716:A:ALA:H	1:720:A:GLN:H	2	0.19
(2,254)	1:716:A:ALA:H	1:720:A:GLN:H	15	0.19
(1,201)	1:944:A:ARG:O	1:948:A:ASP:H	8	0.19
(1,200)	1:943:A:VAL:O	1:947:A:ARG:N	16	0.19
(1,195)	1:941:A:GLU:O	1:945:A:LYS:H	19	0.19
(1,193)	1:940:A:ALA:O	1:944:A:ARG:H	10	0.19
(1,161)	1:910:A:GLU:O	1:914:A:CYS:H	20	0.19
(1,158)	1:908:A:ALA:O	1:912:A:GLN:N	14	0.19
(1,148)	1:899:A:VAL:N	1:919:A:MET:O	8	0.19
(1,142)	1:887:A:THR:O	1:891:A:ARG:N	5	0.19
(1,142)	1:887:A:THR:O	1:891:A:ARG:N	6	0.19
(1,142)	1:887:A:THR:O	1:891:A:ARG:N	18	0.19
(1,141)	1:887:A:THR:O	1:891:A:ARG:H	10	0.19
(1,139)	1:886:A:LEU:O	1:890:A:ILE:H	19	0.19
(1,126)	1:872:A:VAL:N	1:898:A:PRO:O	10	0.19
(1,126)	1:872:A:VAL:N	1:898:A:PRO:O	20	0.19
(1,117)	1:860:A:ALA:O	1:864:A:LEU:H	14	0.19
(1,116)	1:859:A:ASP:O	1:863:A:VAL:N	11	0.19
(1,114)	1:858:A:VAL:O	1:862:A:ASN:N	4	0.19
(1,111)	1:843:A:GLN:O	1:847:A:LEU:H	19	0.19
(1,109)	1:842:A:ASP:O	1:846:A:SER:H	7	0.19
(1,103)	1:839:A:LEU:O	1:843:A:GLN:H	4	0.19
(1,92)	1:832:A:ASP:N	1:875:A:ASP:O	17	0.19
(1,91)	1:832:A:ASP:H	1:875:A:ASP:O	1	0.19
(1,78)	1:828:A:LEU:N	1:871:A:ILE:O	12	0.19
(1,71)	1:826:A:MET:O	1:870:A:ASP:H	12	0.19
(1,71)	1:826:A:MET:O	1:870:A:ASP:H	17	0.19
(1,69)	1:825:A:MET:O	1:850:A:GLN:H	9	0.19
(1,69)	1:825:A:MET:O	1:850:A:GLN:H	11	0.19
(1,69)	1:825:A:MET:O	1:850:A:GLN:H	14	0.19
(1,68)	1:795:A:LEU:O	1:799:A:TYR:H	8	0.19
(1,62)	1:792:A:PRO:O	1:796:A:ALA:H	9	0.19
(1,34)	1:723:A:GLU:O	1:727:A:GLN:H	1	0.19
(1,32)	1:722:A:LEU:O	1:726:A:LEU:H	4	0.19
(1,28)	1:720:A:GLN:O	1:724:A:THR:H	20	0.19
(1,23)	1:718:A:LEU:O	1:722:A:LEU:N	7	0.19

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,23)	1:718:A:LEU:O	1:722:A:LEU:N	10	0.19
(1,23)	1:718:A:LEU:O	1:722:A:LEU:N	11	0.19
(1,18)	1:712:A:ALA:O	1:750:A:ASP:H	14	0.19
(2,1304)	1:828:A:LEU:HB3	1:852:A:LYS:H	14	0.18
(2,1216)	1:821:A:ASP:HA	1:823:A:ASP:H	15	0.18
(2,1014)	1:782:A:VAL:HG21	1:783:A:HIS:HD2	9	0.18
(2,1014)	1:782:A:VAL:HG22	1:783:A:HIS:HD2	9	0.18
(2,1014)	1:782:A:VAL:HG23	1:783:A:HIS:HD2	9	0.18
(2,956)	1:775:A:GLU:HG2	1:776:A:LYS:H	16	0.18
(2,776)	1:759:A:GLY:HA2	1:761:A:ALA:H	11	0.18
(2,254)	1:716:A:ALA:H	1:720:A:GLN:H	9	0.18
(2,235)	1:714:A:ARG:HB3	1:715:A:ASN:HA	19	0.18
(2,134)	1:711:A:LEU:H	1:711:A:LEU:HG	20	0.18
(1,199)	1:943:A:VAL:O	1:947:A:ARG:H	3	0.18
(1,191)	1:939:A:TYR:O	1:943:A:VAL:H	12	0.18
(1,190)	1:938:A:LEU:O	1:942:A:ARG:N	8	0.18
(1,157)	1:908:A:ALA:O	1:912:A:GLN:H	17	0.18
(1,150)	1:899:A:VAL:O	1:921:A:SER:N	19	0.18
(1,148)	1:899:A:VAL:N	1:919:A:MET:O	20	0.18
(1,126)	1:872:A:VAL:N	1:898:A:PRO:O	6	0.18
(1,104)	1:839:A:LEU:O	1:843:A:GLN:N	5	0.18
(1,99)	1:837:A:ARG:O	1:841:A:ALA:H	18	0.18
(1,99)	1:837:A:ARG:O	1:841:A:ALA:H	20	0.18
(1,92)	1:832:A:ASP:N	1:875:A:ASP:O	5	0.18
(1,63)	1:793:A:ALA:O	1:797:A:ARG:N	17	0.18
(1,54)	1:764:A:THR:O	1:783:A:HIS:H	9	0.18
(1,22)	1:717:A:SER:O	1:721:A:PHE:H	9	0.18
(1,17)	1:712:A:ALA:O	1:750:A:ASP:N	10	0.18
(1,17)	1:712:A:ALA:O	1:750:A:ASP:N	12	0.18
(1,14)	1:711:A:LEU:O	1:736:A:TYR:H	4	0.18
(3,665)	1:857:A:GLY:HA2	1:886:A:LEU:H	19	0.17
(3,16)	1:707:A:LYS:HG3	1:799:A:TYR:HA	9	0.17
(2,1588)	1:858:A:VAL:HG21	1:859:A:ASP:HA	5	0.17
(2,1588)	1:858:A:VAL:HG22	1:859:A:ASP:HA	5	0.17
(2,1588)	1:858:A:VAL:HG23	1:859:A:ASP:HA	5	0.17
(2,1508)	1:847:A:LEU:H	1:847:A:LEU:HG	1	0.17
(2,1448)	1:840:A:LEU:HG	1:841:A:ALA:HA	2	0.17
(2,1448)	1:840:A:LEU:HG	1:841:A:ALA:HA	18	0.17
(2,1096)	1:794:A:LEU:HD11	1:798:A:ILE:H	6	0.17
(2,1096)	1:794:A:LEU:HD12	1:798:A:ILE:H	6	0.17
(2,1096)	1:794:A:LEU:HD13	1:798:A:ILE:H	6	0.17
(2,776)	1:759:A:GLY:HA2	1:761:A:ALA:H	16	0.17

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,733)	1:755:A:LYS:HB2	1:757:A:TRP:H	9	0.17
(2,708)	1:751:A:GLU:HG3	1:752:A:VAL:HG21	6	0.17
(2,708)	1:751:A:GLU:HG3	1:752:A:VAL:HG22	6	0.17
(2,708)	1:751:A:GLU:HG3	1:752:A:VAL:HG23	6	0.17
(2,575)	1:744:A:GLU:HG3	1:745:A:ASP:H	11	0.17
(2,508)	1:736:A:TYR:HE1	1:738:A:GLY:HA3	13	0.17
(2,508)	1:736:A:TYR:HE2	1:738:A:GLY:HA3	13	0.17
(2,254)	1:716:A:ALA:H	1:720:A:GLN:H	10	0.17
(2,166)	1:711:A:LEU:HD21	1:736:A:TYR:H	18	0.17
(2,166)	1:711:A:LEU:HD22	1:736:A:TYR:H	18	0.17
(2,166)	1:711:A:LEU:HD23	1:736:A:TYR:H	18	0.17
(1,197)	1:942:A:ARG:O	1:946:A:SER:H	10	0.17
(1,194)	1:940:A:ALA:O	1:944:A:ARG:N	17	0.17
(1,189)	1:938:A:LEU:O	1:942:A:ARG:H	11	0.17
(1,170)	1:928:A:THR:O	1:932:A:ILE:N	16	0.17
(1,166)	1:912:A:GLN:O	1:916:A:GLU:N	5	0.17
(1,162)	1:910:A:GLU:O	1:914:A:CYS:N	7	0.17
(1,161)	1:910:A:GLU:O	1:914:A:CYS:H	19	0.17
(1,148)	1:899:A:VAL:N	1:919:A:MET:O	18	0.17
(1,148)	1:899:A:VAL:N	1:919:A:MET:O	19	0.17
(1,139)	1:886:A:LEU:O	1:890:A:ILE:H	2	0.17
(1,138)	1:885:A:ARG:O	1:889:A:ARG:N	3	0.17
(1,137)	1:885:A:ARG:O	1:889:A:ARG:H	12	0.17
(1,131)	1:874:A:SER:O	1:902:A:VAL:H	15	0.17
(1,121)	1:862:A:ASN:O	1:866:A:LYS:H	3	0.17
(1,121)	1:862:A:ASN:O	1:866:A:LYS:H	15	0.17
(1,117)	1:860:A:ALA:O	1:864:A:LEU:H	12	0.17
(1,116)	1:859:A:ASP:O	1:863:A:VAL:N	19	0.17
(1,109)	1:842:A:ASP:O	1:846:A:SER:H	20	0.17
(1,104)	1:839:A:LEU:O	1:843:A:GLN:N	13	0.17
(1,104)	1:839:A:LEU:O	1:843:A:GLN:N	16	0.17
(1,103)	1:839:A:LEU:O	1:843:A:GLN:H	17	0.17
(1,101)	1:838:A:ARG:O	1:842:A:ASP:H	5	0.17
(1,90)	1:831:A:ASP:N	1:854:A:ALA:O	1	0.17
(1,90)	1:831:A:ASP:N	1:854:A:ALA:O	2	0.17
(1,68)	1:795:A:LEU:O	1:799:A:TYR:H	3	0.17
(1,67)	1:795:A:LEU:O	1:799:A:TYR:N	9	0.17
(1,38)	1:747:A:LEU:H	1:761:A:ALA:O	20	0.17
(1,29)	1:721:A:PHE:O	1:725:A:SER:N	11	0.17
(1,17)	1:712:A:ALA:O	1:750:A:ASP:N	11	0.17
(3,386)	1:787:A:ALA:H	1:791:A:LEU:H	15	0.16
(3,356)	1:775:A:GLU:HG3	1:779:A:GLY:H	18	0.16

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,347)	1:775:A:GLU:H	1:780:A:GLU:HA	6	0.16
(3,347)	1:775:A:GLU:H	1:780:A:GLU:HA	20	0.16
(3,177)	1:732:A:VAL:HG21	1:734:A:THR:HA	8	0.16
(3,177)	1:732:A:VAL:HG22	1:734:A:THR:HA	8	0.16
(3,177)	1:732:A:VAL:HG23	1:734:A:THR:HA	8	0.16
(2,1922)	1:903:A:THR:HB	1:906:A:ALA:HB1	3	0.16
(2,1922)	1:903:A:THR:HB	1:906:A:ALA:HB2	3	0.16
(2,1922)	1:903:A:THR:HB	1:906:A:ALA:HB3	3	0.16
(2,1922)	1:903:A:THR:HB	1:906:A:ALA:HB1	9	0.16
(2,1922)	1:903:A:THR:HB	1:906:A:ALA:HB2	9	0.16
(2,1922)	1:903:A:THR:HB	1:906:A:ALA:HB3	9	0.16
(2,1774)	1:884:A:TYR:H	1:885:A:ARG:HD2	3	0.16
(2,1193)	1:802:A:GLU:HA	1:803:A:MET:H	10	0.16
(2,1141)	1:798:A:ILE:H	1:798:A:ILE:HG12	8	0.16
(2,956)	1:775:A:GLU:HG2	1:776:A:LYS:H	6	0.16
(2,956)	1:775:A:GLU:HG2	1:776:A:LYS:H	7	0.16
(2,956)	1:775:A:GLU:HG2	1:776:A:LYS:H	13	0.16
(2,956)	1:775:A:GLU:HG2	1:776:A:LYS:H	19	0.16
(2,686)	1:749:A:THR:HB	1:753:A:VAL:HB	5	0.16
(2,254)	1:716:A:ALA:H	1:720:A:GLN:H	3	0.16
(2,254)	1:716:A:ALA:H	1:720:A:GLN:H	5	0.16
(2,254)	1:716:A:ALA:H	1:720:A:GLN:H	14	0.16
(2,254)	1:716:A:ALA:H	1:720:A:GLN:H	18	0.16
(1,166)	1:912:A:GLN:O	1:916:A:GLU:N	10	0.16
(1,160)	1:909:A:GLU:O	1:913:A:ARG:N	9	0.16
(1,155)	1:903:A:THR:H	1:923:A:LEU:O	17	0.16
(1,150)	1:899:A:VAL:O	1:921:A:SER:N	13	0.16
(1,150)	1:899:A:VAL:O	1:921:A:SER:N	16	0.16
(1,148)	1:899:A:VAL:N	1:919:A:MET:O	7	0.16
(1,144)	1:888:A:GLN:O	1:892:A:GLN:N	3	0.16
(1,143)	1:888:A:GLN:O	1:892:A:GLN:H	15	0.16
(1,142)	1:887:A:THR:O	1:891:A:ARG:N	8	0.16
(1,142)	1:887:A:THR:O	1:891:A:ARG:N	10	0.16
(1,125)	1:872:A:VAL:H	1:898:A:PRO:O	5	0.16
(1,125)	1:872:A:VAL:H	1:898:A:PRO:O	12	0.16
(1,123)	1:863:A:VAL:O	1:867:A:ASN:H	3	0.16
(1,119)	1:861:A:LEU:O	1:865:A:SER:H	18	0.16
(1,111)	1:843:A:GLN:O	1:847:A:LEU:H	14	0.16
(1,104)	1:839:A:LEU:O	1:843:A:GLN:N	6	0.16
(1,96)	1:835:A:ILE:O	1:839:A:LEU:N	3	0.16
(1,93)	1:834:A:PRO:O	1:838:A:ARG:H	8	0.16
(1,90)	1:831:A:ASP:N	1:854:A:ALA:O	10	0.16

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,83)	1:829:A:VAL:O	1:854:A:ALA:H	6	0.16
(1,72)	1:826:A:MET:O	1:870:A:ASP:N	12	0.16
(1,70)	1:825:A:MET:O	1:850:A:GLN:N	7	0.16
(1,62)	1:792:A:PRO:O	1:796:A:ALA:H	1	0.16
(1,56)	1:766:A:CYS:H	1:783:A:HIS:O	8	0.16
(1,54)	1:764:A:THR:O	1:783:A:HIS:H	2	0.16
(1,21)	1:717:A:SER:O	1:721:A:PHE:N	4	0.16
(1,21)	1:717:A:SER:O	1:721:A:PHE:N	5	0.16
(1,17)	1:712:A:ALA:O	1:750:A:ASP:N	14	0.16
(1,17)	1:712:A:ALA:O	1:750:A:ASP:N	17	0.16
(1,11)	1:711:A:LEU:H	1:734:A:THR:O	17	0.16
(3,347)	1:775:A:GLU:H	1:780:A:GLU:HA	2	0.15
(3,347)	1:775:A:GLU:H	1:780:A:GLU:HA	8	0.15
(3,347)	1:775:A:GLU:H	1:780:A:GLU:HA	10	0.15
(3,58)	1:711:A:LEU:HG	1:734:A:THR:H	6	0.15
(2,1935)	1:905:A:ASN:HB3	1:907:A:LEU:H	9	0.15
(2,1771)	1:883:A:GLY:HA3	1:886:A:LEU:H	18	0.15
(2,1205)	1:805:A:SER:HB2	1:807:A:ASP:HB2	4	0.15
(2,1205)	1:805:A:SER:HB3	1:807:A:ASP:HB2	4	0.15
(2,1189)	1:801:A:ILE:HD11	1:802:A:GLU:H	9	0.15
(2,1189)	1:801:A:ILE:HD12	1:802:A:GLU:H	9	0.15
(2,1189)	1:801:A:ILE:HD13	1:802:A:GLU:H	9	0.15
(2,1176)	1:801:A:ILE:H	1:803:A:MET:H	18	0.15
(2,956)	1:775:A:GLU:HG2	1:776:A:LYS:H	4	0.15
(2,956)	1:775:A:GLU:HG2	1:776:A:LYS:H	9	0.15
(2,776)	1:759:A:GLY:HA2	1:761:A:ALA:H	15	0.15
(2,575)	1:744:A:GLU:HG3	1:745:A:ASP:H	15	0.15
(2,482)	1:734:A:THR:HA	1:735:A:THR:HB	4	0.15
(2,482)	1:734:A:THR:HA	1:735:A:THR:HB	10	0.15
(2,254)	1:716:A:ALA:H	1:720:A:GLN:H	1	0.15
(2,254)	1:716:A:ALA:H	1:720:A:GLN:H	7	0.15
(2,254)	1:716:A:ALA:H	1:720:A:GLN:H	8	0.15
(2,254)	1:716:A:ALA:H	1:720:A:GLN:H	19	0.15
(1,201)	1:944:A:ARG:O	1:948:A:ASP:H	5	0.15
(1,197)	1:942:A:ARG:O	1:946:A:SER:H	5	0.15
(1,190)	1:938:A:LEU:O	1:942:A:ARG:N	6	0.15
(1,187)	1:937:A:THR:O	1:941:A:GLU:H	18	0.15
(1,177)	1:932:A:ILE:O	1:936:A:LEU:H	5	0.15
(1,150)	1:899:A:VAL:O	1:921:A:SER:N	3	0.15
(1,150)	1:899:A:VAL:O	1:921:A:SER:N	17	0.15
(1,142)	1:887:A:THR:O	1:891:A:ARG:N	12	0.15
(1,131)	1:874:A:SER:O	1:902:A:VAL:H	7	0.15

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,129)	1:874:A:SER:H	1:900:A:ILE:O	9	0.15
(1,120)	1:861:A:LEU:O	1:865:A:SER:N	1	0.15
(1,109)	1:842:A:ASP:O	1:846:A:SER:H	11	0.15
(1,104)	1:839:A:LEU:O	1:843:A:GLN:N	15	0.15
(1,98)	1:836:A:ASN:O	1:840:A:LEU:N	19	0.15
(1,96)	1:835:A:ILE:O	1:839:A:LEU:N	18	0.15
(1,90)	1:831:A:ASP:N	1:854:A:ALA:O	9	0.15
(1,90)	1:831:A:ASP:N	1:854:A:ALA:O	11	0.15
(1,84)	1:829:A:VAL:O	1:854:A:ALA:N	11	0.15
(1,71)	1:826:A:MET:O	1:870:A:ASP:H	16	0.15
(1,62)	1:792:A:PRO:O	1:796:A:ALA:H	19	0.15
(1,61)	1:792:A:PRO:O	1:796:A:ALA:N	6	0.15
(1,58)	1:790:A:GLU:O	1:794:A:LEU:H	17	0.15
(1,30)	1:721:A:PHE:O	1:725:A:SER:H	4	0.15
(1,29)	1:721:A:PHE:O	1:725:A:SER:N	9	0.15
(1,29)	1:721:A:PHE:O	1:725:A:SER:N	16	0.15
(1,13)	1:711:A:LEU:O	1:736:A:TYR:N	4	0.15
(1,11)	1:711:A:LEU:H	1:734:A:THR:O	4	0.15
(1,8)	1:710:A:TRP:H	1:746:A:VAL:O	14	0.15
(3,832)	1:902:A:VAL:H	1:923:A:LEU:HD11	18	0.14
(3,832)	1:902:A:VAL:H	1:923:A:LEU:HD12	18	0.14
(3,832)	1:902:A:VAL:H	1:923:A:LEU:HD13	18	0.14
(3,781)	1:884:A:TYR:HE1	1:885:A:ARG:HD3	6	0.14
(3,781)	1:884:A:TYR:HE2	1:885:A:ARG:HD3	6	0.14
(3,347)	1:775:A:GLU:H	1:780:A:GLU:HA	14	0.14
(3,347)	1:775:A:GLU:H	1:780:A:GLU:HA	19	0.14
(3,78)	1:713:A:VAL:H	1:714:A:ARG:HG3	2	0.14
(2,1922)	1:903:A:THR:HB	1:906:A:ALA:HB1	15	0.14
(2,1922)	1:903:A:THR:HB	1:906:A:ALA:HB2	15	0.14
(2,1922)	1:903:A:THR:HB	1:906:A:ALA:HB3	15	0.14
(2,1774)	1:884:A:TYR:H	1:885:A:ARG:HD2	16	0.14
(2,1774)	1:884:A:TYR:H	1:885:A:ARG:HD2	19	0.14
(2,1448)	1:840:A:LEU:HG	1:841:A:ALA:HA	12	0.14
(2,1448)	1:840:A:LEU:HG	1:841:A:ALA:HA	15	0.14
(2,1414)	1:837:A:ARG:H	1:840:A:LEU:HG	13	0.14
(2,1239)	1:825:A:MET:H	1:849:A:TYR:HA	12	0.14
(2,936)	1:774:A:LEU:HG	1:781:A:TRP:HA	4	0.14
(2,892)	1:769:A:HIS:HA	1:770:A:ILE:HB	1	0.14
(2,736)	1:755:A:LYS:HB3	1:757:A:TRP:H	5	0.14
(2,692)	1:749:A:THR:HG21	1:764:A:THR:HB	4	0.14
(2,692)	1:749:A:THR:HG22	1:764:A:THR:HB	4	0.14
(2,692)	1:749:A:THR:HG23	1:764:A:THR:HB	4	0.14

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,575)	1:744:A:GLU:HG3	1:745:A:ASP:H	1	0.14
(2,482)	1:734:A:THR:HA	1:735:A:THR:HB	17	0.14
(2,254)	1:716:A:ALA:H	1:720:A:GLN:H	6	0.14
(2,254)	1:716:A:ALA:H	1:720:A:GLN:H	16	0.14
(2,23)	1:707:A:LYS:H	1:707:A:LYS:HG3	7	0.14
(1,197)	1:942:A:ARG:O	1:946:A:SER:H	8	0.14
(1,196)	1:941:A:GLU:O	1:945:A:LYS:N	2	0.14
(1,189)	1:938:A:LEU:O	1:942:A:ARG:H	5	0.14
(1,184)	1:935:A:THR:O	1:939:A:TYR:N	4	0.14
(1,174)	1:930:A:ASP:O	1:934:A:GLN:N	10	0.14
(1,169)	1:928:A:THR:O	1:932:A:ILE:H	10	0.14
(1,163)	1:911:A:LYS:O	1:915:A:LEU:H	8	0.14
(1,163)	1:911:A:LYS:O	1:915:A:LEU:H	9	0.14
(1,162)	1:910:A:GLU:O	1:914:A:CYS:N	2	0.14
(1,162)	1:910:A:GLU:O	1:914:A:CYS:N	11	0.14
(1,162)	1:910:A:GLU:O	1:914:A:CYS:N	14	0.14
(1,158)	1:908:A:ALA:O	1:912:A:GLN:N	6	0.14
(1,158)	1:908:A:ALA:O	1:912:A:GLN:N	19	0.14
(1,157)	1:908:A:ALA:O	1:912:A:GLN:H	1	0.14
(1,157)	1:908:A:ALA:O	1:912:A:GLN:H	9	0.14
(1,150)	1:899:A:VAL:O	1:921:A:SER:N	15	0.14
(1,142)	1:887:A:THR:O	1:891:A:ARG:N	2	0.14
(1,140)	1:886:A:LEU:O	1:890:A:ILE:N	19	0.14
(1,134)	1:876:A:VAL:N	1:902:A:VAL:O	5	0.14
(1,130)	1:874:A:SER:N	1:900:A:ILE:O	10	0.14
(1,126)	1:872:A:VAL:N	1:898:A:PRO:O	5	0.14
(1,126)	1:872:A:VAL:N	1:898:A:PRO:O	12	0.14
(1,122)	1:862:A:ASN:O	1:866:A:LYS:N	16	0.14
(1,117)	1:860:A:ALA:O	1:864:A:LEU:H	3	0.14
(1,117)	1:860:A:ALA:O	1:864:A:LEU:H	13	0.14
(1,114)	1:858:A:VAL:O	1:862:A:ASN:N	5	0.14
(1,110)	1:842:A:ASP:O	1:846:A:SER:N	12	0.14
(1,109)	1:842:A:ASP:O	1:846:A:SER:H	9	0.14
(1,104)	1:839:A:LEU:O	1:843:A:GLN:N	11	0.14
(1,104)	1:839:A:LEU:O	1:843:A:GLN:N	14	0.14
(1,103)	1:839:A:LEU:O	1:843:A:GLN:H	1	0.14
(1,103)	1:839:A:LEU:O	1:843:A:GLN:H	3	0.14
(1,94)	1:834:A:PRO:O	1:838:A:ARG:N	18	0.14
(1,91)	1:832:A:ASP:H	1:875:A:ASP:O	12	0.14
(1,90)	1:831:A:ASP:N	1:854:A:ALA:O	6	0.14
(1,87)	1:830:A:VAL:O	1:875:A:ASP:H	13	0.14
(1,69)	1:825:A:MET:O	1:850:A:GLN:H	6	0.14

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,67)	1:795:A:LEU:O	1:799:A:TYR:N	7	0.14
(1,64)	1:793:A:ALA:O	1:797:A:ARG:H	6	0.14
(1,62)	1:792:A:PRO:O	1:796:A:ALA:H	14	0.14
(1,56)	1:766:A:CYS:H	1:783:A:HIS:O	15	0.14
(1,44)	1:749:A:THR:O	1:765:A:PHE:H	1	0.14
(1,30)	1:721:A:PHE:O	1:725:A:SER:H	2	0.14
(1,24)	1:718:A:LEU:O	1:722:A:LEU:H	15	0.14
(1,24)	1:718:A:LEU:O	1:722:A:LEU:H	18	0.14
(1,21)	1:717:A:SER:O	1:721:A:PHE:N	3	0.14
(1,21)	1:717:A:SER:O	1:721:A:PHE:N	14	0.14
(1,21)	1:717:A:SER:O	1:721:A:PHE:N	15	0.14
(1,17)	1:712:A:ALA:O	1:750:A:ASP:N	1	0.14
(1,8)	1:710:A:TRP:H	1:746:A:VAL:O	8	0.14
(1,2)	1:707:A:LYS:O	1:732:A:VAL:H	18	0.14
(3,386)	1:787:A:ALA:H	1:791:A:LEU:H	1	0.13
(3,381)	1:783:A:HIS:HD2	1:784:A:SER:HB3	17	0.13
(3,347)	1:775:A:GLU:H	1:780:A:GLU:HA	4	0.13
(3,347)	1:775:A:GLU:H	1:780:A:GLU:HA	5	0.13
(3,347)	1:775:A:GLU:H	1:780:A:GLU:HA	13	0.13
(3,347)	1:775:A:GLU:H	1:780:A:GLU:HA	15	0.13
(3,347)	1:775:A:GLU:H	1:780:A:GLU:HA	17	0.13
(3,269)	1:752:A:VAL:HB	1:770:A:ILE:HA	5	0.13
(3,58)	1:711:A:LEU:HG	1:734:A:THR:H	20	0.13
(3,4)	1:704:A:LEU:HD21	1:730:A:GLY:HA2	7	0.13
(3,4)	1:704:A:LEU:HD22	1:730:A:GLY:HA2	7	0.13
(3,4)	1:704:A:LEU:HD23	1:730:A:GLY:HA2	7	0.13
(2,2146)	1:934:A:GLN:H	1:937:A:THR:HB	16	0.13
(2,1934)	1:905:A:ASN:HA	1:907:A:LEU:H	19	0.13
(2,1774)	1:884:A:TYR:H	1:885:A:ARG:HD2	1	0.13
(2,1774)	1:884:A:TYR:H	1:885:A:ARG:HD2	11	0.13
(2,1176)	1:801:A:ILE:H	1:803:A:MET:H	19	0.13
(2,1096)	1:794:A:LEU:HD11	1:798:A:ILE:H	20	0.13
(2,1096)	1:794:A:LEU:HD12	1:798:A:ILE:H	20	0.13
(2,1096)	1:794:A:LEU:HD13	1:798:A:ILE:H	20	0.13
(2,1052)	1:789:A:HIS:HD2	1:790:A:GLU:HG2	5	0.13
(2,956)	1:775:A:GLU:HG2	1:776:A:LYS:H	10	0.13
(2,956)	1:775:A:GLU:HG2	1:776:A:LYS:H	14	0.13
(2,936)	1:774:A:LEU:HG	1:781:A:TRP:HA	6	0.13
(2,926)	1:774:A:LEU:HB2	1:776:A:LYS:H	4	0.13
(2,692)	1:749:A:THR:HG21	1:764:A:THR:HB	11	0.13
(2,692)	1:749:A:THR:HG22	1:764:A:THR:HB	11	0.13
(2,692)	1:749:A:THR:HG23	1:764:A:THR:HB	11	0.13

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,585)	1:745:A:ASP:HA	1:746:A:VAL:HB	4	0.13
(2,585)	1:745:A:ASP:HA	1:746:A:VAL:HB	10	0.13
(2,575)	1:744:A:GLU:HG3	1:745:A:ASP:H	4	0.13
(2,254)	1:716:A:ALA:H	1:720:A:GLN:H	20	0.13
(2,8)	1:704:A:LEU:HG	1:705:A:SER:H	10	0.13
(1,204)	1:831:A:ASP:OD1	1:925:A:LYS:NZ	11	0.13
(1,189)	1:938:A:LEU:O	1:942:A:ARG:H	13	0.13
(1,187)	1:937:A:THR:O	1:941:A:GLU:H	11	0.13
(1,183)	1:935:A:THR:O	1:939:A:TYR:H	13	0.13
(1,162)	1:910:A:GLU:O	1:914:A:CYS:N	15	0.13
(1,162)	1:910:A:GLU:O	1:914:A:CYS:N	17	0.13
(1,158)	1:908:A:ALA:O	1:912:A:GLN:N	4	0.13
(1,139)	1:886:A:LEU:O	1:890:A:ILE:H	6	0.13
(1,135)	1:884:A:TYR:O	1:888:A:GLN:H	8	0.13
(1,117)	1:860:A:ALA:O	1:864:A:LEU:H	8	0.13
(1,117)	1:860:A:ALA:O	1:864:A:LEU:H	15	0.13
(1,110)	1:842:A:ASP:O	1:846:A:SER:N	10	0.13
(1,103)	1:839:A:LEU:O	1:843:A:GLN:H	20	0.13
(1,96)	1:835:A:ILE:O	1:839:A:LEU:N	13	0.13
(1,96)	1:835:A:ILE:O	1:839:A:LEU:N	20	0.13
(1,91)	1:832:A:ASP:H	1:875:A:ASP:O	11	0.13
(1,90)	1:831:A:ASP:N	1:854:A:ALA:O	7	0.13
(1,83)	1:829:A:VAL:O	1:854:A:ALA:H	19	0.13
(1,64)	1:793:A:ALA:O	1:797:A:ARG:H	12	0.13
(1,63)	1:793:A:ALA:O	1:797:A:ARG:N	11	0.13
(1,63)	1:793:A:ALA:O	1:797:A:ARG:N	20	0.13
(1,61)	1:792:A:PRO:O	1:796:A:ALA:N	17	0.13
(1,56)	1:766:A:CYS:H	1:783:A:HIS:O	17	0.13
(1,55)	1:766:A:CYS:N	1:783:A:HIS:O	16	0.13
(1,38)	1:747:A:LEU:H	1:761:A:ALA:O	8	0.13
(1,34)	1:723:A:GLU:O	1:727:A:GLN:H	20	0.13
(1,29)	1:721:A:PHE:O	1:725:A:SER:N	5	0.13
(1,29)	1:721:A:PHE:O	1:725:A:SER:N	7	0.13
(1,29)	1:721:A:PHE:O	1:725:A:SER:N	10	0.13
(1,29)	1:721:A:PHE:O	1:725:A:SER:N	13	0.13
(1,24)	1:718:A:LEU:O	1:722:A:LEU:H	19	0.13
(1,21)	1:717:A:SER:O	1:721:A:PHE:N	1	0.13
(1,21)	1:717:A:SER:O	1:721:A:PHE:N	6	0.13
(1,21)	1:717:A:SER:O	1:721:A:PHE:N	13	0.13
(1,21)	1:717:A:SER:O	1:721:A:PHE:N	19	0.13
(1,17)	1:712:A:ALA:O	1:750:A:ASP:N	4	0.13
(1,11)	1:711:A:LEU:H	1:734:A:THR:O	10	0.13

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,540)	1:831:A:ASP:HA	1:856:A:ASP:H	1	0.12
(3,356)	1:775:A:GLU:HG3	1:779:A:GLY:H	15	0.12
(3,267)	1:751:A:GLU:HG2	1:769:A:HIS:H	10	0.12
(3,264)	1:750:A:ASP:HB3	1:765:A:PHE:H	19	0.12
(3,58)	1:711:A:LEU:HG	1:734:A:THR:H	3	0.12
(3,58)	1:711:A:LEU:HG	1:734:A:THR:H	13	0.12
(2,2236)	1:942:A:ARG:HG2	1:943:A:VAL:HG11	8	0.12
(2,2236)	1:942:A:ARG:HG2	1:943:A:VAL:HG12	8	0.12
(2,2236)	1:942:A:ARG:HG2	1:943:A:VAL:HG13	8	0.12
(2,2009)	1:922:A:CYS:HA	1:923:A:LEU:HB3	8	0.12
(2,1675)	1:867:A:ASN:HD21	1:869:A:ILE:H	19	0.12
(2,1506)	1:847:A:LEU:HB3	1:849:A:TYR:H	3	0.12
(2,1422)	1:838:A:ARG:HD2	1:839:A:LEU:HB2	12	0.12
(2,1422)	1:838:A:ARG:HD2	1:839:A:LEU:HB3	12	0.12
(2,1141)	1:798:A:ILE:H	1:798:A:ILE:HG12	1	0.12
(2,1005)	1:781:A:TRP:HE3	1:794:A:LEU:HB2	6	0.12
(2,1005)	1:781:A:TRP:HE3	1:794:A:LEU:HB2	18	0.12
(2,936)	1:774:A:LEU:HG	1:781:A:TRP:HA	1	0.12
(2,936)	1:774:A:LEU:HG	1:781:A:TRP:HA	5	0.12
(2,936)	1:774:A:LEU:HG	1:781:A:TRP:HA	17	0.12
(2,936)	1:774:A:LEU:HG	1:781:A:TRP:HA	19	0.12
(2,894)	1:769:A:HIS:HB2	1:769:A:HIS:HD2	15	0.12
(2,776)	1:759:A:GLY:HA2	1:761:A:ALA:H	10	0.12
(2,776)	1:759:A:GLY:HA2	1:761:A:ALA:H	14	0.12
(2,585)	1:745:A:ASP:HA	1:746:A:VAL:HB	7	0.12
(2,585)	1:745:A:ASP:HA	1:746:A:VAL:HB	15	0.12
(2,552)	1:742:A:THR:HB	1:744:A:GLU:HB2	3	0.12
(2,482)	1:734:A:THR:HA	1:735:A:THR:HB	8	0.12
(2,482)	1:734:A:THR:HA	1:735:A:THR:HB	13	0.12
(2,391)	1:726:A:LEU:H	1:726:A:LEU:HG	9	0.12
(2,150)	1:711:A:LEU:HB2	1:747:A:LEU:HA	18	0.12
(2,150)	1:711:A:LEU:HB3	1:747:A:LEU:HA	18	0.12
(2,134)	1:711:A:LEU:H	1:711:A:LEU:HG	6	0.12
(2,65)	1:708:A:ARG:HD3	1:734:A:THR:HB	19	0.12
(1,198)	1:942:A:ARG:O	1:946:A:SER:N	10	0.12
(1,194)	1:940:A:ALA:O	1:944:A:ARG:N	10	0.12
(1,192)	1:939:A:TYR:O	1:943:A:VAL:N	12	0.12
(1,171)	1:929:A:LEU:O	1:933:A:LYS:H	14	0.12
(1,162)	1:910:A:GLU:O	1:914:A:CYS:N	9	0.12
(1,161)	1:910:A:GLU:O	1:914:A:CYS:H	18	0.12
(1,129)	1:874:A:SER:H	1:900:A:ILE:O	12	0.12
(1,104)	1:839:A:LEU:O	1:843:A:GLN:N	7	0.12

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,99)	1:837:A:ARG:O	1:841:A:ALA:H	13	0.12
(1,97)	1:836:A:ASN:O	1:840:A:LEU:H	10	0.12
(1,96)	1:835:A:ILE:O	1:839:A:LEU:N	16	0.12
(1,90)	1:831:A:ASP:N	1:854:A:ALA:O	20	0.12
(1,77)	1:828:A:LEU:H	1:871:A:ILE:O	5	0.12
(1,77)	1:828:A:LEU:H	1:871:A:ILE:O	17	0.12
(1,72)	1:826:A:MET:O	1:870:A:ASP:N	6	0.12
(1,70)	1:825:A:MET:O	1:850:A:GLN:N	17	0.12
(1,62)	1:792:A:PRO:O	1:796:A:ALA:H	16	0.12
(1,53)	1:764:A:THR:O	1:783:A:HIS:N	9	0.12
(1,32)	1:722:A:LEU:O	1:726:A:LEU:H	1	0.12
(1,29)	1:721:A:PHE:O	1:725:A:SER:N	1	0.12
(1,29)	1:721:A:PHE:O	1:725:A:SER:N	3	0.12
(1,29)	1:721:A:PHE:O	1:725:A:SER:N	15	0.12
(1,29)	1:721:A:PHE:O	1:725:A:SER:N	17	0.12
(1,24)	1:718:A:LEU:O	1:722:A:LEU:H	5	0.12
(1,23)	1:718:A:LEU:O	1:722:A:LEU:N	15	0.12
(1,23)	1:718:A:LEU:O	1:722:A:LEU:N	18	0.12
(1,21)	1:717:A:SER:O	1:721:A:PHE:N	2	0.12
(1,21)	1:717:A:SER:O	1:721:A:PHE:N	7	0.12
(1,21)	1:717:A:SER:O	1:721:A:PHE:N	17	0.12
(1,17)	1:712:A:ALA:O	1:750:A:ASP:N	5	0.12
(1,12)	1:711:A:LEU:N	1:734:A:THR:O	19	0.12
(1,4)	1:709:A:CYS:H	1:732:A:VAL:O	4	0.12
(3,962)	1:942:A:ARG:H	1:945:A:LYS:HE2	16	0.11
(3,962)	1:942:A:ARG:H	1:945:A:LYS:HE3	16	0.11
(3,702)	1:864:A:LEU:HG	1:865:A:SER:HA	8	0.11
(3,702)	1:864:A:LEU:HG	1:865:A:SER:HA	15	0.11
(3,540)	1:831:A:ASP:HA	1:856:A:ASP:H	16	0.11
(3,540)	1:831:A:ASP:HA	1:856:A:ASP:H	18	0.11
(3,356)	1:775:A:GLU:HG3	1:779:A:GLY:H	19	0.11
(3,347)	1:775:A:GLU:H	1:780:A:GLU:HA	9	0.11
(3,327)	1:765:A:PHE:HB2	1:784:A:SER:HA	20	0.11
(3,269)	1:752:A:VAL:HB	1:770:A:ILE:HA	14	0.11
(3,264)	1:750:A:ASP:HB3	1:765:A:PHE:H	16	0.11
(3,197)	1:742:A:THR:HA	1:760:A:ARG:H	12	0.11
(3,197)	1:742:A:THR:HA	1:760:A:ARG:H	16	0.11
(3,7)	1:705:A:SER:H	1:730:A:GLY:H	4	0.11
(2,2144)	1:934:A:GLN:H	1:934:A:GLN:HG2	19	0.11
(2,2092)	1:930:A:ASP:H	1:931:A:VAL:HG11	12	0.11
(2,2092)	1:930:A:ASP:H	1:931:A:VAL:HG12	12	0.11
(2,2092)	1:930:A:ASP:H	1:931:A:VAL:HG13	12	0.11

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,2009)	1:922:A:CYS:HA	1:923:A:LEU:HB3	5	0.11
(2,2009)	1:922:A:CYS:HA	1:923:A:LEU:HB3	7	0.11
(2,2009)	1:922:A:CYS:HA	1:923:A:LEU:HB3	20	0.11
(2,1853)	1:893:A:LEU:H	1:893:A:LEU:HG	9	0.11
(2,1774)	1:884:A:TYR:H	1:885:A:ARG:HD2	2	0.11
(2,1678)	1:869:A:ILE:HA	1:871:A:ILE:H	8	0.11
(2,1448)	1:840:A:LEU:HG	1:841:A:ALA:HA	20	0.11
(2,1304)	1:828:A:LEU:HB3	1:852:A:LYS:H	6	0.11
(2,1304)	1:828:A:LEU:HB3	1:852:A:LYS:H	10	0.11
(2,1304)	1:828:A:LEU:HB3	1:852:A:LYS:H	13	0.11
(2,1239)	1:825:A:MET:H	1:849:A:TYR:HA	3	0.11
(2,1230)	1:824:A:ASP:H	1:825:A:MET:H	15	0.11
(2,956)	1:775:A:GLU:HG2	1:776:A:LYS:H	1	0.11
(2,956)	1:775:A:GLU:HG2	1:776:A:LYS:H	2	0.11
(2,956)	1:775:A:GLU:HG2	1:776:A:LYS:H	5	0.11
(2,936)	1:774:A:LEU:HG	1:781:A:TRP:HA	8	0.11
(2,936)	1:774:A:LEU:HG	1:781:A:TRP:HA	10	0.11
(2,936)	1:774:A:LEU:HG	1:781:A:TRP:HA	12	0.11
(2,930)	1:774:A:LEU:HB3	1:782:A:VAL:HB	5	0.11
(2,867)	1:764:A:THR:HG21	1:782:A:VAL:HA	6	0.11
(2,867)	1:764:A:THR:HG22	1:782:A:VAL:HA	6	0.11
(2,867)	1:764:A:THR:HG23	1:782:A:VAL:HA	6	0.11
(2,759)	1:757:A:TRP:HD1	1:759:A:GLY:HA2	6	0.11
(2,719)	1:752:A:VAL:HG21	1:769:A:HIS:HB2	6	0.11
(2,719)	1:752:A:VAL:HG22	1:769:A:HIS:HB2	6	0.11
(2,719)	1:752:A:VAL:HG23	1:769:A:HIS:HB2	6	0.11
(2,708)	1:751:A:GLU:HG3	1:752:A:VAL:HG21	18	0.11
(2,708)	1:751:A:GLU:HG3	1:752:A:VAL:HG22	18	0.11
(2,708)	1:751:A:GLU:HG3	1:752:A:VAL:HG23	18	0.11
(2,686)	1:749:A:THR:HB	1:753:A:VAL:HB	3	0.11
(2,585)	1:745:A:ASP:HA	1:746:A:VAL:HB	17	0.11
(2,575)	1:744:A:GLU:HG3	1:745:A:ASP:H	10	0.11
(2,309)	1:720:A:GLN:HA	1:723:A:GLU:HB2	7	0.11
(2,254)	1:716:A:ALA:H	1:720:A:GLN:H	4	0.11
(2,254)	1:716:A:ALA:H	1:720:A:GLN:H	13	0.11
(1,201)	1:944:A:ARG:O	1:948:A:ASP:H	17	0.11
(1,190)	1:938:A:LEU:O	1:942:A:ARG:N	2	0.11
(1,180)	1:933:A:LYS:O	1:937:A:THR:N	5	0.11
(1,180)	1:933:A:LYS:O	1:937:A:THR:N	10	0.11
(1,175)	1:931:A:VAL:O	1:935:A:THR:H	2	0.11
(1,163)	1:911:A:LYS:O	1:915:A:LEU:H	1	0.11
(1,158)	1:908:A:ALA:O	1:912:A:GLN:N	1	0.11

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,158)	1:908:A:ALA:O	1:912:A:GLN:N	20	0.11
(1,150)	1:899:A:VAL:O	1:921:A:SER:N	6	0.11
(1,150)	1:899:A:VAL:O	1:921:A:SER:N	10	0.11
(1,149)	1:899:A:VAL:O	1:921:A:SER:H	1	0.11
(1,141)	1:887:A:THR:O	1:891:A:ARG:H	1	0.11
(1,141)	1:887:A:THR:O	1:891:A:ARG:H	20	0.11
(1,135)	1:884:A:TYR:O	1:888:A:GLN:H	7	0.11
(1,121)	1:862:A:ASN:O	1:866:A:LYS:H	1	0.11
(1,114)	1:858:A:VAL:O	1:862:A:ASN:N	2	0.11
(1,112)	1:843:A:GLN:O	1:847:A:LEU:N	7	0.11
(1,111)	1:843:A:GLN:O	1:847:A:LEU:H	16	0.11
(1,100)	1:837:A:ARG:O	1:841:A:ALA:N	7	0.11
(1,96)	1:835:A:ILE:O	1:839:A:LEU:N	4	0.11
(1,96)	1:835:A:ILE:O	1:839:A:LEU:N	9	0.11
(1,92)	1:832:A:ASP:N	1:875:A:ASP:O	1	0.11
(1,71)	1:826:A:MET:O	1:870:A:ASP:H	20	0.11
(1,70)	1:825:A:MET:O	1:850:A:GLN:N	9	0.11
(1,70)	1:825:A:MET:O	1:850:A:GLN:N	15	0.11
(1,66)	1:794:A:LEU:O	1:798:A:ILE:H	5	0.11
(1,55)	1:766:A:CYS:N	1:783:A:HIS:O	5	0.11
(1,38)	1:747:A:LEU:H	1:761:A:ALA:O	18	0.11
(1,36)	1:745:A:ASP:O	1:760:A:ARG:H	9	0.11
(1,30)	1:721:A:PHE:O	1:725:A:SER:H	12	0.11
(1,29)	1:721:A:PHE:O	1:725:A:SER:N	8	0.11
(1,23)	1:718:A:LEU:O	1:722:A:LEU:N	19	0.11
(1,21)	1:717:A:SER:O	1:721:A:PHE:N	8	0.11
(1,17)	1:712:A:ALA:O	1:750:A:ASP:N	7	0.11
(1,12)	1:711:A:LEU:N	1:734:A:THR:O	5	0.11
(1,12)	1:711:A:LEU:N	1:734:A:THR:O	17	0.11
(3,381)	1:783:A:HIS:HD2	1:784:A:SER:HB3	8	0.1
(3,327)	1:765:A:PHE:HB2	1:784:A:SER:HA	6	0.1
(3,269)	1:752:A:VAL:HB	1:770:A:ILE:HA	7	0.1
(2,1448)	1:840:A:LEU:HG	1:841:A:ALA:HA	1	0.1
(2,1399)	1:837:A:ARG:HA	1:837:A:ARG:HG3	6	0.1
(2,1230)	1:824:A:ASP:H	1:825:A:MET:H	3	0.1
(2,1139)	1:797:A:ARG:HD2	1:798:A:ILE:HB	8	0.1
(2,1139)	1:797:A:ARG:HD3	1:798:A:ILE:HB	8	0.1
(2,1139)	1:797:A:ARG:HD2	1:798:A:ILE:HB	12	0.1
(2,1139)	1:797:A:ARG:HD3	1:798:A:ILE:HB	12	0.1
(2,1015)	1:783:A:HIS:H	1:783:A:HIS:HD2	4	0.1
(2,1014)	1:782:A:VAL:HG21	1:783:A:HIS:HD2	14	0.1
(2,1014)	1:782:A:VAL:HG22	1:783:A:HIS:HD2	14	0.1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,1014)	1:782:A:VAL:HG23	1:783:A:HIS:HD2	14	0.1
(2,1005)	1:781:A:TRP:HE3	1:794:A:LEU:HB2	4	0.1
(2,1005)	1:781:A:TRP:HE3	1:794:A:LEU:HB2	17	0.1
(2,1005)	1:781:A:TRP:HE3	1:794:A:LEU:HB2	19	0.1
(2,957)	1:775:A:GLU:HG2	1:780:A:GLU:H	16	0.1
(2,948)	1:775:A:GLU:HA	1:776:A:LYS:HG2	1	0.1
(2,936)	1:774:A:LEU:HG	1:781:A:TRP:HA	7	0.1
(2,930)	1:774:A:LEU:HB3	1:782:A:VAL:HB	10	0.1
(2,692)	1:749:A:THR:HG21	1:764:A:THR:HB	9	0.1
(2,692)	1:749:A:THR:HG22	1:764:A:THR:HB	9	0.1
(2,692)	1:749:A:THR:HG23	1:764:A:THR:HB	9	0.1
(2,585)	1:745:A:ASP:HA	1:746:A:VAL:HB	5	0.1
(2,575)	1:744:A:GLU:HG3	1:745:A:ASP:H	5	0.1
(2,469)	1:732:A:VAL:HA	1:733:A:VAL:HB	10	0.1
(2,166)	1:711:A:LEU:HD21	1:736:A:TYR:H	19	0.1
(2,166)	1:711:A:LEU:HD22	1:736:A:TYR:H	19	0.1
(2,166)	1:711:A:LEU:HD23	1:736:A:TYR:H	19	0.1
(2,23)	1:707:A:LYS:H	1:707:A:LYS:HG3	2	0.1
(1,201)	1:944:A:ARG:O	1:948:A:ASP:H	6	0.1
(1,193)	1:940:A:ALA:O	1:944:A:ARG:H	4	0.1
(1,162)	1:910:A:GLU:O	1:914:A:CYS:N	12	0.1
(1,155)	1:903:A:THR:H	1:923:A:LEU:O	6	0.1
(1,150)	1:899:A:VAL:O	1:921:A:SER:N	8	0.1
(1,145)	1:889:A:ARG:O	1:893:A:LEU:H	15	0.1
(1,139)	1:886:A:LEU:O	1:890:A:ILE:H	3	0.1
(1,119)	1:861:A:LEU:O	1:865:A:SER:H	14	0.1
(1,114)	1:858:A:VAL:O	1:862:A:ASN:N	13	0.1
(1,114)	1:858:A:VAL:O	1:862:A:ASN:N	14	0.1
(1,108)	1:841:A:ALA:O	1:845:A:GLY:N	4	0.1
(1,99)	1:837:A:ARG:O	1:841:A:ALA:H	4	0.1
(1,92)	1:832:A:ASP:N	1:875:A:ASP:O	4	0.1
(1,90)	1:831:A:ASP:N	1:854:A:ALA:O	17	0.1
(1,90)	1:831:A:ASP:N	1:854:A:ALA:O	18	0.1
(1,85)	1:830:A:VAL:H	1:873:A:LEU:O	6	0.1
(1,85)	1:830:A:VAL:H	1:873:A:LEU:O	14	0.1
(1,84)	1:829:A:VAL:O	1:854:A:ALA:N	6	0.1
(1,77)	1:828:A:LEU:H	1:871:A:ILE:O	13	0.1
(1,70)	1:825:A:MET:O	1:850:A:GLN:N	1	0.1
(1,68)	1:795:A:LEU:O	1:799:A:TYR:H	15	0.1
(1,54)	1:764:A:THR:O	1:783:A:HIS:H	1	0.1
(1,32)	1:722:A:LEU:O	1:726:A:LEU:H	11	0.1
(1,24)	1:718:A:LEU:O	1:722:A:LEU:H	16	0.1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,21)	1:717:A:SER:O	1:721:A:PHE:N	11	0.1
(1,11)	1:711:A:LEU:H	1:734:A:THR:O	18	0.1
(1,7)	1:710:A:TRP:N	1:746:A:VAL:O	11	0.1
(1,7)	1:710:A:TRP:N	1:746:A:VAL:O	17	0.1

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

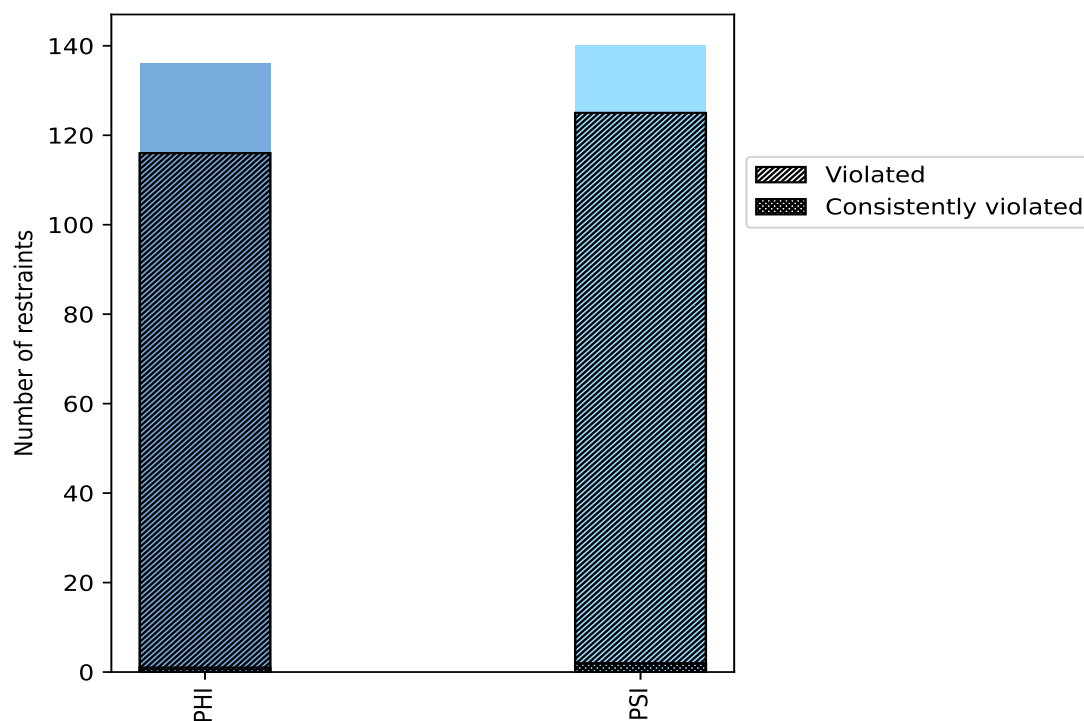
10.1 Summary of dihedral-angle violations [i](#)

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

Angle type	Count	% ¹	Violated ³			Consistently Violated ⁴		
			Count	% ²	% ¹	Count	% ²	% ¹
PHI	136	49.3	116	85.3	42.0	1	0.7	0.4
PSI	140	50.7	125	89.3	45.3	2	1.4	0.7
Total	276	100.0	241	87.3	87.3	3	1.1	1.1

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](#)



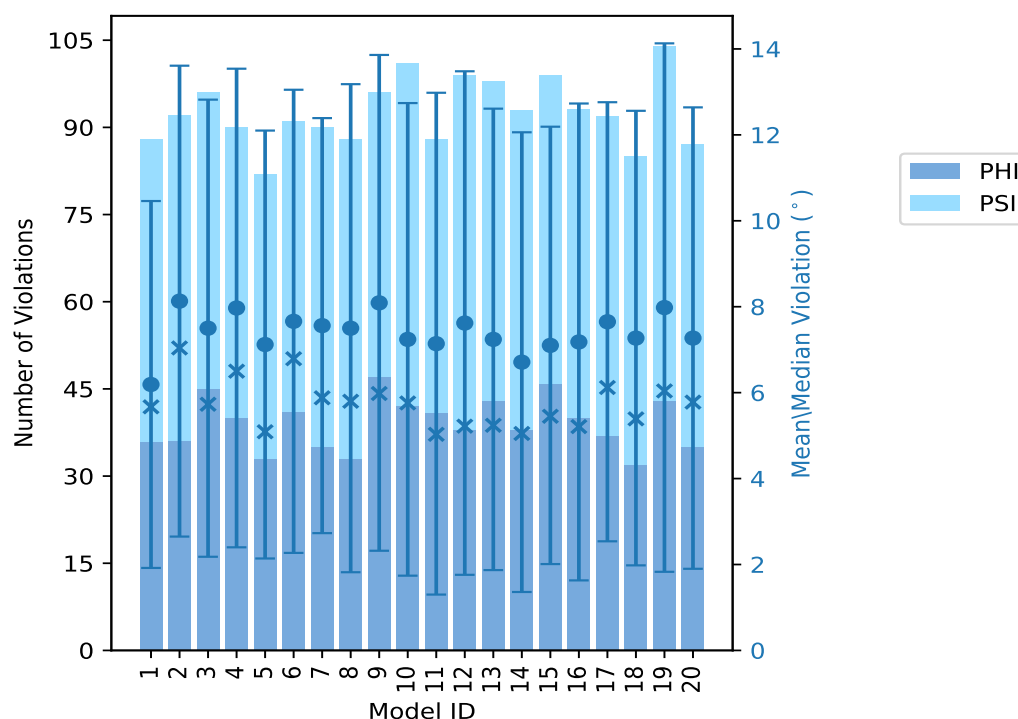
Violated and consistently violated restraints are shown using different hatch patterns in their respective categories

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 (°)
	PHI	PSI	Total				
1	36	52	88	6.19	17.94	4.27	5.67
2	36	56	92	8.13	23.53	5.48	7.04
3	45	51	96	7.5	21.14	5.32	5.73
4	40	50	90	7.97	23.75	5.57	6.5
5	33	49	82	7.12	19.44	4.98	5.09
6	41	50	91	7.66	25.04	5.39	6.79
7	35	55	90	7.56	24.09	4.83	5.88
8	33	55	88	7.5	25.72	5.68	5.8
9	47	49	96	8.09	25.31	5.77	5.98
10	42	59	101	7.24	21.86	5.5	5.76
11	41	47	88	7.14	26.51	5.84	5.03
12	38	61	99	7.62	25.02	5.86	5.22
13	43	55	98	7.24	23.72	5.37	5.24
14	38	55	93	6.71	23.85	5.35	5.05
15	46	53	99	7.1	23.01	5.09	5.45
16	40	53	93	7.18	24.18	5.55	5.21
17	37	55	92	7.65	21.59	5.11	6.12
18	32	53	85	7.27	24.78	5.29	5.39
19	43	61	104	7.98	25.82	6.15	6.04
20	35	52	87	7.27	23.77	5.37	5.78

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



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

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

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

Number of violated restraints			Fraction of the ensemble	
PHI	PSI	Total	Count ¹	%
17	8	25	1	5.0
16	15	31	2	10.0
17	9	26	3	15.0
8	10	18	4	20.0
6	10	16	5	25.0
5	5	10	6	30.0
5	8	13	7	35.0
5	2	7	8	40.0
4	10	14	9	45.0
3	6	9	10	50.0
2	2	4	11	55.0

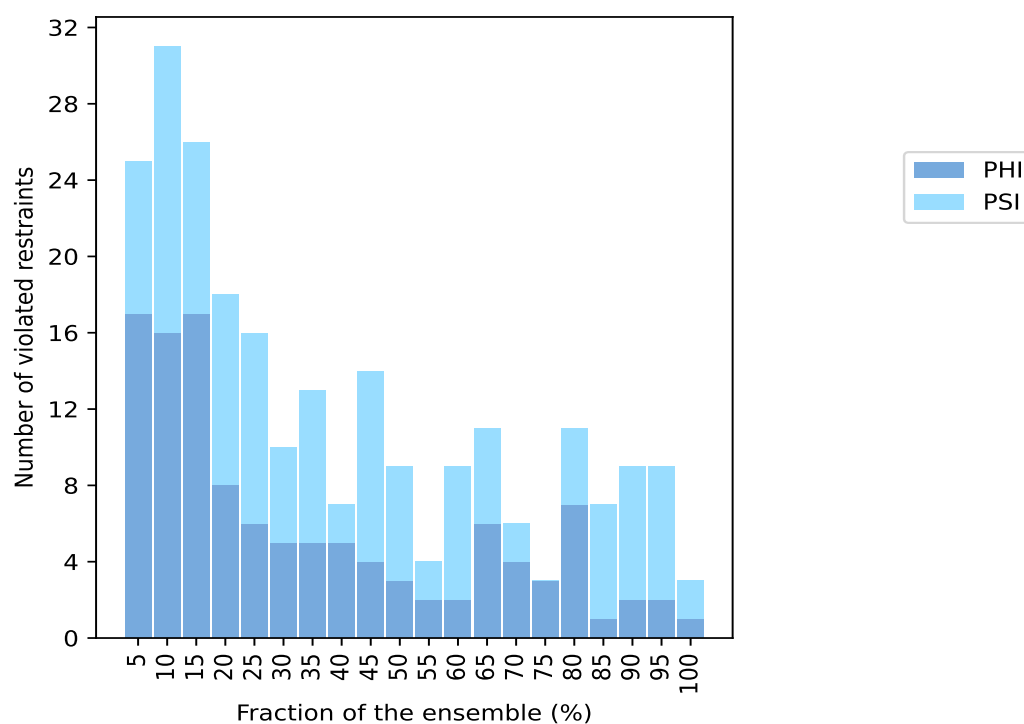
Continued on next page...

Continued from previous page...

Number of violated restraints			Fraction of the ensemble	
PHI	PSI	Total	Count ¹	%
2	7	9	12	60.0
6	5	11	13	65.0
4	2	6	14	70.0
3	0	3	15	75.0
7	4	11	16	80.0
1	6	7	17	85.0
2	7	9	18	90.0
2	7	9	19	95.0
1	2	3	20	100.0

¹ Number of models with violations

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

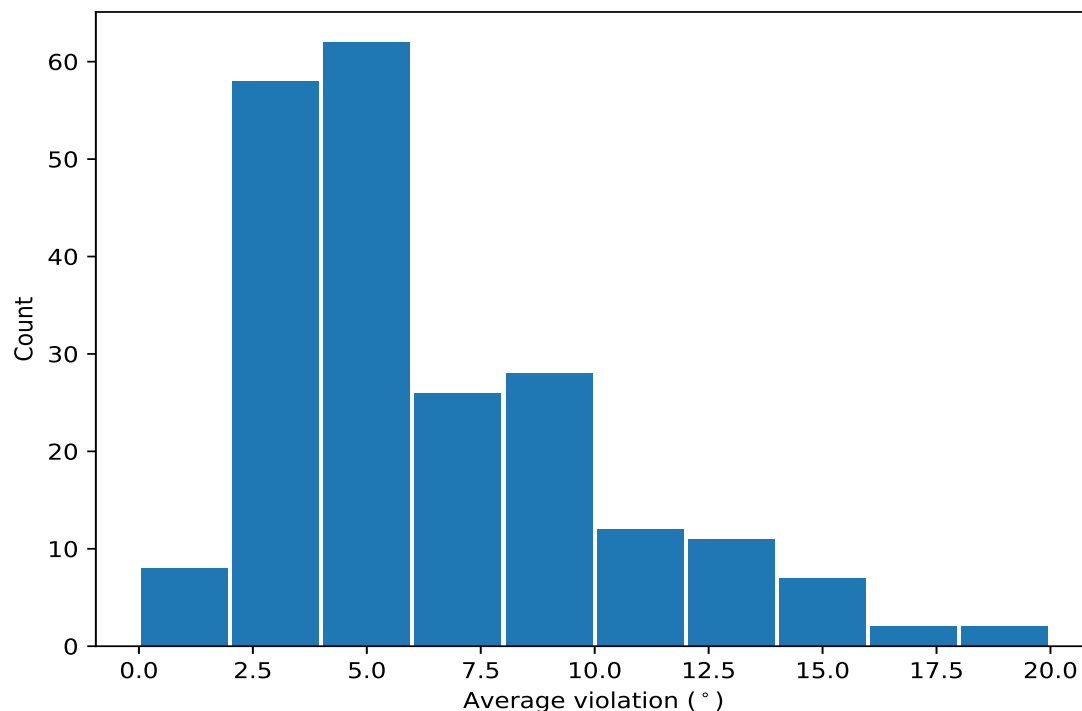


10.4 Most violated dihedral-angle restraints in the ensemble ⓘ

10.4.1 Histogram : Distribution of mean dihedral-angle violations ⓘ

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

in the ensemble



10.4.2 Table: Most violated dihedral-angle restraints ⓘ

The following table provides the mean and the standard deviation of the 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
(1,86)	1:784:A:SER:N	1:784:A:SER:CA	1:784:A:SER:C	1:785:A:VAL:N	20	16.22	0.98	16.31
(1,168)	1:863:A:VAL:N	1:863:A:VAL:CA	1:863:A:VAL:C	1:864:A:LEU:N	20	5.95	0.89	6.18
(1,227)	1:916:A:GLU:C	1:917:A:SER:N	1:917:A:SER:CA	1:917:A:SER:C	20	5.62	1.45	5.94
(1,154)	1:855:A:ASN:N	1:855:A:ASN:CA	1:855:A:ASN:C	1:856:A:ASP:N	19	19.93	2.01	20.03
(1,74)	1:766:A:CYS:N	1:766:A:CYS:CA	1:766:A:CYS:C	1:767:A:ARG:N	19	15.09	2.31	15.47
(1,236)	1:923:A:LEU:N	1:923:A:LEU:CA	1:923:A:LEU:C	1:924:A:SER:N	19	14.1	7.02	12.45
(1,181)	1:875:A:ASP:N	1:875:A:ASP:CA	1:875:A:ASP:C	1:876:A:VAL:N	19	13.64	6.52	15.31
(1,78)	1:780:A:GLU:N	1:780:A:GLU:CA	1:780:A:GLU:C	1:781:A:TRP:N	19	13.43	3.38	13.94
(1,266)	1:942:A:ARG:N	1:942:A:ARG:CA	1:942:A:ARG:C	1:943:A:VAL:N	19	7.09	0.69	7.06
(1,268)	1:943:A:VAL:N	1:943:A:VAL:CA	1:943:A:VAL:C	1:944:A:ARG:N	19	6.3	1.71	6.56
(1,129)	1:839:A:LEU:C	1:840:A:LEU:N	1:840:A:LEU:CA	1:840:A:LEU:C	19	4.46	1.74	4.68
(1,123)	1:836:A:ASN:C	1:837:A:ARG:N	1:837:A:ARG:CA	1:837:A:ARG:C	19	3.52	1.17	3.57
(1,155)	1:855:A:ASN:C	1:856:A:ASP:N	1:856:A:ASP:CA	1:856:A:ASP:C	18	16.79	6.96	17.07
(1,230)	1:918:A:GLY:N	1:918:A:GLY:CA	1:918:A:GLY:C	1:919:A:MET:N	18	13.75	2.55	14.67
(1,52)	1:746:A:VAL:N	1:746:A:VAL:CA	1:746:A:VAL:C	1:747:A:LEU:N	18	9.46	4.22	11.8
(1,238)	1:924:A:SER:N	1:924:A:SER:CA	1:924:A:SER:C	1:925:A:LYS:N	18	9.32	5.01	7.97
(1,56)	1:748:A:ILE:N	1:748:A:ILE:CA	1:748:A:ILE:C	1:749:A:THR:N	18	8.29	2.28	9.34
(1,110)	1:827:A:ILE:C	1:828:A:LEU:N	1:828:A:LEU:CA	1:828:A:LEU:C	18	7.86	4.82	6.86
(1,128)	1:839:A:LEU:N	1:839:A:LEU:CA	1:839:A:LEU:C	1:840:A:LEU:N	18	5.64	2.27	5.31
(1,158)	1:858:A:VAL:N	1:858:A:VAL:CA	1:858:A:VAL:C	1:859:A:ASP:N	18	5.22	1.64	6.06

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Models ¹	Mean	SD ²	Median
(1,248)	1:933:A:LYS:N	1:933:A:LYS:CA	1:933:A:LYS:C	1:934:A:GLN:N	18	3.79	1.1	4.09
(1,179)	1:874:A:SER:N	1:874:A:SER:CA	1:874:A:SER:C	1:875:A:ASP:N	17	14.64	4.54	15.3
(1,148)	1:852:A:LYS:N	1:852:A:LYS:CA	1:852:A:LYS:C	1:853:A:THR:N	17	13.86	5.4	13.74
(1,212)	1:904:A:ALA:N	1:904:A:ALA:CA	1:904:A:ALA:C	1:905:A:ASN:N	17	12.66	5.61	15.61
(1,46)	1:741:A:PRO:N	1:741:A:PRO:CA	1:741:A:PRO:C	1:742:A:THR:N	17	11.61	3.8	13.54
(1,130)	1:840:A:LEU:N	1:840:A:LEU:CA	1:840:A:LEU:C	1:841:A:ALA:N	17	5.26	2.45	5.4
(1,194)	1:890:A:ILE:C	1:891:A:ARG:N	1:891:A:ARG:CA	1:891:A:ARG:C	17	4.93	1.28	5.32
(1,25)	1:722:A:LEU:N	1:722:A:LEU:CA	1:722:A:LEU:C	1:723:A:GLU:N	17	3.42	1.17	4.12
(1,199)	1:895:A:LEU:N	1:895:A:LEU:CA	1:895:A:LEU:C	1:896:A:THR:N	16	15.24	5.17	17.6
(1,73)	1:765:A:PHE:C	1:766:A:CYS:N	1:766:A:CYS:CA	1:766:A:CYS:C	16	14.4	4.97	16.24
(1,144)	1:850:A:GLN:N	1:850:A:GLN:CA	1:850:A:GLN:C	1:851:A:CYS:N	16	10.95	5.0	13.5
(1,11)	1:711:A:LEU:C	1:712:A:ALA:N	1:712:A:ALA:CA	1:712:A:ALA:C	16	10.26	2.4	11.22
(1,149)	1:852:A:LYS:C	1:853:A:THR:N	1:853:A:THR:CA	1:853:A:THR:C	16	10.24	4.05	11.76
(1,63)	1:760:A:ARG:C	1:761:A:ALA:N	1:761:A:ALA:CA	1:761:A:ALA:C	16	6.39	2.74	6.43
(1,195)	1:891:A:ARG:N	1:891:A:ARG:CA	1:891:A:ARG:C	1:892:A:GLN:N	16	5.69	2.19	6.76
(1,157)	1:857:A:GLY:C	1:858:A:VAL:N	1:858:A:VAL:CA	1:858:A:VAL:C	16	5.11	1.34	5.47
(1,183)	1:885:A:ARG:N	1:885:A:ARG:CA	1:885:A:ARG:C	1:886:A:LEU:N	16	4.04	1.61	4.46
(1,223)	1:914:A:CYS:C	1:915:A:LEU:N	1:915:A:LEU:CA	1:915:A:LEU:C	16	3.12	0.98	3.24
(1,137)	1:843:A:GLN:C	1:844:A:LEU:N	1:844:A:LEU:CA	1:844:A:LEU:C	16	2.86	1.11	3.06
(1,7)	1:709:A:CYS:C	1:710:A:TRP:N	1:710:A:TRP:CA	1:710:A:TRP:C	15	10.88	2.96	11.86
(1,83)	1:782:A:VAL:C	1:783:A:HIS:N	1:783:A:HIS:CA	1:783:A:HIS:C	15	9.6	5.41	8.5
(1,32)	1:725:A:SER:C	1:726:A:LEU:N	1:726:A:LEU:CA	1:726:A:LEU:C	15	5.29	3.08	5.42
(1,6)	1:709:A:CYS:N	1:709:A:CYS:CA	1:709:A:CYS:C	1:710:A:TRP:N	14	8.14	3.45	8.56
(1,205)	1:900:A:ILE:C	1:901:A:GLY:N	1:901:A:GLY:CA	1:901:A:GLY:C	14	6.28	3.98	5.44
(1,17)	1:718:A:LEU:N	1:718:A:LEU:CA	1:718:A:LEU:C	1:719:A:CYS:N	14	4.65	0.68	4.64
(1,225)	1:915:A:LEU:C	1:916:A:GLU:N	1:916:A:GLU:CA	1:916:A:GLU:C	14	3.97	1.52	4.38
(1,92)	1:793:A:ALA:C	1:794:A:LEU:N	1:794:A:LEU:CA	1:794:A:LEU:C	14	3.2	1.05	3.38
(1,98)	1:796:A:ALA:C	1:797:A:ARG:N	1:797:A:ARG:CA	1:797:A:ARG:C	14	3.17	0.74	3.29
(1,84)	1:783:A:HIS:N	1:783:A:HIS:CA	1:783:A:HIS:C	1:784:A:SER:N	13	11.27	5.95	11.08
(1,113)	1:829:A:VAL:N	1:829:A:VAL:CA	1:829:A:VAL:C	1:830:A:VAL:N	13	10.02	6.49	8.69
(1,40)	1:732:A:VAL:C	1:733:A:VAL:N	1:733:A:VAL:CA	1:733:A:VAL:C	13	9.69	5.96	9.81
(1,75)	1:771:A:GLY:C	1:772:A:ILE:N	1:772:A:ILE:CA	1:772:A:ILE:C	13	9.09	2.73	10.33
(1,85)	1:783:A:HIS:C	1:784:A:SER:N	1:784:A:SER:CA	1:784:A:SER:C	13	8.25	3.67	7.22
(1,143)	1:849:A:TYR:C	1:850:A:GLN:N	1:850:A:GLN:CA	1:850:A:GLN:C	13	8.01	3.36	7.97
(1,5)	1:708:A:ARG:C	1:709:A:CYS:N	1:709:A:CYS:CA	1:709:A:CYS:C	13	7.0	3.27	5.78
(1,228)	1:917:A:SER:N	1:917:A:SER:CA	1:917:A:SER:C	1:918:A:GLY:N	13	6.95	2.5	6.82
(1,240)	1:929:A:LEU:N	1:929:A:LEU:CA	1:929:A:LEU:C	1:930:A:ASP:N	13	5.24	1.7	5.75
(1,87)	1:790:A:GLU:C	1:791:A:LEU:N	1:791:A:LEU:CA	1:791:A:LEU:C	13	4.63	2.45	3.89
(1,166)	1:862:A:ASN:N	1:862:A:ASN:CA	1:862:A:ASN:C	1:863:A:VAL:N	13	4.01	1.91	4.77
(1,61)	1:754:A:SER:C	1:755:A:LYS:N	1:755:A:LYS:CA	1:755:A:LYS:C	12	19.93	6.41	22.38
(1,211)	1:903:A:THR:C	1:904:A:ALA:N	1:904:A:ALA:CA	1:904:A:ALA:C	12	12.67	5.17	13.64
(1,206)	1:901:A:GLY:N	1:901:A:GLY:CA	1:901:A:GLY:C	1:902:A:VAL:N	12	9.9	5.57	9.27
(1,4)	1:708:A:ARG:N	1:708:A:ARG:CA	1:708:A:ARG:C	1:709:A:CYS:N	12	9.62	3.91	9.34
(1,276)	1:947:A:ARG:N	1:947:A:ARG:CA	1:947:A:ARG:C	1:948:A:ASP:N	12	9.28	3.48	10.33
(1,68)	1:763:A:VAL:N	1:763:A:VAL:CA	1:763:A:VAL:C	1:764:A:THR:N	12	9.21	4.59	9.0
(1,224)	1:915:A:LEU:N	1:915:A:LEU:CA	1:915:A:LEU:C	1:916:A:GLU:N	12	5.79	1.94	6.66
(1,138)	1:844:A:LEU:N	1:844:A:LEU:CA	1:844:A:LEU:C	1:845:A:GLY:N	12	3.29	1.61	3.06
(1,29)	1:724:A:THR:N	1:724:A:THR:CA	1:724:A:THR:C	1:725:A:SER:N	12	3.19	1.38	3.18
(1,115)	1:830:A:VAL:N	1:830:A:VAL:CA	1:830:A:VAL:C	1:831:A:ASP:N	11	12.97	6.89	17.82
(1,34)	1:726:A:LEU:C	1:727:A:GLN:N	1:727:A:GLN:CA	1:727:A:GLN:C	11	5.48	1.9	6.2
(1,272)	1:945:A:LYS:N	1:945:A:LYS:CA	1:945:A:LYS:C	1:946:A:SER:N	11	5.18	2.78	4.4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Models ¹	Mean	SD ²	Median
(1,24)	1:721:A:PHE:C	1:722:A:LEU:N	1:722:A:LEU:CA	1:722:A:LEU:C	11	2.64	0.71	2.66
(1,36)	1:730:A:GLY:C	1:731:A:ILE:N	1:731:A:ILE:CA	1:731:A:ILE:C	10	13.56	8.17	13.52
(1,117)	1:831:A:ASP:N	1:831:A:ASP:CA	1:831:A:ASP:C	1:832:A:ASP:N	10	8.41	3.32	7.72
(1,235)	1:922:A:CYS:C	1:923:A:LEU:N	1:923:A:LEU:CA	1:923:A:LEU:C	10	7.36	4.53	6.24
(1,204)	1:900:A:ILE:N	1:900:A:ILE:CA	1:900:A:ILE:C	1:901:A:GLY:N	10	7.27	5.38	6.35
(1,189)	1:888:A:GLN:N	1:888:A:GLN:CA	1:888:A:GLN:C	1:889:A:ARG:N	10	4.74	2.2	5.26
(1,126)	1:838:A:ARG:N	1:838:A:ARG:CA	1:838:A:ARG:C	1:839:A:LEU:N	10	4.73	1.62	5.4
(1,99)	1:797:A:ARG:N	1:797:A:ARG:CA	1:797:A:ARG:C	1:798:A:ILE:N	10	4.49	2.24	4.28
(1,30)	1:724:A:THR:C	1:725:A:SER:N	1:725:A:SER:CA	1:725:A:SER:C	10	3.3	1.19	3.47
(1,162)	1:860:A:ALA:N	1:860:A:ALA:CA	1:860:A:ALA:C	1:861:A:LEU:N	10	3.18	1.9	2.97
(1,103)	1:799:A:TYR:N	1:799:A:TYR:CA	1:799:A:TYR:C	1:800:A:LEU:N	9	13.94	8.11	15.22
(1,105)	1:825:A:MET:N	1:825:A:MET:CA	1:825:A:MET:C	1:826:A:MET:N	9	11.44	6.98	8.34
(1,177)	1:873:A:LEU:N	1:873:A:LEU:CA	1:873:A:LEU:C	1:874:A:SER:N	9	10.44	6.24	8.71
(1,1)	1:706:A:GLY:C	1:707:A:LYS:N	1:707:A:LYS:CA	1:707:A:LYS:C	9	9.57	4.62	8.13
(1,203)	1:899:A:VAL:C	1:900:A:ILE:N	1:900:A:ILE:CA	1:900:A:ILE:C	9	7.25	4.25	7.85
(1,160)	1:859:A:ASP:N	1:859:A:ASP:CA	1:859:A:ASP:C	1:860:A:ALA:N	9	7.11	2.85	8.66
(1,38)	1:731:A:ILE:C	1:732:A:VAL:N	1:732:A:VAL:CA	1:732:A:VAL:C	9	6.45	4.59	4.67
(1,244)	1:931:A:VAL:N	1:931:A:VAL:CA	1:931:A:VAL:C	1:932:A:ILE:N	9	6.0	1.76	5.98
(1,270)	1:944:A:ARG:N	1:944:A:ARG:CA	1:944:A:ARG:C	1:945:A:LYS:N	9	5.94	3.61	7.15
(1,232)	1:921:A:SER:N	1:921:A:SER:CA	1:921:A:SER:C	1:922:A:CYS:N	9	4.84	3.4	3.97
(1,118)	1:834:A:PRO:N	1:834:A:PRO:CA	1:834:A:PRO:C	1:835:A:ILE:N	9	4.73	2.59	4.46
(1,260)	1:939:A:TYR:N	1:939:A:TYR:CA	1:939:A:TYR:C	1:940:A:ALA:N	9	4.65	2.3	5.67
(1,163)	1:860:A:ALA:C	1:861:A:LEU:N	1:861:A:LEU:CA	1:861:A:LEU:C	9	4.25	1.46	4.59
(1,19)	1:719:A:CYS:N	1:719:A:CYS:CA	1:719:A:CYS:C	1:720:A:GLN:N	9	3.59	1.06	3.77
(1,104)	1:824:A:ASP:C	1:825:A:MET:N	1:825:A:MET:CA	1:825:A:MET:C	8	10.55	6.68	9.32
(1,147)	1:851:A:CYS:C	1:852:A:LYS:N	1:852:A:LYS:CA	1:852:A:LYS:C	8	9.28	7.09	6.4
(1,60)	1:750:A:ASP:N	1:750:A:ASP:CA	1:750:A:ASP:C	1:751:A:GLU:N	8	9.06	5.13	10.52
(1,229)	1:917:A:SER:C	1:918:A:GLY:N	1:918:A:GLY:CA	1:918:A:GLY:C	8	8.04	3.27	6.9
(1,111)	1:828:A:LEU:N	1:828:A:LEU:CA	1:828:A:LEU:C	1:829:A:VAL:N	8	4.15	3.04	2.67
(1,221)	1:913:A:ARG:C	1:914:A:CYS:N	1:914:A:CYS:CA	1:914:A:CYS:C	8	3.42	1.15	3.52
(1,119)	1:834:A:PRO:C	1:835:A:ILE:N	1:835:A:ILE:CA	1:835:A:ILE:C	8	2.54	1.07	2.2
(1,72)	1:765:A:PHE:N	1:765:A:PHE:CA	1:765:A:PHE:C	1:766:A:CYS:N	7	15.2	7.79	15.7
(1,202)	1:899:A:VAL:N	1:899:A:VAL:CA	1:899:A:VAL:C	1:900:A:ILE:N	7	7.63	3.46	7.06
(1,153)	1:854:A:ALA:C	1:855:A:ASN:N	1:855:A:ASN:CA	1:855:A:ASN:C	7	6.86	3.92	4.58
(1,39)	1:732:A:VAL:N	1:732:A:VAL:CA	1:732:A:VAL:C	1:733:A:VAL:N	7	6.42	3.88	4.71
(1,275)	1:946:A:SER:C	1:947:A:ARG:N	1:947:A:ARG:CA	1:947:A:ARG:C	7	5.91	4.49	6.18
(1,226)	1:916:A:GLU:N	1:916:A:GLU:CA	1:916:A:GLU:C	1:917:A:SER:N	7	5.55	1.7	6.28
(1,201)	1:898:A:PRO:C	1:899:A:VAL:N	1:899:A:VAL:CA	1:899:A:VAL:C	7	5.37	2.77	6.36
(1,120)	1:835:A:ILE:N	1:835:A:ILE:CA	1:835:A:ILE:C	1:836:A:ASN:N	7	4.56	2.07	4.38
(1,222)	1:914:A:CYS:N	1:914:A:CYS:CA	1:914:A:CYS:C	1:915:A:LEU:N	7	4.05	2.17	4.89
(1,259)	1:938:A:LEU:C	1:939:A:TYR:N	1:939:A:TYR:CA	1:939:A:TYR:C	7	3.32	2.62	2.17
(1,97)	1:796:A:ALA:N	1:796:A:ALA:CA	1:796:A:ALA:C	1:797:A:ARG:N	7	3.1	1.67	3.27
(1,239)	1:928:A:THR:C	1:929:A:LEU:N	1:929:A:LEU:CA	1:929:A:LEU:C	7	2.87	1.17	2.57
(1,170)	1:864:A:LEU:N	1:864:A:LEU:CA	1:864:A:LEU:C	1:865:A:SER:N	7	2.53	0.87	2.67
(1,47)	1:741:A:PRO:C	1:742:A:THR:N	1:742:A:THR:CA	1:742:A:THR:C	6	10.38	7.08	10.2
(1,101)	1:798:A:ILE:N	1:798:A:ILE:CA	1:798:A:ILE:C	1:799:A:TYR:N	6	7.25	3.38	7.92
(1,71)	1:764:A:THR:C	1:765:A:PHE:N	1:765:A:PHE:CA	1:765:A:PHE:C	6	5.84	2.71	5.26
(1,66)	1:762:A:VAL:N	1:762:A:VAL:CA	1:762:A:VAL:C	1:763:A:VAL:N	6	4.57	3.25	3.97
(1,243)	1:930:A:ASP:C	1:931:A:VAL:N	1:931:A:VAL:CA	1:931:A:VAL:C	6	4.49	1.37	3.97
(1,27)	1:723:A:GLU:N	1:723:A:GLU:CA	1:723:A:GLU:C	1:724:A:THR:N	6	3.9	1.89	4.36
(1,182)	1:884:A:TYR:C	1:885:A:ARG:N	1:885:A:ARG:CA	1:885:A:ARG:C	6	3.78	1.51	4.5

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Models ¹	Mean	SD ²	Median
(1,250)	1:934:A:GLN:N	1:934:A:GLN:CA	1:934:A:GLN:C	1:935:A:THR:N	6	3.72	2.46	3.45
(1,193)	1:890:A:ILE:N	1:890:A:ILE:CA	1:890:A:ILE:C	1:891:A:ARG:N	6	3.62	1.62	3.51
(1,261)	1:939:A:TYR:C	1:940:A:ALA:N	1:940:A:ALA:CA	1:940:A:ALA:C	6	2.25	1.09	1.82
(1,102)	1:798:A:ILE:C	1:799:A:TYR:N	1:799:A:TYR:CA	1:799:A:TYR:C	5	9.54	3.14	10.91
(1,208)	1:902:A:VAL:N	1:902:A:VAL:CA	1:902:A:VAL:C	1:903:A:THR:N	5	8.41	3.96	8.66
(1,145)	1:850:A:GLN:C	1:851:A:CYS:N	1:851:A:CYS:CA	1:851:A:CYS:C	5	8.21	5.33	7.61
(1,146)	1:851:A:CYS:N	1:851:A:CYS:CA	1:851:A:CYS:C	1:852:A:LYS:N	5	8.01	4.3	9.06
(1,150)	1:853:A:THR:N	1:853:A:THR:CA	1:853:A:THR:C	1:854:A:ALA:N	5	7.21	2.54	7.16
(1,200)	1:898:A:PRO:N	1:898:A:PRO:CA	1:898:A:PRO:C	1:899:A:VAL:N	5	5.37	2.8	5.07
(1,107)	1:826:A:MET:N	1:826:A:MET:CA	1:826:A:MET:C	1:827:A:ILE:N	5	5.12	2.79	6.14
(1,274)	1:946:A:SER:N	1:946:A:SER:CA	1:946:A:SER:C	1:947:A:ARG:N	5	5.1	3.07	4.74
(1,57)	1:748:A:ILE:C	1:749:A:THR:N	1:749:A:THR:CA	1:749:A:THR:C	5	4.68	2.31	4.44
(1,132)	1:841:A:ALA:N	1:841:A:ALA:CA	1:841:A:ALA:C	1:842:A:ASP:N	5	4.2	2.51	2.3
(1,58)	1:749:A:THR:N	1:749:A:THR:CA	1:749:A:THR:C	1:750:A:ASP:N	5	4.09	0.94	3.79
(1,136)	1:843:A:GLN:N	1:843:A:GLN:CA	1:843:A:GLN:C	1:844:A:LEU:N	5	3.67	1.78	3.51
(1,42)	1:733:A:VAL:C	1:734:A:THR:N	1:734:A:THR:CA	1:734:A:THR:C	5	3.17	2.01	1.98
(1,95)	1:795:A:LEU:N	1:795:A:LEU:CA	1:795:A:LEU:C	1:796:A:ALA:N	5	2.75	1.18	2.56
(1,20)	1:719:A:CYS:C	1:720:A:GLN:N	1:720:A:GLN:CA	1:720:A:GLN:C	5	2.04	0.62	2.05
(1,26)	1:722:A:LEU:C	1:723:A:GLU:N	1:723:A:GLU:CA	1:723:A:GLU:C	5	1.79	0.74	1.49
(1,62)	1:755:A:LYS:N	1:755:A:LYS:CA	1:755:A:LYS:C	1:756:A:LYS:N	4	12.12	7.88	12.82
(1,156)	1:856:A:ASP:N	1:856:A:ASP:CA	1:856:A:ASP:C	1:857:A:GLY:N	4	8.3	4.84	8.49
(1,178)	1:873:A:LEU:C	1:874:A:SER:N	1:874:A:SER:CA	1:874:A:SER:C	4	8.02	5.19	7.04
(1,197)	1:892:A:GLN:N	1:892:A:GLN:CA	1:892:A:GLN:C	1:893:A:LEU:N	4	7.42	3.76	6.5
(1,3)	1:707:A:LYS:C	1:708:A:ARG:N	1:708:A:ARG:CA	1:708:A:ARG:C	4	6.34	2.86	6.56
(1,264)	1:941:A:GLU:N	1:941:A:GLU:CA	1:941:A:GLU:C	1:942:A:ARG:N	4	5.0	0.96	5.06
(1,93)	1:794:A:LEU:N	1:794:A:LEU:CA	1:794:A:LEU:C	1:795:A:LEU:N	4	4.78	0.94	5.18
(1,152)	1:854:A:ALA:N	1:854:A:ALA:CA	1:854:A:ALA:C	1:855:A:ASN:N	4	4.77	3.28	4.48
(1,125)	1:837:A:ARG:C	1:838:A:ARG:N	1:838:A:ARG:CA	1:838:A:ARG:C	4	4.31	0.97	4.38
(1,142)	1:846:A:SER:N	1:846:A:SER:CA	1:846:A:SER:C	1:847:A:LEU:N	4	3.9	2.85	2.95
(1,90)	1:792:A:PRO:C	1:793:A:ALA:N	1:793:A:ALA:CA	1:793:A:ALA:C	4	3.61	1.18	3.67
(1,191)	1:889:A:ARG:N	1:889:A:ARG:CA	1:889:A:ARG:C	1:890:A:ILE:N	4	3.32	1.76	2.92
(1,190)	1:888:A:GLN:C	1:889:A:ARG:N	1:889:A:ARG:CA	1:889:A:ARG:C	4	3.0	1.06	2.74
(1,185)	1:886:A:LEU:N	1:886:A:LEU:CA	1:886:A:LEU:C	1:887:A:THR:N	4	2.87	1.44	2.33
(1,196)	1:891:A:ARG:C	1:892:A:GLN:N	1:892:A:GLN:CA	1:892:A:GLN:C	4	2.71	0.28	2.74
(1,161)	1:859:A:ASP:C	1:860:A:ALA:N	1:860:A:ALA:CA	1:860:A:ALA:C	4	2.14	0.8	1.98
(1,257)	1:937:A:THR:C	1:938:A:LEU:N	1:938:A:LEU:CA	1:938:A:LEU:C	4	2.07	0.69	1.98
(1,50)	1:745:A:ASP:N	1:745:A:ASP:CA	1:745:A:ASP:C	1:746:A:VAL:N	4	2.05	0.73	1.74
(1,80)	1:781:A:TRP:N	1:781:A:TRP:CA	1:781:A:TRP:C	1:782:A:VAL:N	3	10.32	3.67	9.36
(1,8)	1:710:A:TRP:N	1:710:A:TRP:CA	1:710:A:TRP:C	1:711:A:LEU:N	3	9.61	4.57	8.23
(1,210)	1:903:A:THR:N	1:903:A:THR:CA	1:903:A:THR:C	1:904:A:ALA:N	3	9.36	3.47	9.12
(1,207)	1:901:A:GLY:C	1:902:A:VAL:N	1:902:A:VAL:CA	1:902:A:VAL:C	3	8.15	2.44	8.2
(1,234)	1:922:A:CYS:N	1:922:A:CYS:CA	1:922:A:CYS:C	1:923:A:LEU:N	3	7.07	1.01	7.54
(1,237)	1:923:A:LEU:C	1:924:A:SER:N	1:924:A:SER:CA	1:924:A:SER:C	3	6.51	3.79	5.34
(1,171)	1:864:A:LEU:C	1:865:A:SER:N	1:865:A:SER:CA	1:865:A:SER:C	3	6.29	2.11	5.59
(1,233)	1:921:A:SER:C	1:922:A:CYS:N	1:922:A:CYS:CA	1:922:A:CYS:C	3	6.01	6.07	2.18
(1,216)	1:911:A:LYS:N	1:911:A:LYS:CA	1:911:A:LYS:C	1:912:A:GLN:N	3	5.43	2.69	6.49
(1,231)	1:920:A:ASP:C	1:921:A:SER:N	1:921:A:SER:CA	1:921:A:SER:C	3	5.38	3.46	3.52
(1,273)	1:945:A:LYS:C	1:946:A:SER:N	1:946:A:SER:CA	1:946:A:SER:C	3	4.87	2.34	4.37
(1,116)	1:830:A:VAL:C	1:831:A:ASP:N	1:831:A:ASP:CA	1:831:A:ASP:C	3	4.55	2.53	5.61
(1,59)	1:749:A:THR:C	1:750:A:ASP:N	1:750:A:ASP:CA	1:750:A:ASP:C	3	4.25	2.05	3.14
(1,55)	1:747:A:LEU:C	1:748:A:ILE:N	1:748:A:ILE:CA	1:748:A:ILE:C	3	4.24	2.46	3.38

Continued on next page...

Continued from previous page...

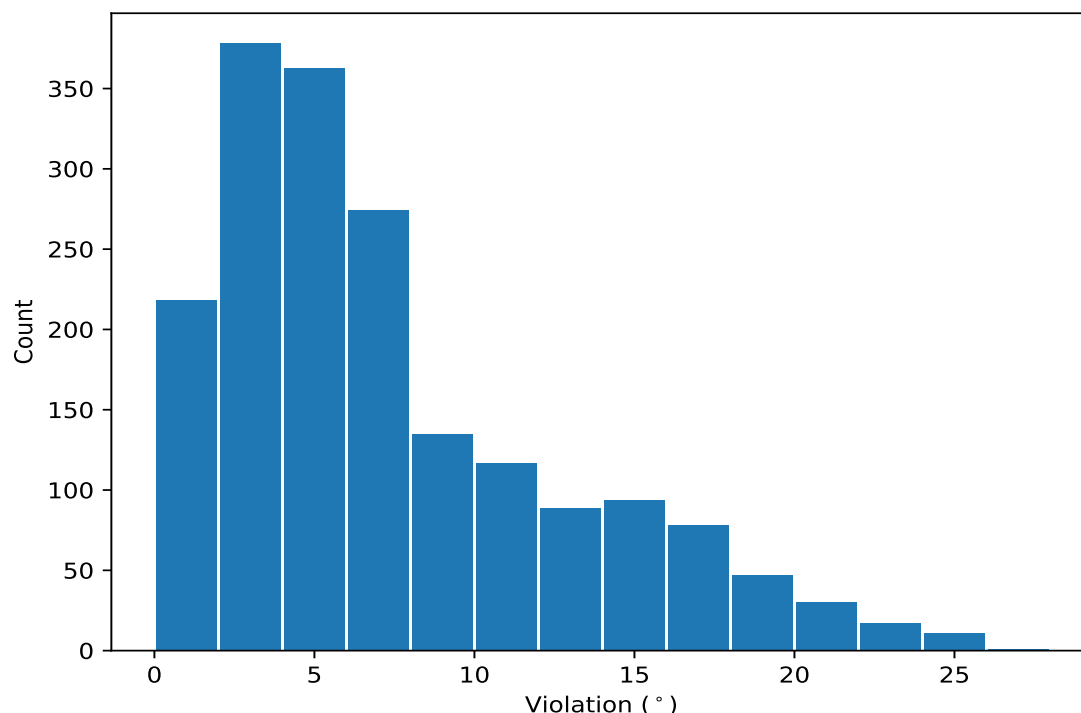
Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Models ¹	Mean	SD ²	Median
(1,140)	1:845:A:GLY:N	1:845:A:GLY:CA	1:845:A:GLY:C	1:846:A:SER:N	3	3.57	1.86	3.95
(1,251)	1:934:A:GLN:C	1:935:A:THR:N	1:935:A:THR:CA	1:935:A:THR:C	3	3.31	0.88	2.97
(1,79)	1:780:A:GLU:C	1:781:A:TRP:N	1:781:A:TRP:CA	1:781:A:TRP:C	3	3.17	1.36	3.47
(1,262)	1:940:A:ALA:N	1:940:A:ALA:CA	1:940:A:ALA:C	1:941:A:GLU:N	3	2.85	0.72	3.35
(1,271)	1:944:A:ARG:C	1:945:A:LYS:N	1:945:A:LYS:CA	1:945:A:LYS:C	3	2.83	1.37	2.17
(1,23)	1:721:A:PHE:N	1:721:A:PHE:CA	1:721:A:PHE:C	1:722:A:LEU:N	3	2.75	1.2	2.65
(1,165)	1:861:A:LEU:C	1:862:A:ASN:N	1:862:A:ASN:CA	1:862:A:ASN:C	3	2.66	1.15	2.82
(1,114)	1:829:A:VAL:C	1:830:A:VAL:N	1:830:A:VAL:CA	1:830:A:VAL:C	3	2.65	1.73	1.6
(1,31)	1:725:A:SER:N	1:725:A:SER:CA	1:725:A:SER:C	1:726:A:LEU:N	3	2.56	1.5	2.08
(1,269)	1:943:A:VAL:C	1:944:A:ARG:N	1:944:A:ARG:CA	1:944:A:ARG:C	3	2.47	0.71	2.56
(1,44)	1:734:A:THR:C	1:735:A:THR:N	1:735:A:THR:CA	1:735:A:THR:C	3	2.18	0.82	2.34
(1,255)	1:936:A:LEU:C	1:937:A:THR:N	1:937:A:THR:CA	1:937:A:THR:C	3	1.93	0.73	1.44
(1,70)	1:764:A:THR:N	1:764:A:THR:CA	1:764:A:THR:C	1:765:A:PHE:N	2	14.27	3.05	14.27
(1,37)	1:731:A:ILE:N	1:731:A:ILE:CA	1:731:A:ILE:C	1:732:A:VAL:N	2	12.62	6.9	12.62
(1,214)	1:910:A:GLU:N	1:910:A:GLU:CA	1:910:A:GLU:C	1:911:A:LYS:N	2	8.46	2.43	8.46
(1,65)	1:761:A:ALA:C	1:762:A:VAL:N	1:762:A:VAL:CA	1:762:A:VAL:C	2	6.92	0.17	6.92
(1,218)	1:912:A:GLN:N	1:912:A:GLN:CA	1:912:A:GLN:C	1:913:A:ARG:N	2	6.3	0.6	6.3
(1,134)	1:842:A:ASP:N	1:842:A:ASP:CA	1:842:A:ASP:C	1:843:A:GLN:N	2	5.64	4.11	5.64
(1,12)	1:715:A:ASN:C	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:CA	1:716:A:ALA:C	2	5.14	3.45	5.14
(1,184)	1:885:A:ARG:C	1:886:A:LEU:N	1:886:A:LEU:CA	1:886:A:LEU:C	2	5.1	1.02	5.1
(1,13)	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:CA	1:716:A:ALA:C	1:717:A:SER:N	2	4.82	2.79	4.82
(1,209)	1:902:A:VAL:C	1:903:A:THR:N	1:903:A:THR:CA	1:903:A:THR:C	2	4.78	0.04	4.78
(1,15)	1:717:A:SER:N	1:717:A:SER:CA	1:717:A:SER:C	1:718:A:LEU:N	2	4.5	1.08	4.5
(1,9)	1:710:A:TRP:C	1:711:A:LEU:N	1:711:A:LEU:CA	1:711:A:LEU:C	2	4.36	1.0	4.36
(1,220)	1:913:A:ARG:N	1:913:A:ARG:CA	1:913:A:ARG:C	1:914:A:CYS:N	2	4.34	0.4	4.34
(1,241)	1:929:A:LEU:C	1:930:A:ASP:N	1:930:A:ASP:CA	1:930:A:ASP:C	2	4.23	1.78	4.23
(1,141)	1:845:A:GLY:C	1:846:A:SER:N	1:846:A:SER:CA	1:846:A:SER:C	2	4.18	3.12	4.18
(1,54)	1:747:A:LEU:N	1:747:A:LEU:CA	1:747:A:LEU:C	1:748:A:ILE:N	2	4.04	0.05	4.04
(1,169)	1:863:A:VAL:C	1:864:A:LEU:N	1:864:A:LEU:CA	1:864:A:LEU:C	2	3.93	0.91	3.93
(1,175)	1:872:A:VAL:N	1:872:A:VAL:CA	1:872:A:VAL:C	1:873:A:LEU:N	2	3.9	2.8	3.9
(1,124)	1:837:A:ARG:N	1:837:A:ARG:CA	1:837:A:ARG:C	1:838:A:ARG:N	2	3.62	1.68	3.62
(1,192)	1:889:A:ARG:C	1:890:A:ILE:N	1:890:A:ILE:CA	1:890:A:ILE:C	2	3.49	0.84	3.49
(1,28)	1:723:A:GLU:C	1:724:A:THR:N	1:724:A:THR:CA	1:724:A:THR:C	2	3.22	2.21	3.22
(1,242)	1:930:A:ASP:N	1:930:A:ASP:CA	1:930:A:ASP:C	1:931:A:VAL:N	2	3.06	1.59	3.06
(1,245)	1:931:A:VAL:C	1:932:A:ILE:N	1:932:A:ILE:CA	1:932:A:ILE:C	2	2.44	1.04	2.44
(1,263)	1:940:A:ALA:C	1:941:A:GLU:N	1:941:A:GLU:CA	1:941:A:GLU:C	2	2.1	0.21	2.1
(1,267)	1:942:A:ARG:C	1:943:A:VAL:N	1:943:A:VAL:CA	1:943:A:VAL:C	2	2.1	0.98	2.1
(1,167)	1:862:A:ASN:C	1:863:A:VAL:N	1:863:A:VAL:CA	1:863:A:VAL:C	2	1.86	0.06	1.86
(1,187)	1:887:A:THR:N	1:887:A:THR:CA	1:887:A:THR:C	1:888:A:GLN:N	2	1.78	0.58	1.78
(1,256)	1:937:A:THR:N	1:937:A:THR:CA	1:937:A:THR:C	1:938:A:LEU:N	2	1.72	0.03	1.72
(1,219)	1:912:A:GLN:C	1:913:A:ARG:N	1:913:A:ARG:CA	1:913:A:ARG:C	2	1.67	0.55	1.67
(1,21)	1:720:A:GLN:N	1:720:A:GLN:CA	1:720:A:GLN:C	1:721:A:PHE:N	2	1.25	0.1	1.25
(1,16)	1:717:A:SER:C	1:718:A:LEU:N	1:718:A:LEU:CA	1:718:A:LEU:C	2	1.08	0.06	1.08

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

10.5 All violated dihedral-angle restraints [i](#)

10.5.1 Histogram : Distribution of violations [i](#)

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



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

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

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,72)	1:765:A:PHE:N	1:765:A:PHE:CA	1:765:A:PHE:C	1:766:A:CYS:N	11	26.51
(1,155)	1:855:A:ASN:C	1:856:A:ASP:N	1:856:A:ASP:CA	1:856:A:ASP:C	19	25.82
(1,61)	1:754:A:SER:C	1:755:A:LYS:N	1:755:A:LYS:CA	1:755:A:LYS:C	19	25.77
(1,61)	1:754:A:SER:C	1:755:A:LYS:N	1:755:A:LYS:CA	1:755:A:LYS:C	8	25.72
(1,61)	1:754:A:SER:C	1:755:A:LYS:N	1:755:A:LYS:CA	1:755:A:LYS:C	9	25.31
(1,155)	1:855:A:ASN:C	1:856:A:ASP:N	1:856:A:ASP:CA	1:856:A:ASP:C	6	25.04
(1,61)	1:754:A:SER:C	1:755:A:LYS:N	1:755:A:LYS:CA	1:755:A:LYS:C	12	25.02
(1,36)	1:730:A:GLY:C	1:731:A:ILE:N	1:731:A:ILE:CA	1:731:A:ILE:C	18	24.78
(1,103)	1:799:A:TYR:N	1:799:A:TYR:CA	1:799:A:TYR:C	1:800:A:LEU:N	19	24.36
(1,105)	1:825:A:MET:N	1:825:A:MET:CA	1:825:A:MET:C	1:826:A:MET:N	19	24.23
(1,155)	1:855:A:ASN:C	1:856:A:ASP:N	1:856:A:ASP:CA	1:856:A:ASP:C	16	24.18
(1,36)	1:730:A:GLY:C	1:731:A:ILE:N	1:731:A:ILE:CA	1:731:A:ILE:C	7	24.09
(1,61)	1:754:A:SER:C	1:755:A:LYS:N	1:755:A:LYS:CA	1:755:A:LYS:C	14	23.85
(1,36)	1:730:A:GLY:C	1:731:A:ILE:N	1:731:A:ILE:CA	1:731:A:ILE:C	20	23.77

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,155)	1:855:A:ASN:C	1:856:A:ASP:N	1:856:A:ASP:CA	1:856:A:ASP:C	4	23.75
(1,61)	1:754:A:SER:C	1:755:A:LYS:N	1:755:A:LYS:CA	1:755:A:LYS:C	13	23.72
(1,236)	1:923:A:LEU:N	1:923:A:LEU:CA	1:923:A:LEU:C	1:924:A:SER:N	2	23.53
(1,236)	1:923:A:LEU:N	1:923:A:LEU:CA	1:923:A:LEU:C	1:924:A:SER:N	8	23.28
(1,154)	1:855:A:ASN:N	1:855:A:ASN:CA	1:855:A:ASN:C	1:856:A:ASP:N	6	23.23
(1,236)	1:923:A:LEU:N	1:923:A:LEU:CA	1:923:A:LEU:C	1:924:A:SER:N	11	23.2
(1,236)	1:923:A:LEU:N	1:923:A:LEU:CA	1:923:A:LEU:C	1:924:A:SER:N	6	23.19
(1,155)	1:855:A:ASN:C	1:856:A:ASP:N	1:856:A:ASP:CA	1:856:A:ASP:C	18	23.15
(1,103)	1:799:A:TYR:N	1:799:A:TYR:CA	1:799:A:TYR:C	1:800:A:LEU:N	9	23.04
(1,147)	1:851:A:CYS:C	1:852:A:LYS:N	1:852:A:LYS:CA	1:852:A:LYS:C	15	23.01
(1,155)	1:855:A:ASN:C	1:856:A:ASP:N	1:856:A:ASP:CA	1:856:A:ASP:C	11	22.47
(1,154)	1:855:A:ASN:N	1:855:A:ASN:CA	1:855:A:ASN:C	1:856:A:ASP:N	4	22.37
(1,105)	1:825:A:MET:N	1:825:A:MET:CA	1:825:A:MET:C	1:826:A:MET:N	9	22.3
(1,236)	1:923:A:LEU:N	1:923:A:LEU:CA	1:923:A:LEU:C	1:924:A:SER:N	4	22.18
(1,236)	1:923:A:LEU:N	1:923:A:LEU:CA	1:923:A:LEU:C	1:924:A:SER:N	12	22.14
(1,40)	1:732:A:VAL:C	1:733:A:VAL:N	1:733:A:VAL:CA	1:733:A:VAL:C	8	21.91
(1,155)	1:855:A:ASN:C	1:856:A:ASP:N	1:856:A:ASP:CA	1:856:A:ASP:C	10	21.86
(1,154)	1:855:A:ASN:N	1:855:A:ASN:CA	1:855:A:ASN:C	1:856:A:ASP:N	19	21.81
(1,181)	1:875:A:ASP:N	1:875:A:ASP:CA	1:875:A:ASP:C	1:876:A:VAL:N	17	21.59
(1,1)	1:706:A:GLY:C	1:707:A:LYS:N	1:707:A:LYS:CA	1:707:A:LYS:C	2	21.59
(1,62)	1:755:A:LYS:N	1:755:A:LYS:CA	1:755:A:LYS:C	1:756:A:LYS:N	19	21.56
(1,72)	1:765:A:PHE:N	1:765:A:PHE:CA	1:765:A:PHE:C	1:766:A:CYS:N	12	21.37
(1,154)	1:855:A:ASN:N	1:855:A:ASN:CA	1:855:A:ASN:C	1:856:A:ASP:N	13	21.3
(1,72)	1:765:A:PHE:N	1:765:A:PHE:CA	1:765:A:PHE:C	1:766:A:CYS:N	3	21.14
(1,115)	1:830:A:VAL:N	1:830:A:VAL:CA	1:830:A:VAL:C	1:831:A:ASP:N	14	21.08
(1,154)	1:855:A:ASN:N	1:855:A:ASN:CA	1:855:A:ASN:C	1:856:A:ASP:N	20	21.05
(1,61)	1:754:A:SER:C	1:755:A:LYS:N	1:755:A:LYS:CA	1:755:A:LYS:C	15	21.03
(1,154)	1:855:A:ASN:N	1:855:A:ASN:CA	1:855:A:ASN:C	1:856:A:ASP:N	16	20.98
(1,154)	1:855:A:ASN:N	1:855:A:ASN:CA	1:855:A:ASN:C	1:856:A:ASP:N	3	20.96
(1,204)	1:900:A:ILE:N	1:900:A:ILE:CA	1:900:A:ILE:C	1:901:A:GLY:N	10	20.58
(1,104)	1:824:A:ASP:C	1:825:A:MET:N	1:825:A:MET:CA	1:825:A:MET:C	4	20.53
(1,103)	1:799:A:TYR:N	1:799:A:TYR:CA	1:799:A:TYR:C	1:800:A:LEU:N	17	20.48
(1,154)	1:855:A:ASN:N	1:855:A:ASN:CA	1:855:A:ASN:C	1:856:A:ASP:N	8	20.44
(1,181)	1:875:A:ASP:N	1:875:A:ASP:CA	1:875:A:ASP:C	1:876:A:VAL:N	16	20.37
(1,181)	1:875:A:ASP:N	1:875:A:ASP:CA	1:875:A:ASP:C	1:876:A:VAL:N	19	20.32
(1,238)	1:924:A:SER:N	1:924:A:SER:CA	1:924:A:SER:C	1:925:A:LYS:N	2	20.27
(1,61)	1:754:A:SER:C	1:755:A:LYS:N	1:755:A:LYS:CA	1:755:A:LYS:C	10	20.24
(1,113)	1:829:A:VAL:N	1:829:A:VAL:CA	1:829:A:VAL:C	1:830:A:VAL:N	7	20.22
(1,181)	1:875:A:ASP:N	1:875:A:ASP:CA	1:875:A:ASP:C	1:876:A:VAL:N	13	20.2
(1,154)	1:855:A:ASN:N	1:855:A:ASN:CA	1:855:A:ASN:C	1:856:A:ASP:N	12	20.17
(1,103)	1:799:A:TYR:N	1:799:A:TYR:CA	1:799:A:TYR:C	1:800:A:LEU:N	2	20.14
(1,113)	1:829:A:VAL:N	1:829:A:VAL:CA	1:829:A:VAL:C	1:830:A:VAL:N	19	20.11
(1,148)	1:852:A:LYS:N	1:852:A:LYS:CA	1:852:A:LYS:C	1:853:A:THR:N	15	20.1
(1,154)	1:855:A:ASN:N	1:855:A:ASN:CA	1:855:A:ASN:C	1:856:A:ASP:N	11	20.03
(1,154)	1:855:A:ASN:N	1:855:A:ASN:CA	1:855:A:ASN:C	1:856:A:ASP:N	10	20.01
(1,179)	1:874:A:SER:N	1:874:A:SER:CA	1:874:A:SER:C	1:875:A:ASP:N	16	19.8
(1,154)	1:855:A:ASN:N	1:855:A:ASN:CA	1:855:A:ASN:C	1:856:A:ASP:N	2	19.74
(1,199)	1:895:A:LEU:N	1:895:A:LEU:CA	1:895:A:LEU:C	1:896:A:THR:N	10	19.73
(1,181)	1:875:A:ASP:N	1:875:A:ASP:CA	1:875:A:ASP:C	1:876:A:VAL:N	4	19.72
(1,199)	1:895:A:LEU:N	1:895:A:LEU:CA	1:895:A:LEU:C	1:896:A:THR:N	17	19.67
(1,154)	1:855:A:ASN:N	1:855:A:ASN:CA	1:855:A:ASN:C	1:856:A:ASP:N	9	19.65

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,115)	1:830:A:VAL:N	1:830:A:VAL:CA	1:830:A:VAL:C	1:831:A:ASP:N	16	19.63
(1,37)	1:731:A:ILE:N	1:731:A:ILE:CA	1:731:A:ILE:C	1:732:A:VAL:N	10	19.51
(1,154)	1:855:A:ASN:N	1:855:A:ASN:CA	1:855:A:ASN:C	1:856:A:ASP:N	17	19.47
(1,154)	1:855:A:ASN:N	1:855:A:ASN:CA	1:855:A:ASN:C	1:856:A:ASP:N	5	19.44
(1,148)	1:852:A:LYS:N	1:852:A:LYS:CA	1:852:A:LYS:C	1:853:A:THR:N	2	19.41
(1,181)	1:875:A:ASP:N	1:875:A:ASP:CA	1:875:A:ASP:C	1:876:A:VAL:N	10	19.4
(1,148)	1:852:A:LYS:N	1:852:A:LYS:CA	1:852:A:LYS:C	1:853:A:THR:N	20	19.4
(1,211)	1:903:A:THR:C	1:904:A:ALA:N	1:904:A:ALA:CA	1:904:A:ALA:C	9	19.21
(1,154)	1:855:A:ASN:N	1:855:A:ASN:CA	1:855:A:ASN:C	1:856:A:ASP:N	14	19.2
(1,177)	1:873:A:LEU:N	1:873:A:LEU:CA	1:873:A:LEU:C	1:874:A:SER:N	9	19.18
(1,148)	1:852:A:LYS:N	1:852:A:LYS:CA	1:852:A:LYS:C	1:853:A:THR:N	18	19.16
(1,115)	1:830:A:VAL:N	1:830:A:VAL:CA	1:830:A:VAL:C	1:831:A:ASP:N	5	19.15
(1,181)	1:875:A:ASP:N	1:875:A:ASP:CA	1:875:A:ASP:C	1:876:A:VAL:N	12	19.09
(1,148)	1:852:A:LYS:N	1:852:A:LYS:CA	1:852:A:LYS:C	1:853:A:THR:N	9	19.06
(1,181)	1:875:A:ASP:N	1:875:A:ASP:CA	1:875:A:ASP:C	1:876:A:VAL:N	18	19.05
(1,115)	1:830:A:VAL:N	1:830:A:VAL:CA	1:830:A:VAL:C	1:831:A:ASP:N	3	19.02
(1,177)	1:873:A:LEU:N	1:873:A:LEU:CA	1:873:A:LEU:C	1:874:A:SER:N	12	18.94
(1,199)	1:895:A:LEU:N	1:895:A:LEU:CA	1:895:A:LEU:C	1:896:A:THR:N	8	18.78
(1,238)	1:924:A:SER:N	1:924:A:SER:CA	1:924:A:SER:C	1:925:A:LYS:N	14	18.77
(1,199)	1:895:A:LEU:N	1:895:A:LEU:CA	1:895:A:LEU:C	1:896:A:THR:N	16	18.72
(1,61)	1:754:A:SER:C	1:755:A:LYS:N	1:755:A:LYS:CA	1:755:A:LYS:C	11	18.71
(1,179)	1:874:A:SER:N	1:874:A:SER:CA	1:874:A:SER:C	1:875:A:ASP:N	12	18.69
(1,206)	1:901:A:GLY:N	1:901:A:GLY:CA	1:901:A:GLY:C	1:902:A:VAL:N	3	18.68
(1,179)	1:874:A:SER:N	1:874:A:SER:CA	1:874:A:SER:C	1:875:A:ASP:N	3	18.68
(1,104)	1:824:A:ASP:C	1:825:A:MET:N	1:825:A:MET:CA	1:825:A:MET:C	6	18.59
(1,154)	1:855:A:ASN:N	1:855:A:ASN:CA	1:855:A:ASN:C	1:856:A:ASP:N	15	18.53
(1,148)	1:852:A:LYS:N	1:852:A:LYS:CA	1:852:A:LYS:C	1:853:A:THR:N	17	18.52
(1,115)	1:830:A:VAL:N	1:830:A:VAL:CA	1:830:A:VAL:C	1:831:A:ASP:N	17	18.52
(1,179)	1:874:A:SER:N	1:874:A:SER:CA	1:874:A:SER:C	1:875:A:ASP:N	11	18.51
(1,113)	1:829:A:VAL:N	1:829:A:VAL:CA	1:829:A:VAL:C	1:830:A:VAL:N	2	18.49
(1,212)	1:904:A:ALA:N	1:904:A:ALA:CA	1:904:A:ALA:C	1:905:A:ASN:N	18	18.44
(1,68)	1:763:A:VAL:N	1:763:A:VAL:CA	1:763:A:VAL:C	1:764:A:THR:N	9	18.44
(1,179)	1:874:A:SER:N	1:874:A:SER:CA	1:874:A:SER:C	1:875:A:ASP:N	17	18.28
(1,199)	1:895:A:LEU:N	1:895:A:LEU:CA	1:895:A:LEU:C	1:896:A:THR:N	19	18.26
(1,148)	1:852:A:LYS:N	1:852:A:LYS:CA	1:852:A:LYS:C	1:853:A:THR:N	14	18.26
(1,206)	1:901:A:GLY:N	1:901:A:GLY:CA	1:901:A:GLY:C	1:902:A:VAL:N	15	18.21
(1,47)	1:741:A:PRO:C	1:742:A:THR:N	1:742:A:THR:CA	1:742:A:THR:C	14	18.18
(1,177)	1:873:A:LEU:N	1:873:A:LEU:CA	1:873:A:LEU:C	1:874:A:SER:N	10	18.17
(1,84)	1:783:A:HIS:N	1:783:A:HIS:CA	1:783:A:HIS:C	1:784:A:SER:N	20	18.16
(1,179)	1:874:A:SER:N	1:874:A:SER:CA	1:874:A:SER:C	1:875:A:ASP:N	18	18.15
(1,179)	1:874:A:SER:N	1:874:A:SER:CA	1:874:A:SER:C	1:875:A:ASP:N	9	18.05
(1,179)	1:874:A:SER:N	1:874:A:SER:CA	1:874:A:SER:C	1:875:A:ASP:N	13	17.98
(1,155)	1:855:A:ASN:C	1:856:A:ASP:N	1:856:A:ASP:CA	1:856:A:ASP:C	1	17.94
(1,73)	1:765:A:PHE:C	1:766:A:CYS:N	1:766:A:CYS:CA	1:766:A:CYS:C	16	17.94
(1,199)	1:895:A:LEU:N	1:895:A:LEU:CA	1:895:A:LEU:C	1:896:A:THR:N	5	17.91
(1,212)	1:904:A:ALA:N	1:904:A:ALA:CA	1:904:A:ALA:C	1:905:A:ASN:N	11	17.88
(1,211)	1:903:A:THR:C	1:904:A:ALA:N	1:904:A:ALA:CA	1:904:A:ALA:C	15	17.87
(1,73)	1:765:A:PHE:C	1:766:A:CYS:N	1:766:A:CYS:CA	1:766:A:CYS:C	1	17.87
(1,199)	1:895:A:LEU:N	1:895:A:LEU:CA	1:895:A:LEU:C	1:896:A:THR:N	20	17.85
(1,115)	1:830:A:VAL:N	1:830:A:VAL:CA	1:830:A:VAL:C	1:831:A:ASP:N	19	17.82
(1,211)	1:903:A:THR:C	1:904:A:ALA:N	1:904:A:ALA:CA	1:904:A:ALA:C	8	17.81

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,211)	1:903:A:THR:C	1:904:A:ALA:N	1:904:A:ALA:CA	1:904:A:ALA:C	3	17.77
(1,73)	1:765:A:PHE:C	1:766:A:CYS:N	1:766:A:CYS:CA	1:766:A:CYS:C	17	17.77
(1,86)	1:784:A:SER:N	1:784:A:SER:CA	1:784:A:SER:C	1:785:A:VAL:N	7	17.75
(1,73)	1:765:A:PHE:C	1:766:A:CYS:N	1:766:A:CYS:CA	1:766:A:CYS:C	20	17.75
(1,212)	1:904:A:ALA:N	1:904:A:ALA:CA	1:904:A:ALA:C	1:905:A:ASN:N	13	17.74
(1,199)	1:895:A:LEU:N	1:895:A:LEU:CA	1:895:A:LEU:C	1:896:A:THR:N	2	17.73
(1,84)	1:783:A:HIS:N	1:783:A:HIS:CA	1:783:A:HIS:C	1:784:A:SER:N	5	17.73
(1,74)	1:766:A:CYS:N	1:766:A:CYS:CA	1:766:A:CYS:C	1:767:A:ARG:N	3	17.66
(1,86)	1:784:A:SER:N	1:784:A:SER:CA	1:784:A:SER:C	1:785:A:VAL:N	13	17.64
(1,47)	1:741:A:PRO:C	1:742:A:THR:N	1:742:A:THR:CA	1:742:A:THR:C	18	17.61
(1,74)	1:766:A:CYS:N	1:766:A:CYS:CA	1:766:A:CYS:C	1:767:A:ARG:N	6	17.55
(1,86)	1:784:A:SER:N	1:784:A:SER:CA	1:784:A:SER:C	1:785:A:VAL:N	17	17.52
(1,199)	1:895:A:LEU:N	1:895:A:LEU:CA	1:895:A:LEU:C	1:896:A:THR:N	14	17.46
(1,73)	1:765:A:PHE:C	1:766:A:CYS:N	1:766:A:CYS:CA	1:766:A:CYS:C	12	17.46
(1,199)	1:895:A:LEU:N	1:895:A:LEU:CA	1:895:A:LEU:C	1:896:A:THR:N	4	17.41
(1,155)	1:855:A:ASN:C	1:856:A:ASP:N	1:856:A:ASP:CA	1:856:A:ASP:C	9	17.4
(1,83)	1:782:A:VAL:C	1:783:A:HIS:N	1:783:A:HIS:CA	1:783:A:HIS:C	12	17.36
(1,74)	1:766:A:CYS:N	1:766:A:CYS:CA	1:766:A:CYS:C	1:767:A:ARG:N	4	17.36
(1,62)	1:755:A:LYS:N	1:755:A:LYS:CA	1:755:A:LYS:C	1:756:A:LYS:N	9	17.35
(1,68)	1:763:A:VAL:N	1:763:A:VAL:CA	1:763:A:VAL:C	1:764:A:THR:N	12	17.34
(1,70)	1:764:A:THR:N	1:764:A:THR:CA	1:764:A:THR:C	1:765:A:PHE:N	12	17.33
(1,84)	1:783:A:HIS:N	1:783:A:HIS:CA	1:783:A:HIS:C	1:784:A:SER:N	6	17.3
(1,148)	1:852:A:LYS:N	1:852:A:LYS:CA	1:852:A:LYS:C	1:853:A:THR:N	10	17.24
(1,83)	1:782:A:VAL:C	1:783:A:HIS:N	1:783:A:HIS:CA	1:783:A:HIS:C	4	17.22
(1,78)	1:780:A:GLU:N	1:780:A:GLU:CA	1:780:A:GLU:C	1:781:A:TRP:N	9	17.22
(1,236)	1:923:A:LEU:N	1:923:A:LEU:CA	1:923:A:LEU:C	1:924:A:SER:N	10	17.21
(1,83)	1:782:A:VAL:C	1:783:A:HIS:N	1:783:A:HIS:CA	1:783:A:HIS:C	9	17.17
(1,212)	1:904:A:ALA:N	1:904:A:ALA:CA	1:904:A:ALA:C	1:905:A:ASN:N	4	17.16
(1,212)	1:904:A:ALA:N	1:904:A:ALA:CA	1:904:A:ALA:C	1:905:A:ASN:N	12	17.16
(1,86)	1:784:A:SER:N	1:784:A:SER:CA	1:784:A:SER:C	1:785:A:VAL:N	8	17.07
(1,78)	1:780:A:GLU:N	1:780:A:GLU:CA	1:780:A:GLU:C	1:781:A:TRP:N	6	17.05
(1,145)	1:850:A:GLN:C	1:851:A:CYS:N	1:851:A:CYS:CA	1:851:A:CYS:C	3	17.03
(1,236)	1:923:A:LEU:N	1:923:A:LEU:CA	1:923:A:LEU:C	1:924:A:SER:N	16	17.0
(1,78)	1:780:A:GLU:N	1:780:A:GLU:CA	1:780:A:GLU:C	1:781:A:TRP:N	4	16.99
(1,212)	1:904:A:ALA:N	1:904:A:ALA:CA	1:904:A:ALA:C	1:905:A:ASN:N	20	16.98
(1,199)	1:895:A:LEU:N	1:895:A:LEU:CA	1:895:A:LEU:C	1:896:A:THR:N	12	16.97
(1,73)	1:765:A:PHE:C	1:766:A:CYS:N	1:766:A:CYS:CA	1:766:A:CYS:C	8	16.9
(1,236)	1:923:A:LEU:N	1:923:A:LEU:CA	1:923:A:LEU:C	1:924:A:SER:N	1	16.86
(1,86)	1:784:A:SER:N	1:784:A:SER:CA	1:784:A:SER:C	1:785:A:VAL:N	20	16.86
(1,86)	1:784:A:SER:N	1:784:A:SER:CA	1:784:A:SER:C	1:785:A:VAL:N	12	16.79
(1,86)	1:784:A:SER:N	1:784:A:SER:CA	1:784:A:SER:C	1:785:A:VAL:N	10	16.76
(1,155)	1:855:A:ASN:C	1:856:A:ASP:N	1:856:A:ASP:CA	1:856:A:ASP:C	8	16.74
(1,73)	1:765:A:PHE:C	1:766:A:CYS:N	1:766:A:CYS:CA	1:766:A:CYS:C	5	16.72
(1,86)	1:784:A:SER:N	1:784:A:SER:CA	1:784:A:SER:C	1:785:A:VAL:N	2	16.64
(1,84)	1:783:A:HIS:N	1:783:A:HIS:CA	1:783:A:HIS:C	1:784:A:SER:N	1	16.62
(1,47)	1:741:A:PRO:C	1:742:A:THR:N	1:742:A:THR:CA	1:742:A:THR:C	15	16.55
(1,86)	1:784:A:SER:N	1:784:A:SER:CA	1:784:A:SER:C	1:785:A:VAL:N	9	16.53
(1,211)	1:903:A:THR:C	1:904:A:ALA:N	1:904:A:ALA:CA	1:904:A:ALA:C	6	16.52
(1,74)	1:766:A:CYS:N	1:766:A:CYS:CA	1:766:A:CYS:C	1:767:A:ARG:N	2	16.49
(1,73)	1:765:A:PHE:C	1:766:A:CYS:N	1:766:A:CYS:CA	1:766:A:CYS:C	4	16.42
(1,40)	1:732:A:VAL:C	1:733:A:VAL:N	1:733:A:VAL:CA	1:733:A:VAL:C	4	16.41

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,84)	1:783:A:HIS:N	1:783:A:HIS:CA	1:783:A:HIS:C	1:784:A:SER:N	15	16.37
(1,86)	1:784:A:SER:N	1:784:A:SER:CA	1:784:A:SER:C	1:785:A:VAL:N	3	16.36
(1,78)	1:780:A:GLU:N	1:780:A:GLU:CA	1:780:A:GLU:C	1:781:A:TRP:N	8	16.34
(1,212)	1:904:A:ALA:N	1:904:A:ALA:CA	1:904:A:ALA:C	1:905:A:ASN:N	8	16.27
(1,147)	1:851:A:CYS:C	1:852:A:LYS:N	1:852:A:LYS:CA	1:852:A:LYS:C	20	16.26
(1,86)	1:784:A:SER:N	1:784:A:SER:CA	1:784:A:SER:C	1:785:A:VAL:N	1	16.26
(1,78)	1:780:A:GLU:N	1:780:A:GLU:CA	1:780:A:GLU:C	1:781:A:TRP:N	20	16.26
(1,78)	1:780:A:GLU:N	1:780:A:GLU:CA	1:780:A:GLU:C	1:781:A:TRP:N	5	16.23
(1,178)	1:873:A:LEU:C	1:874:A:SER:N	1:874:A:SER:CA	1:874:A:SER:C	3	16.19
(1,86)	1:784:A:SER:N	1:784:A:SER:CA	1:784:A:SER:C	1:785:A:VAL:N	11	16.15
(1,74)	1:766:A:CYS:N	1:766:A:CYS:CA	1:766:A:CYS:C	1:767:A:ARG:N	12	16.15
(1,86)	1:784:A:SER:N	1:784:A:SER:CA	1:784:A:SER:C	1:785:A:VAL:N	6	16.14
(1,84)	1:783:A:HIS:N	1:783:A:HIS:CA	1:783:A:HIS:C	1:784:A:SER:N	14	16.12
(1,144)	1:850:A:GLN:N	1:850:A:GLN:CA	1:850:A:GLN:C	1:851:A:CYS:N	8	16.11
(1,74)	1:766:A:CYS:N	1:766:A:CYS:CA	1:766:A:CYS:C	1:767:A:ARG:N	19	16.11
(1,86)	1:784:A:SER:N	1:784:A:SER:CA	1:784:A:SER:C	1:785:A:VAL:N	14	16.09
(1,73)	1:765:A:PHE:C	1:766:A:CYS:N	1:766:A:CYS:CA	1:766:A:CYS:C	18	16.07
(1,74)	1:766:A:CYS:N	1:766:A:CYS:CA	1:766:A:CYS:C	1:767:A:ARG:N	8	15.97
(1,230)	1:918:A:GLY:N	1:918:A:GLY:CA	1:918:A:GLY:C	1:919:A:MET:N	13	15.94
(1,144)	1:850:A:GLN:N	1:850:A:GLN:CA	1:850:A:GLN:C	1:851:A:CYS:N	6	15.94
(1,154)	1:855:A:ASN:N	1:855:A:ASN:CA	1:855:A:ASN:C	1:856:A:ASP:N	7	15.93
(1,235)	1:922:A:CYS:C	1:923:A:LEU:N	1:923:A:LEU:CA	1:923:A:LEU:C	2	15.92
(1,74)	1:766:A:CYS:N	1:766:A:CYS:CA	1:766:A:CYS:C	1:767:A:ARG:N	20	15.9
(1,8)	1:710:A:TRP:N	1:710:A:TRP:CA	1:710:A:TRP:C	1:711:A:LEU:N	20	15.77
(1,74)	1:766:A:CYS:N	1:766:A:CYS:CA	1:766:A:CYS:C	1:767:A:ARG:N	11	15.76
(1,144)	1:850:A:GLN:N	1:850:A:GLN:CA	1:850:A:GLN:C	1:851:A:CYS:N	5	15.75
(1,212)	1:904:A:ALA:N	1:904:A:ALA:CA	1:904:A:ALA:C	1:905:A:ASN:N	2	15.72
(1,181)	1:875:A:ASP:N	1:875:A:ASP:CA	1:875:A:ASP:C	1:876:A:VAL:N	11	15.71
(1,72)	1:765:A:PHE:N	1:765:A:PHE:CA	1:765:A:PHE:C	1:766:A:CYS:N	13	15.7
(1,36)	1:730:A:GLY:C	1:731:A:ILE:N	1:731:A:ILE:CA	1:731:A:ILE:C	11	15.7
(1,4)	1:708:A:ARG:N	1:708:A:ARG:CA	1:708:A:ARG:C	1:709:A:CYS:N	19	15.68
(1,144)	1:850:A:GLN:N	1:850:A:GLN:CA	1:850:A:GLN:C	1:851:A:CYS:N	13	15.66
(1,78)	1:780:A:GLU:N	1:780:A:GLU:CA	1:780:A:GLU:C	1:781:A:TRP:N	3	15.63
(1,86)	1:784:A:SER:N	1:784:A:SER:CA	1:784:A:SER:C	1:785:A:VAL:N	15	15.62
(1,73)	1:765:A:PHE:C	1:766:A:CYS:N	1:766:A:CYS:CA	1:766:A:CYS:C	3	15.62
(1,212)	1:904:A:ALA:N	1:904:A:ALA:CA	1:904:A:ALA:C	1:905:A:ASN:N	3	15.61
(1,46)	1:741:A:PRO:N	1:741:A:PRO:CA	1:741:A:PRO:C	1:742:A:THR:N	6	15.61
(1,73)	1:765:A:PHE:C	1:766:A:CYS:N	1:766:A:CYS:CA	1:766:A:CYS:C	19	15.6
(1,40)	1:732:A:VAL:C	1:733:A:VAL:N	1:733:A:VAL:CA	1:733:A:VAL:C	20	15.6
(1,230)	1:918:A:GLY:N	1:918:A:GLY:CA	1:918:A:GLY:C	1:919:A:MET:N	2	15.59
(1,144)	1:850:A:GLN:N	1:850:A:GLN:CA	1:850:A:GLN:C	1:851:A:CYS:N	3	15.58
(1,110)	1:827:A:ILE:C	1:828:A:LEU:N	1:828:A:LEU:CA	1:828:A:LEU:C	2	15.58
(1,230)	1:918:A:GLY:N	1:918:A:GLY:CA	1:918:A:GLY:C	1:919:A:MET:N	7	15.56
(1,73)	1:765:A:PHE:C	1:766:A:CYS:N	1:766:A:CYS:CA	1:766:A:CYS:C	14	15.52
(1,104)	1:824:A:ASP:C	1:825:A:MET:N	1:825:A:MET:CA	1:825:A:MET:C	19	15.51
(1,73)	1:765:A:PHE:C	1:766:A:CYS:N	1:766:A:CYS:CA	1:766:A:CYS:C	7	15.5
(1,86)	1:784:A:SER:N	1:784:A:SER:CA	1:784:A:SER:C	1:785:A:VAL:N	5	15.48
(1,74)	1:766:A:CYS:N	1:766:A:CYS:CA	1:766:A:CYS:C	1:767:A:ARG:N	9	15.47
(1,74)	1:766:A:CYS:N	1:766:A:CYS:CA	1:766:A:CYS:C	1:767:A:ARG:N	13	15.46
(1,74)	1:766:A:CYS:N	1:766:A:CYS:CA	1:766:A:CYS:C	1:767:A:ARG:N	7	15.44
(1,230)	1:918:A:GLY:N	1:918:A:GLY:CA	1:918:A:GLY:C	1:919:A:MET:N	6	15.41

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,36)	1:730:A:GLY:C	1:731:A:ILE:N	1:731:A:ILE:CA	1:731:A:ILE:C	9	15.4
(1,78)	1:780:A:GLU:N	1:780:A:GLU:CA	1:780:A:GLU:C	1:781:A:TRP:N	16	15.33
(1,181)	1:875:A:ASP:N	1:875:A:ASP:CA	1:875:A:ASP:C	1:876:A:VAL:N	9	15.31
(1,179)	1:874:A:SER:N	1:874:A:SER:CA	1:874:A:SER:C	1:875:A:ASP:N	7	15.3
(1,155)	1:855:A:ASN:C	1:856:A:ASP:N	1:856:A:ASP:CA	1:856:A:ASP:C	3	15.27
(1,212)	1:904:A:ALA:N	1:904:A:ALA:CA	1:904:A:ALA:C	1:905:A:ASN:N	1	15.24
(1,103)	1:799:A:TYR:N	1:799:A:TYR:CA	1:799:A:TYR:C	1:800:A:LEU:N	7	15.22
(1,80)	1:781:A:TRP:N	1:781:A:TRP:CA	1:781:A:TRP:C	1:782:A:VAL:N	12	15.22
(1,144)	1:850:A:GLN:N	1:850:A:GLN:CA	1:850:A:GLN:C	1:851:A:CYS:N	12	15.19
(1,113)	1:829:A:VAL:N	1:829:A:VAL:CA	1:829:A:VAL:C	1:830:A:VAL:N	11	15.18
(1,74)	1:766:A:CYS:N	1:766:A:CYS:CA	1:766:A:CYS:C	1:767:A:ARG:N	1	15.18
(1,212)	1:904:A:ALA:N	1:904:A:ALA:CA	1:904:A:ALA:C	1:905:A:ASN:N	16	15.15
(1,74)	1:766:A:CYS:N	1:766:A:CYS:CA	1:766:A:CYS:C	1:767:A:ARG:N	5	15.15
(1,155)	1:855:A:ASN:C	1:856:A:ASP:N	1:856:A:ASP:CA	1:856:A:ASP:C	12	15.14
(1,143)	1:849:A:TYR:C	1:850:A:GLN:N	1:850:A:GLN:CA	1:850:A:GLN:C	4	15.08
(1,86)	1:784:A:SER:N	1:784:A:SER:CA	1:784:A:SER:C	1:785:A:VAL:N	16	15.08
(1,230)	1:918:A:GLY:N	1:918:A:GLY:CA	1:918:A:GLY:C	1:919:A:MET:N	17	15.02
(1,235)	1:922:A:CYS:C	1:923:A:LEU:N	1:923:A:LEU:CA	1:923:A:LEU:C	11	14.98
(1,117)	1:831:A:ASP:N	1:831:A:ASP:CA	1:831:A:ASP:C	1:832:A:ASP:N	2	14.98
(1,74)	1:766:A:CYS:N	1:766:A:CYS:CA	1:766:A:CYS:C	1:767:A:ARG:N	17	14.98
(1,155)	1:855:A:ASN:C	1:856:A:ASP:N	1:856:A:ASP:CA	1:856:A:ASP:C	17	14.9
(1,230)	1:918:A:GLY:N	1:918:A:GLY:CA	1:918:A:GLY:C	1:919:A:MET:N	14	14.86
(1,230)	1:918:A:GLY:N	1:918:A:GLY:CA	1:918:A:GLY:C	1:919:A:MET:N	10	14.8
(1,199)	1:895:A:LEU:N	1:895:A:LEU:CA	1:895:A:LEU:C	1:896:A:THR:N	15	14.79
(1,4)	1:708:A:ARG:N	1:708:A:ARG:CA	1:708:A:ARG:C	1:709:A:CYS:N	15	14.77
(1,230)	1:918:A:GLY:N	1:918:A:GLY:CA	1:918:A:GLY:C	1:919:A:MET:N	16	14.71
(1,74)	1:766:A:CYS:N	1:766:A:CYS:CA	1:766:A:CYS:C	1:767:A:ARG:N	16	14.69
(1,238)	1:924:A:SER:N	1:924:A:SER:CA	1:924:A:SER:C	1:925:A:LYS:N	11	14.68
(1,230)	1:918:A:GLY:N	1:918:A:GLY:CA	1:918:A:GLY:C	1:919:A:MET:N	15	14.68
(1,86)	1:784:A:SER:N	1:784:A:SER:CA	1:784:A:SER:C	1:785:A:VAL:N	18	14.68
(1,230)	1:918:A:GLY:N	1:918:A:GLY:CA	1:918:A:GLY:C	1:919:A:MET:N	11	14.66
(1,86)	1:784:A:SER:N	1:784:A:SER:CA	1:784:A:SER:C	1:785:A:VAL:N	19	14.65
(1,203)	1:899:A:VAL:C	1:900:A:ILE:N	1:900:A:ILE:CA	1:900:A:ILE:C	10	14.59
(1,233)	1:921:A:SER:C	1:922:A:CYS:N	1:922:A:CYS:CA	1:922:A:CYS:C	16	14.58
(1,4)	1:708:A:ARG:N	1:708:A:ARG:CA	1:708:A:ARG:C	1:709:A:CYS:N	3	14.56
(1,230)	1:918:A:GLY:N	1:918:A:GLY:CA	1:918:A:GLY:C	1:919:A:MET:N	18	14.55
(1,46)	1:741:A:PRO:N	1:741:A:PRO:CA	1:741:A:PRO:C	1:742:A:THR:N	1	14.55
(1,229)	1:917:A:SER:C	1:918:A:GLY:N	1:918:A:GLY:CA	1:918:A:GLY:C	13	14.49
(1,144)	1:850:A:GLN:N	1:850:A:GLN:CA	1:850:A:GLN:C	1:851:A:CYS:N	9	14.49
(1,208)	1:902:A:VAL:N	1:902:A:VAL:CA	1:902:A:VAL:C	1:903:A:THR:N	19	14.44
(1,60)	1:750:A:ASP:N	1:750:A:ASP:CA	1:750:A:ASP:C	1:751:A:GLU:N	16	14.44
(1,230)	1:918:A:GLY:N	1:918:A:GLY:CA	1:918:A:GLY:C	1:919:A:MET:N	19	14.43
(1,211)	1:903:A:THR:C	1:904:A:ALA:N	1:904:A:ALA:CA	1:904:A:ALA:C	13	14.41
(1,144)	1:850:A:GLN:N	1:850:A:GLN:CA	1:850:A:GLN:C	1:851:A:CYS:N	15	14.33
(1,154)	1:855:A:ASN:N	1:855:A:ASN:CA	1:855:A:ASN:C	1:856:A:ASP:N	18	14.28
(1,206)	1:901:A:GLY:N	1:901:A:GLY:CA	1:901:A:GLY:C	1:902:A:VAL:N	7	14.27
(1,86)	1:784:A:SER:N	1:784:A:SER:CA	1:784:A:SER:C	1:785:A:VAL:N	4	14.23
(1,149)	1:852:A:LYS:C	1:853:A:THR:N	1:853:A:THR:CA	1:853:A:THR:C	1	14.22
(1,60)	1:750:A:ASP:N	1:750:A:ASP:CA	1:750:A:ASP:C	1:751:A:GLU:N	14	14.22
(1,230)	1:918:A:GLY:N	1:918:A:GLY:CA	1:918:A:GLY:C	1:919:A:MET:N	5	14.2
(1,110)	1:827:A:ILE:C	1:828:A:LEU:N	1:828:A:LEU:CA	1:828:A:LEU:C	19	14.19

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,46)	1:741:A:PRO:N	1:741:A:PRO:CA	1:741:A:PRO:C	1:742:A:THR:N	17	14.19
(1,206)	1:901:A:GLY:N	1:901:A:GLY:CA	1:901:A:GLY:C	1:902:A:VAL:N	18	14.18
(1,146)	1:851:A:CYS:N	1:851:A:CYS:CA	1:851:A:CYS:C	1:852:A:LYS:N	7	14.18
(1,78)	1:780:A:GLU:N	1:780:A:GLU:CA	1:780:A:GLU:C	1:781:A:TRP:N	17	14.12
(1,110)	1:827:A:ILE:C	1:828:A:LEU:N	1:828:A:LEU:CA	1:828:A:LEU:C	14	14.1
(1,46)	1:741:A:PRO:N	1:741:A:PRO:CA	1:741:A:PRO:C	1:742:A:THR:N	19	14.1
(1,7)	1:709:A:CYS:C	1:710:A:TRP:N	1:710:A:TRP:CA	1:710:A:TRP:C	13	14.09
(1,61)	1:754:A:SER:C	1:755:A:LYS:N	1:755:A:LYS:CA	1:755:A:LYS:C	6	14.08
(1,230)	1:918:A:GLY:N	1:918:A:GLY:CA	1:918:A:GLY:C	1:919:A:MET:N	9	14.02
(1,83)	1:782:A:VAL:C	1:783:A:HIS:N	1:783:A:HIS:CA	1:783:A:HIS:C	2	13.98
(1,78)	1:780:A:GLU:N	1:780:A:GLU:CA	1:780:A:GLU:C	1:781:A:TRP:N	12	13.94
(1,181)	1:875:A:ASP:N	1:875:A:ASP:CA	1:875:A:ASP:C	1:876:A:VAL:N	2	13.91
(1,238)	1:924:A:SER:N	1:924:A:SER:CA	1:924:A:SER:C	1:925:A:LYS:N	13	13.87
(1,149)	1:852:A:LYS:C	1:853:A:THR:N	1:853:A:THR:CA	1:853:A:THR:C	7	13.87
(1,105)	1:825:A:MET:N	1:825:A:MET:CA	1:825:A:MET:C	1:826:A:MET:N	15	13.87
(1,7)	1:709:A:CYS:C	1:710:A:TRP:N	1:710:A:TRP:CA	1:710:A:TRP:C	20	13.87
(1,83)	1:782:A:VAL:C	1:783:A:HIS:N	1:783:A:HIS:CA	1:783:A:HIS:C	5	13.86
(1,46)	1:741:A:PRO:N	1:741:A:PRO:CA	1:741:A:PRO:C	1:742:A:THR:N	4	13.83
(1,179)	1:874:A:SER:N	1:874:A:SER:CA	1:874:A:SER:C	1:875:A:ASP:N	6	13.8
(1,110)	1:827:A:ILE:C	1:828:A:LEU:N	1:828:A:LEU:CA	1:828:A:LEU:C	6	13.79
(1,60)	1:750:A:ASP:N	1:750:A:ASP:CA	1:750:A:ASP:C	1:751:A:GLU:N	19	13.76
(1,148)	1:852:A:LYS:N	1:852:A:LYS:CA	1:852:A:LYS:C	1:853:A:THR:N	1	13.74
(1,210)	1:903:A:THR:N	1:903:A:THR:CA	1:903:A:THR:C	1:904:A:ALA:N	4	13.73
(1,78)	1:780:A:GLU:N	1:780:A:GLU:CA	1:780:A:GLU:C	1:781:A:TRP:N	10	13.72
(1,40)	1:732:A:VAL:C	1:733:A:VAL:N	1:733:A:VAL:CA	1:733:A:VAL:C	5	13.69
(1,46)	1:741:A:PRO:N	1:741:A:PRO:CA	1:741:A:PRO:C	1:742:A:THR:N	5	13.68
(1,46)	1:741:A:PRO:N	1:741:A:PRO:CA	1:741:A:PRO:C	1:742:A:THR:N	10	13.66
(1,46)	1:741:A:PRO:N	1:741:A:PRO:CA	1:741:A:PRO:C	1:742:A:THR:N	3	13.65
(1,78)	1:780:A:GLU:N	1:780:A:GLU:CA	1:780:A:GLU:C	1:781:A:TRP:N	11	13.55
(1,46)	1:741:A:PRO:N	1:741:A:PRO:CA	1:741:A:PRO:C	1:742:A:THR:N	11	13.54
(1,38)	1:731:A:ILE:C	1:732:A:VAL:N	1:732:A:VAL:CA	1:732:A:VAL:C	10	13.54
(1,179)	1:874:A:SER:N	1:874:A:SER:CA	1:874:A:SER:C	1:875:A:ASP:N	10	13.51
(1,7)	1:709:A:CYS:C	1:710:A:TRP:N	1:710:A:TRP:CA	1:710:A:TRP:C	3	13.5
(1,46)	1:741:A:PRO:N	1:741:A:PRO:CA	1:741:A:PRO:C	1:742:A:THR:N	8	13.48
(1,7)	1:709:A:CYS:C	1:710:A:TRP:N	1:710:A:TRP:CA	1:710:A:TRP:C	15	13.47
(1,46)	1:741:A:PRO:N	1:741:A:PRO:CA	1:741:A:PRO:C	1:742:A:THR:N	20	13.46
(1,230)	1:918:A:GLY:N	1:918:A:GLY:CA	1:918:A:GLY:C	1:919:A:MET:N	8	13.45
(1,110)	1:827:A:ILE:C	1:828:A:LEU:N	1:828:A:LEU:CA	1:828:A:LEU:C	13	13.45
(1,147)	1:851:A:CYS:C	1:852:A:LYS:N	1:852:A:LYS:CA	1:852:A:LYS:C	7	13.42
(1,276)	1:947:A:ARG:N	1:947:A:ARG:CA	1:947:A:ARG:C	1:948:A:ASP:N	18	13.4
(1,203)	1:899:A:VAL:C	1:900:A:ILE:N	1:900:A:ILE:CA	1:900:A:ILE:C	17	13.37
(1,197)	1:892:A:GLN:N	1:892:A:GLN:CA	1:892:A:GLN:C	1:893:A:LEU:N	19	13.34
(1,149)	1:852:A:LYS:C	1:853:A:THR:N	1:853:A:THR:CA	1:853:A:THR:C	14	13.31
(1,238)	1:924:A:SER:N	1:924:A:SER:CA	1:924:A:SER:C	1:925:A:LYS:N	9	13.29
(1,149)	1:852:A:LYS:C	1:853:A:THR:N	1:853:A:THR:CA	1:853:A:THR:C	19	13.29
(1,206)	1:901:A:GLY:N	1:901:A:GLY:CA	1:901:A:GLY:C	1:902:A:VAL:N	4	13.22
(1,179)	1:874:A:SER:N	1:874:A:SER:CA	1:874:A:SER:C	1:875:A:ASP:N	5	13.21
(1,156)	1:856:A:ASP:N	1:856:A:ASP:CA	1:856:A:ASP:C	1:857:A:GLY:N	13	13.18
(1,78)	1:780:A:GLU:N	1:780:A:GLU:CA	1:780:A:GLU:C	1:781:A:TRP:N	2	13.17
(1,232)	1:921:A:SER:N	1:921:A:SER:CA	1:921:A:SER:C	1:922:A:CYS:N	5	13.13
(1,156)	1:856:A:ASP:N	1:856:A:ASP:CA	1:856:A:ASP:C	1:857:A:GLY:N	7	13.08

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,52)	1:746:A:VAL:N	1:746:A:VAL:CA	1:746:A:VAL:C	1:747:A:LEU:N	8	13.08
(1,6)	1:709:A:CYS:N	1:709:A:CYS:CA	1:709:A:CYS:C	1:710:A:TRP:N	20	13.03
(1,149)	1:852:A:LYS:C	1:853:A:THR:N	1:853:A:THR:CA	1:853:A:THR:C	16	12.98
(1,179)	1:874:A:SER:N	1:874:A:SER:CA	1:874:A:SER:C	1:875:A:ASP:N	4	12.94
(1,211)	1:903:A:THR:C	1:904:A:ALA:N	1:904:A:ALA:CA	1:904:A:ALA:C	12	12.86
(1,155)	1:855:A:ASN:C	1:856:A:ASP:N	1:856:A:ASP:CA	1:856:A:ASP:C	5	12.84
(1,275)	1:946:A:SER:C	1:947:A:ARG:N	1:947:A:ARG:CA	1:947:A:ARG:C	2	12.83
(1,149)	1:852:A:LYS:C	1:853:A:THR:N	1:853:A:THR:CA	1:853:A:THR:C	10	12.82
(1,153)	1:854:A:ALA:C	1:855:A:ASN:N	1:855:A:ASN:CA	1:855:A:ASN:C	13	12.79
(1,6)	1:709:A:CYS:N	1:709:A:CYS:CA	1:709:A:CYS:C	1:710:A:TRP:N	5	12.76
(1,181)	1:875:A:ASP:N	1:875:A:ASP:CA	1:875:A:ASP:C	1:876:A:VAL:N	7	12.74
(1,149)	1:852:A:LYS:C	1:853:A:THR:N	1:853:A:THR:CA	1:853:A:THR:C	17	12.74
(1,85)	1:783:A:HIS:C	1:784:A:SER:N	1:784:A:SER:CA	1:784:A:SER:C	4	12.74
(1,39)	1:732:A:VAL:N	1:732:A:VAL:CA	1:732:A:VAL:C	1:733:A:VAL:N	8	12.74
(1,78)	1:780:A:GLU:N	1:780:A:GLU:CA	1:780:A:GLU:C	1:781:A:TRP:N	13	12.71
(1,144)	1:850:A:GLN:N	1:850:A:GLN:CA	1:850:A:GLN:C	1:851:A:CYS:N	17	12.67
(1,205)	1:900:A:ILE:C	1:901:A:GLY:N	1:901:A:GLY:CA	1:901:A:GLY:C	10	12.6
(1,40)	1:732:A:VAL:C	1:733:A:VAL:N	1:733:A:VAL:CA	1:733:A:VAL:C	19	12.59
(1,7)	1:709:A:CYS:C	1:710:A:TRP:N	1:710:A:TRP:CA	1:710:A:TRP:C	4	12.59
(1,74)	1:766:A:CYS:N	1:766:A:CYS:CA	1:766:A:CYS:C	1:767:A:ARG:N	18	12.57
(1,148)	1:852:A:LYS:N	1:852:A:LYS:CA	1:852:A:LYS:C	1:853:A:THR:N	16	12.55
(1,52)	1:746:A:VAL:N	1:746:A:VAL:CA	1:746:A:VAL:C	1:747:A:LEU:N	5	12.55
(1,205)	1:900:A:ILE:C	1:901:A:GLY:N	1:901:A:GLY:CA	1:901:A:GLY:C	12	12.5
(1,6)	1:709:A:CYS:N	1:709:A:CYS:CA	1:709:A:CYS:C	1:710:A:TRP:N	15	12.5
(1,85)	1:783:A:HIS:C	1:784:A:SER:N	1:784:A:SER:CA	1:784:A:SER:C	18	12.48
(1,117)	1:831:A:ASP:N	1:831:A:ASP:CA	1:831:A:ASP:C	1:832:A:ASP:N	7	12.46
(1,236)	1:923:A:LEU:N	1:923:A:LEU:CA	1:923:A:LEU:C	1:924:A:SER:N	14	12.45
(1,7)	1:709:A:CYS:C	1:710:A:TRP:N	1:710:A:TRP:CA	1:710:A:TRP:C	17	12.44
(1,52)	1:746:A:VAL:N	1:746:A:VAL:CA	1:746:A:VAL:C	1:747:A:LEU:N	11	12.43
(1,11)	1:711:A:LEU:C	1:712:A:ALA:N	1:712:A:ALA:CA	1:712:A:ALA:C	10	12.43
(1,4)	1:708:A:ARG:N	1:708:A:ARG:CA	1:708:A:ARG:C	1:709:A:CYS:N	14	12.42
(1,85)	1:783:A:HIS:C	1:784:A:SER:N	1:784:A:SER:CA	1:784:A:SER:C	13	12.4
(1,38)	1:731:A:ILE:C	1:732:A:VAL:N	1:732:A:VAL:CA	1:732:A:VAL:C	6	12.36
(1,148)	1:852:A:LYS:N	1:852:A:LYS:CA	1:852:A:LYS:C	1:853:A:THR:N	19	12.34
(1,85)	1:783:A:HIS:C	1:784:A:SER:N	1:784:A:SER:CA	1:784:A:SER:C	3	12.33
(1,83)	1:782:A:VAL:C	1:783:A:HIS:N	1:783:A:HIS:CA	1:783:A:HIS:C	7	12.29
(1,11)	1:711:A:LEU:C	1:712:A:ALA:N	1:712:A:ALA:CA	1:712:A:ALA:C	7	12.24
(1,52)	1:746:A:VAL:N	1:746:A:VAL:CA	1:746:A:VAL:C	1:747:A:LEU:N	13	12.21
(1,149)	1:852:A:LYS:C	1:853:A:THR:N	1:853:A:THR:CA	1:853:A:THR:C	20	12.2
(1,148)	1:852:A:LYS:N	1:852:A:LYS:CA	1:852:A:LYS:C	1:853:A:THR:N	13	12.17
(1,52)	1:746:A:VAL:N	1:746:A:VAL:CA	1:746:A:VAL:C	1:747:A:LEU:N	2	12.16
(1,228)	1:917:A:SER:N	1:917:A:SER:CA	1:917:A:SER:C	1:918:A:GLY:N	10	12.15
(1,7)	1:709:A:CYS:C	1:710:A:TRP:N	1:710:A:TRP:CA	1:710:A:TRP:C	5	12.15
(1,52)	1:746:A:VAL:N	1:746:A:VAL:CA	1:746:A:VAL:C	1:747:A:LEU:N	7	12.11
(1,229)	1:917:A:SER:C	1:918:A:GLY:N	1:918:A:GLY:CA	1:918:A:GLY:C	2	12.09
(1,11)	1:711:A:LEU:C	1:712:A:ALA:N	1:712:A:ALA:CA	1:712:A:ALA:C	4	12.05
(1,236)	1:923:A:LEU:N	1:923:A:LEU:CA	1:923:A:LEU:C	1:924:A:SER:N	9	12.04
(1,52)	1:746:A:VAL:N	1:746:A:VAL:CA	1:746:A:VAL:C	1:747:A:LEU:N	3	11.98
(1,85)	1:783:A:HIS:C	1:784:A:SER:N	1:784:A:SER:CA	1:784:A:SER:C	12	11.96
(1,38)	1:731:A:ILE:C	1:732:A:VAL:N	1:732:A:VAL:CA	1:732:A:VAL:C	14	11.93
(1,143)	1:849:A:TYR:C	1:850:A:GLN:N	1:850:A:GLN:CA	1:850:A:GLN:C	11	11.92

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,52)	1:746:A:VAL:N	1:746:A:VAL:CA	1:746:A:VAL:C	1:747:A:LEU:N	10	11.92
(1,113)	1:829:A:VAL:N	1:829:A:VAL:CA	1:829:A:VAL:C	1:830:A:VAL:N	15	11.91
(1,11)	1:711:A:LEU:C	1:712:A:ALA:N	1:712:A:ALA:CA	1:712:A:ALA:C	9	11.91
(1,143)	1:849:A:TYR:C	1:850:A:GLN:N	1:850:A:GLN:CA	1:850:A:GLN:C	17	11.9
(1,7)	1:709:A:CYS:C	1:710:A:TRP:N	1:710:A:TRP:CA	1:710:A:TRP:C	1	11.86
(1,52)	1:746:A:VAL:N	1:746:A:VAL:CA	1:746:A:VAL:C	1:747:A:LEU:N	4	11.85
(1,75)	1:771:A:GLY:C	1:772:A:ILE:N	1:772:A:ILE:CA	1:772:A:ILE:C	7	11.84
(1,150)	1:853:A:THR:N	1:853:A:THR:CA	1:853:A:THR:C	1:854:A:ALA:N	7	11.81
(1,11)	1:711:A:LEU:C	1:712:A:ALA:N	1:712:A:ALA:CA	1:712:A:ALA:C	2	11.81
(1,52)	1:746:A:VAL:N	1:746:A:VAL:CA	1:746:A:VAL:C	1:747:A:LEU:N	17	11.76
(1,7)	1:709:A:CYS:C	1:710:A:TRP:N	1:710:A:TRP:CA	1:710:A:TRP:C	6	11.74
(1,5)	1:708:A:ARG:C	1:709:A:CYS:N	1:709:A:CYS:CA	1:709:A:CYS:C	7	11.73
(1,202)	1:899:A:VAL:N	1:899:A:VAL:CA	1:899:A:VAL:C	1:900:A:ILE:N	13	11.7
(1,276)	1:947:A:ARG:N	1:947:A:ARG:CA	1:947:A:ARG:C	1:948:A:ASP:N	7	11.69
(1,104)	1:824:A:ASP:C	1:825:A:MET:N	1:825:A:MET:CA	1:825:A:MET:C	13	11.68
(1,113)	1:829:A:VAL:N	1:829:A:VAL:CA	1:829:A:VAL:C	1:830:A:VAL:N	20	11.67
(1,52)	1:746:A:VAL:N	1:746:A:VAL:CA	1:746:A:VAL:C	1:747:A:LEU:N	16	11.67
(1,11)	1:711:A:LEU:C	1:712:A:ALA:N	1:712:A:ALA:CA	1:712:A:ALA:C	3	11.66
(1,36)	1:730:A:GLY:C	1:731:A:ILE:N	1:731:A:ILE:CA	1:731:A:ILE:C	8	11.65
(1,199)	1:895:A:LEU:N	1:895:A:LEU:CA	1:895:A:LEU:C	1:896:A:THR:N	3	11.64
(1,275)	1:946:A:SER:C	1:947:A:ARG:N	1:947:A:ARG:CA	1:947:A:ARG:C	11	11.63
(1,237)	1:923:A:LEU:C	1:924:A:SER:N	1:924:A:SER:CA	1:924:A:SER:C	19	11.63
(1,102)	1:798:A:ILE:C	1:799:A:TYR:N	1:799:A:TYR:CA	1:799:A:TYR:C	9	11.62
(1,63)	1:760:A:ARG:C	1:761:A:ALA:N	1:761:A:ALA:CA	1:761:A:ALA:C	16	11.59
(1,276)	1:947:A:ARG:N	1:947:A:ARG:CA	1:947:A:ARG:C	1:948:A:ASP:N	8	11.49
(1,7)	1:709:A:CYS:C	1:710:A:TRP:N	1:710:A:TRP:CA	1:710:A:TRP:C	10	11.49
(1,276)	1:947:A:ARG:N	1:947:A:ARG:CA	1:947:A:ARG:C	1:948:A:ASP:N	13	11.48
(1,205)	1:900:A:ILE:C	1:901:A:GLY:N	1:901:A:GLY:CA	1:901:A:GLY:C	9	11.48
(1,105)	1:825:A:MET:N	1:825:A:MET:CA	1:825:A:MET:C	1:826:A:MET:N	13	11.47
(1,155)	1:855:A:ASN:C	1:856:A:ASP:N	1:856:A:ASP:CA	1:856:A:ASP:C	20	11.45
(1,60)	1:750:A:ASP:N	1:750:A:ASP:CA	1:750:A:ASP:C	1:751:A:GLU:N	9	11.45
(1,63)	1:760:A:ARG:C	1:761:A:ALA:N	1:761:A:ALA:CA	1:761:A:ALA:C	18	11.44
(1,5)	1:708:A:ARG:C	1:709:A:CYS:N	1:709:A:CYS:CA	1:709:A:CYS:C	14	11.44
(1,11)	1:711:A:LEU:C	1:712:A:ALA:N	1:712:A:ALA:CA	1:712:A:ALA:C	17	11.43
(1,52)	1:746:A:VAL:N	1:746:A:VAL:CA	1:746:A:VAL:C	1:747:A:LEU:N	19	11.42
(1,230)	1:918:A:GLY:N	1:918:A:GLY:CA	1:918:A:GLY:C	1:919:A:MET:N	12	11.38
(1,5)	1:708:A:ARG:C	1:709:A:CYS:N	1:709:A:CYS:CA	1:709:A:CYS:C	4	11.37
(1,75)	1:771:A:GLY:C	1:772:A:ILE:N	1:772:A:ILE:CA	1:772:A:ILE:C	19	11.36
(1,202)	1:899:A:VAL:N	1:899:A:VAL:CA	1:899:A:VAL:C	1:900:A:ILE:N	10	11.32
(1,149)	1:852:A:LYS:C	1:853:A:THR:N	1:853:A:THR:CA	1:853:A:THR:C	13	11.32
(1,72)	1:765:A:PHE:N	1:765:A:PHE:CA	1:765:A:PHE:C	1:766:A:CYS:N	2	11.3
(1,11)	1:711:A:LEU:C	1:712:A:ALA:N	1:712:A:ALA:CA	1:712:A:ALA:C	13	11.29
(1,6)	1:709:A:CYS:N	1:709:A:CYS:CA	1:709:A:CYS:C	1:710:A:TRP:N	16	11.29
(1,71)	1:764:A:THR:C	1:765:A:PHE:N	1:765:A:PHE:CA	1:765:A:PHE:C	7	11.27
(1,102)	1:798:A:ILE:C	1:799:A:TYR:N	1:799:A:TYR:CA	1:799:A:TYR:C	16	11.26
(1,70)	1:764:A:THR:N	1:764:A:THR:CA	1:764:A:THR:C	1:765:A:PHE:N	1	11.22
(1,74)	1:766:A:CYS:N	1:766:A:CYS:CA	1:766:A:CYS:C	1:767:A:ARG:N	15	11.2
(1,46)	1:741:A:PRO:N	1:741:A:PRO:CA	1:741:A:PRO:C	1:742:A:THR:N	13	11.19
(1,5)	1:708:A:ARG:C	1:709:A:CYS:N	1:709:A:CYS:CA	1:709:A:CYS:C	2	11.19
(1,11)	1:711:A:LEU:C	1:712:A:ALA:N	1:712:A:ALA:CA	1:712:A:ALA:C	6	11.15
(1,207)	1:901:A:GLY:C	1:902:A:VAL:N	1:902:A:VAL:CA	1:902:A:VAL:C	6	11.12

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,276)	1:947:A:ARG:N	1:947:A:ARG:CA	1:947:A:ARG:C	1:948:A:ASP:N	6	11.11
(1,84)	1:783:A:HIS:N	1:783:A:HIS:CA	1:783:A:HIS:C	1:784:A:SER:N	17	11.08
(1,149)	1:852:A:LYS:C	1:853:A:THR:N	1:853:A:THR:CA	1:853:A:THR:C	12	11.06
(1,101)	1:798:A:ILE:N	1:798:A:ILE:CA	1:798:A:ILE:C	1:799:A:TYR:N	12	11.06
(1,68)	1:763:A:VAL:N	1:763:A:VAL:CA	1:763:A:VAL:C	1:764:A:THR:N	11	11.06
(1,11)	1:711:A:LEU:C	1:712:A:ALA:N	1:712:A:ALA:CA	1:712:A:ALA:C	5	11.05
(1,39)	1:732:A:VAL:N	1:732:A:VAL:CA	1:732:A:VAL:C	1:733:A:VAL:N	20	11.03
(1,52)	1:746:A:VAL:N	1:746:A:VAL:CA	1:746:A:VAL:C	1:747:A:LEU:N	15	11.02
(1,75)	1:771:A:GLY:C	1:772:A:ILE:N	1:772:A:ILE:CA	1:772:A:ILE:C	10	11.0
(1,83)	1:782:A:VAL:C	1:783:A:HIS:N	1:783:A:HIS:CA	1:783:A:HIS:C	18	10.98
(1,204)	1:900:A:ILE:N	1:900:A:ILE:CA	1:900:A:ILE:C	1:901:A:GLY:N	12	10.97
(1,118)	1:834:A:PRO:N	1:834:A:PRO:CA	1:834:A:PRO:C	1:835:A:ILE:N	19	10.93
(1,102)	1:798:A:ILE:C	1:799:A:TYR:N	1:799:A:TYR:CA	1:799:A:TYR:C	4	10.91
(1,214)	1:910:A:GLU:N	1:910:A:GLU:CA	1:910:A:GLU:C	1:911:A:LYS:N	8	10.89
(1,206)	1:901:A:GLY:N	1:901:A:GLY:CA	1:901:A:GLY:C	1:902:A:VAL:N	8	10.87
(1,75)	1:771:A:GLY:C	1:772:A:ILE:N	1:772:A:ILE:CA	1:772:A:ILE:C	2	10.84
(1,179)	1:874:A:SER:N	1:874:A:SER:CA	1:874:A:SER:C	1:875:A:ASP:N	2	10.81
(1,153)	1:854:A:ALA:C	1:855:A:ASN:N	1:855:A:ASN:CA	1:855:A:ASN:C	1	10.8
(1,110)	1:827:A:ILE:C	1:828:A:LEU:N	1:828:A:LEU:CA	1:828:A:LEU:C	15	10.76
(1,11)	1:711:A:LEU:C	1:712:A:ALA:N	1:712:A:ALA:CA	1:712:A:ALA:C	8	10.76
(1,40)	1:732:A:VAL:C	1:733:A:VAL:N	1:733:A:VAL:CA	1:733:A:VAL:C	3	10.66
(1,272)	1:945:A:LYS:N	1:945:A:LYS:CA	1:945:A:LYS:C	1:946:A:SER:N	9	10.65
(1,6)	1:709:A:CYS:N	1:709:A:CYS:CA	1:709:A:CYS:C	1:710:A:TRP:N	10	10.64
(1,202)	1:899:A:VAL:N	1:899:A:VAL:CA	1:899:A:VAL:C	1:900:A:ILE:N	16	10.63
(1,110)	1:827:A:ILE:C	1:828:A:LEU:N	1:828:A:LEU:CA	1:828:A:LEU:C	16	10.6
(1,102)	1:798:A:ILE:C	1:799:A:TYR:N	1:799:A:TYR:CA	1:799:A:TYR:C	3	10.6
(1,1)	1:706:A:GLY:C	1:707:A:LYS:N	1:707:A:LYS:CA	1:707:A:LYS:C	9	10.59
(1,75)	1:771:A:GLY:C	1:772:A:ILE:N	1:772:A:ILE:CA	1:772:A:ILE:C	18	10.56
(1,270)	1:944:A:ARG:N	1:944:A:ARG:CA	1:944:A:ARG:C	1:945:A:LYS:N	2	10.54
(1,208)	1:902:A:VAL:N	1:902:A:VAL:CA	1:902:A:VAL:C	1:903:A:THR:N	4	10.54
(1,103)	1:799:A:TYR:N	1:799:A:TYR:CA	1:799:A:TYR:C	1:800:A:LEU:N	4	10.54
(1,238)	1:924:A:SER:N	1:924:A:SER:CA	1:924:A:SER:C	1:925:A:LYS:N	6	10.53
(1,276)	1:947:A:ARG:N	1:947:A:ARG:CA	1:947:A:ARG:C	1:948:A:ASP:N	2	10.51
(1,84)	1:783:A:HIS:N	1:783:A:HIS:CA	1:783:A:HIS:C	1:784:A:SER:N	8	10.5
(1,61)	1:754:A:SER:C	1:755:A:LYS:N	1:755:A:LYS:CA	1:755:A:LYS:C	3	10.5
(1,56)	1:748:A:ILE:N	1:748:A:ILE:CA	1:748:A:ILE:C	1:749:A:THR:N	15	10.46
(1,75)	1:771:A:GLY:C	1:772:A:ILE:N	1:772:A:ILE:CA	1:772:A:ILE:C	13	10.42
(1,238)	1:924:A:SER:N	1:924:A:SER:CA	1:924:A:SER:C	1:925:A:LYS:N	7	10.4
(1,145)	1:850:A:GLN:C	1:851:A:CYS:N	1:851:A:CYS:CA	1:851:A:CYS:C	5	10.39
(1,56)	1:748:A:ILE:N	1:748:A:ILE:CA	1:748:A:ILE:C	1:749:A:THR:N	19	10.39
(1,46)	1:741:A:PRO:N	1:741:A:PRO:CA	1:741:A:PRO:C	1:742:A:THR:N	9	10.37
(1,270)	1:944:A:ARG:N	1:944:A:ARG:CA	1:944:A:ARG:C	1:945:A:LYS:N	14	10.34
(1,110)	1:827:A:ILE:C	1:828:A:LEU:N	1:828:A:LEU:CA	1:828:A:LEU:C	18	10.34
(1,181)	1:875:A:ASP:N	1:875:A:ASP:CA	1:875:A:ASP:C	1:876:A:VAL:N	5	10.33
(1,75)	1:771:A:GLY:C	1:772:A:ILE:N	1:772:A:ILE:CA	1:772:A:ILE:C	14	10.33
(1,274)	1:946:A:SER:N	1:946:A:SER:CA	1:946:A:SER:C	1:947:A:ARG:N	3	10.32
(1,66)	1:762:A:VAL:N	1:762:A:VAL:CA	1:762:A:VAL:C	1:763:A:VAL:N	6	10.29
(1,101)	1:798:A:ILE:N	1:798:A:ILE:CA	1:798:A:ILE:C	1:799:A:TYR:N	3	10.28
(1,153)	1:854:A:ALA:C	1:855:A:ASN:N	1:855:A:ASN:CA	1:855:A:ASN:C	15	10.24
(1,231)	1:920:A:ASP:C	1:921:A:SER:N	1:921:A:SER:CA	1:921:A:SER:C	9	10.23
(1,177)	1:873:A:LEU:N	1:873:A:LEU:CA	1:873:A:LEU:C	1:874:A:SER:N	17	10.23

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,11)	1:711:A:LEU:C	1:712:A:ALA:N	1:712:A:ALA:CA	1:712:A:ALA:C	16	10.23
(1,117)	1:831:A:ASP:N	1:831:A:ASP:CA	1:831:A:ASP:C	1:832:A:ASP:N	8	10.18
(1,56)	1:748:A:ILE:N	1:748:A:ILE:CA	1:748:A:ILE:C	1:749:A:THR:N	12	10.17
(1,204)	1:900:A:ILE:N	1:900:A:ILE:CA	1:900:A:ILE:C	1:901:A:GLY:N	13	10.16
(1,276)	1:947:A:ARG:N	1:947:A:ARG:CA	1:947:A:ARG:C	1:948:A:ASP:N	3	10.15
(1,205)	1:900:A:ILE:C	1:901:A:GLY:N	1:901:A:GLY:CA	1:901:A:GLY:C	6	10.09
(1,75)	1:771:A:GLY:C	1:772:A:ILE:N	1:772:A:ILE:CA	1:772:A:ILE:C	12	10.06
(1,179)	1:874:A:SER:N	1:874:A:SER:CA	1:874:A:SER:C	1:875:A:ASP:N	19	10.04
(1,3)	1:707:A:LYS:C	1:708:A:ARG:N	1:708:A:ARG:CA	1:708:A:ARG:C	16	10.01
(1,238)	1:924:A:SER:N	1:924:A:SER:CA	1:924:A:SER:C	1:925:A:LYS:N	18	10.0
(1,228)	1:917:A:SER:N	1:917:A:SER:CA	1:917:A:SER:C	1:918:A:GLY:N	1	10.0
(1,143)	1:849:A:TYR:C	1:850:A:GLN:N	1:850:A:GLN:CA	1:850:A:GLN:C	7	9.99
(1,1)	1:706:A:GLY:C	1:707:A:LYS:N	1:707:A:LYS:CA	1:707:A:LYS:C	10	9.99
(1,101)	1:798:A:ILE:N	1:798:A:ILE:CA	1:798:A:ILE:C	1:799:A:TYR:N	20	9.98
(1,68)	1:763:A:VAL:N	1:763:A:VAL:CA	1:763:A:VAL:C	1:764:A:THR:N	18	9.97
(1,78)	1:780:A:GLU:N	1:780:A:GLU:CA	1:780:A:GLU:C	1:781:A:TRP:N	14	9.96
(1,7)	1:709:A:CYS:C	1:710:A:TRP:N	1:710:A:TRP:CA	1:710:A:TRP:C	19	9.96
(1,276)	1:947:A:ARG:N	1:947:A:ARG:CA	1:947:A:ARG:C	1:948:A:ASP:N	10	9.94
(1,146)	1:851:A:CYS:N	1:851:A:CYS:CA	1:851:A:CYS:C	1:852:A:LYS:N	15	9.93
(1,211)	1:903:A:THR:C	1:904:A:ALA:N	1:904:A:ALA:CA	1:904:A:ALA:C	14	9.92
(1,56)	1:748:A:ILE:N	1:748:A:ILE:CA	1:748:A:ILE:C	1:749:A:THR:N	3	9.89
(1,160)	1:859:A:ASP:N	1:859:A:ASP:CA	1:859:A:ASP:C	1:860:A:ALA:N	1	9.88
(1,272)	1:945:A:LYS:N	1:945:A:LYS:CA	1:945:A:LYS:C	1:946:A:SER:N	12	9.87
(1,78)	1:780:A:GLU:N	1:780:A:GLU:CA	1:780:A:GLU:C	1:781:A:TRP:N	18	9.87
(1,56)	1:748:A:ILE:N	1:748:A:ILE:CA	1:748:A:ILE:C	1:749:A:THR:N	5	9.85
(1,68)	1:763:A:VAL:N	1:763:A:VAL:CA	1:763:A:VAL:C	1:764:A:THR:N	13	9.81
(1,40)	1:732:A:VAL:C	1:733:A:VAL:N	1:733:A:VAL:CA	1:733:A:VAL:C	17	9.81
(1,78)	1:780:A:GLU:N	1:780:A:GLU:CA	1:780:A:GLU:C	1:781:A:TRP:N	19	9.8
(1,149)	1:852:A:LYS:C	1:853:A:THR:N	1:853:A:THR:CA	1:853:A:THR:C	18	9.79
(1,134)	1:842:A:ASP:N	1:842:A:ASP:CA	1:842:A:ASP:C	1:843:A:GLN:N	12	9.76
(1,56)	1:748:A:ILE:N	1:748:A:ILE:CA	1:748:A:ILE:C	1:749:A:THR:N	7	9.76
(1,1)	1:706:A:GLY:C	1:707:A:LYS:N	1:707:A:LYS:CA	1:707:A:LYS:C	20	9.7
(1,201)	1:898:A:PRO:C	1:899:A:VAL:N	1:899:A:VAL:CA	1:899:A:VAL:C	18	9.64
(1,148)	1:852:A:LYS:N	1:852:A:LYS:CA	1:852:A:LYS:C	1:853:A:THR:N	7	9.6
(1,11)	1:711:A:LEU:C	1:712:A:ALA:N	1:712:A:ALA:CA	1:712:A:ALA:C	11	9.6
(1,111)	1:828:A:LEU:N	1:828:A:LEU:CA	1:828:A:LEU:C	1:829:A:VAL:N	6	9.59
(1,60)	1:750:A:ASP:N	1:750:A:ASP:CA	1:750:A:ASP:C	1:751:A:GLU:N	15	9.59
(1,149)	1:852:A:LYS:C	1:853:A:THR:N	1:853:A:THR:CA	1:853:A:THR:C	9	9.57
(1,85)	1:783:A:HIS:C	1:784:A:SER:N	1:784:A:SER:CA	1:784:A:SER:C	19	9.57
(1,75)	1:771:A:GLY:C	1:772:A:ILE:N	1:772:A:ILE:CA	1:772:A:ILE:C	9	9.52
(1,259)	1:938:A:LEU:C	1:939:A:TYR:N	1:939:A:TYR:CA	1:939:A:TYR:C	15	9.49
(1,56)	1:748:A:ILE:N	1:748:A:ILE:CA	1:748:A:ILE:C	1:749:A:THR:N	14	9.47
(1,4)	1:708:A:ARG:N	1:708:A:ARG:CA	1:708:A:ARG:C	1:709:A:CYS:N	4	9.47
(1,46)	1:741:A:PRO:N	1:741:A:PRO:CA	1:741:A:PRO:C	1:742:A:THR:N	12	9.46
(1,200)	1:898:A:PRO:N	1:898:A:PRO:CA	1:898:A:PRO:C	1:899:A:VAL:N	7	9.45
(1,56)	1:748:A:ILE:N	1:748:A:ILE:CA	1:748:A:ILE:C	1:749:A:THR:N	13	9.45
(1,276)	1:947:A:ARG:N	1:947:A:ARG:CA	1:947:A:ARG:C	1:948:A:ASP:N	5	9.43
(1,4)	1:708:A:ARG:N	1:708:A:ARG:CA	1:708:A:ARG:C	1:709:A:CYS:N	2	9.39
(1,80)	1:781:A:TRP:N	1:781:A:TRP:CA	1:781:A:TRP:C	1:782:A:VAL:N	1	9.36
(1,56)	1:748:A:ILE:N	1:748:A:ILE:CA	1:748:A:ILE:C	1:749:A:THR:N	18	9.36
(1,236)	1:923:A:LEU:N	1:923:A:LEU:CA	1:923:A:LEU:C	1:924:A:SER:N	13	9.35

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,149)	1:852:A:LYS:C	1:853:A:THR:N	1:853:A:THR:CA	1:853:A:THR:C	6	9.34
(1,87)	1:790:A:GLU:C	1:791:A:LEU:N	1:791:A:LEU:CA	1:791:A:LEU:C	11	9.31
(1,56)	1:748:A:ILE:N	1:748:A:ILE:CA	1:748:A:ILE:C	1:749:A:THR:N	6	9.31
(1,32)	1:725:A:SER:C	1:726:A:LEU:N	1:726:A:LEU:CA	1:726:A:LEU:C	19	9.31
(1,68)	1:763:A:VAL:N	1:763:A:VAL:CA	1:763:A:VAL:C	1:764:A:THR:N	8	9.29
(1,4)	1:708:A:ARG:N	1:708:A:ARG:CA	1:708:A:ARG:C	1:709:A:CYS:N	6	9.29
(1,160)	1:859:A:ASP:N	1:859:A:ASP:CA	1:859:A:ASP:C	1:860:A:ALA:N	5	9.28
(1,107)	1:826:A:MET:N	1:826:A:MET:CA	1:826:A:MET:C	1:827:A:ILE:N	19	9.26
(1,211)	1:903:A:THR:C	1:904:A:ALA:N	1:904:A:ALA:CA	1:904:A:ALA:C	4	9.24
(1,56)	1:748:A:ILE:N	1:748:A:ILE:CA	1:748:A:ILE:C	1:749:A:THR:N	16	9.21
(1,6)	1:709:A:CYS:N	1:709:A:CYS:CA	1:709:A:CYS:C	1:710:A:TRP:N	13	9.21
(1,235)	1:922:A:CYS:C	1:923:A:LEU:N	1:923:A:LEU:CA	1:923:A:LEU:C	4	9.2
(1,7)	1:709:A:CYS:C	1:710:A:TRP:N	1:710:A:TRP:CA	1:710:A:TRP:C	8	9.18
(1,63)	1:760:A:ARG:C	1:761:A:ALA:N	1:761:A:ALA:CA	1:761:A:ALA:C	14	9.16
(1,171)	1:864:A:LEU:C	1:865:A:SER:N	1:865:A:SER:CA	1:865:A:SER:C	2	9.15
(1,32)	1:725:A:SER:C	1:726:A:LEU:N	1:726:A:LEU:CA	1:726:A:LEU:C	14	9.15
(1,6)	1:709:A:CYS:N	1:709:A:CYS:CA	1:709:A:CYS:C	1:710:A:TRP:N	3	9.15
(1,210)	1:903:A:THR:N	1:903:A:THR:CA	1:903:A:THR:C	1:904:A:ALA:N	8	9.12
(1,160)	1:859:A:ASP:N	1:859:A:ASP:CA	1:859:A:ASP:C	1:860:A:ALA:N	7	9.09
(1,205)	1:900:A:ILE:C	1:901:A:GLY:N	1:901:A:GLY:CA	1:901:A:GLY:C	3	9.06
(1,146)	1:851:A:CYS:N	1:851:A:CYS:CA	1:851:A:CYS:C	1:852:A:LYS:N	17	9.06
(1,32)	1:725:A:SER:C	1:726:A:LEU:N	1:726:A:LEU:CA	1:726:A:LEU:C	12	9.06
(1,155)	1:855:A:ASN:C	1:856:A:ASP:N	1:856:A:ASP:CA	1:856:A:ASP:C	15	9.05
(1,78)	1:780:A:GLU:N	1:780:A:GLU:CA	1:780:A:GLU:C	1:781:A:TRP:N	15	8.96
(1,32)	1:725:A:SER:C	1:726:A:LEU:N	1:726:A:LEU:CA	1:726:A:LEU:C	11	8.95
(1,128)	1:839:A:LEU:N	1:839:A:LEU:CA	1:839:A:LEU:C	1:840:A:LEU:N	15	8.92
(1,160)	1:859:A:ASP:N	1:859:A:ASP:CA	1:859:A:ASP:C	1:860:A:ALA:N	15	8.9
(1,130)	1:840:A:LEU:N	1:840:A:LEU:CA	1:840:A:LEU:C	1:841:A:ALA:N	6	8.9
(1,228)	1:917:A:SER:N	1:917:A:SER:CA	1:917:A:SER:C	1:918:A:GLY:N	17	8.84
(1,152)	1:854:A:ALA:N	1:854:A:ALA:CA	1:854:A:ALA:C	1:855:A:ASN:N	2	8.83
(1,84)	1:783:A:HIS:N	1:783:A:HIS:CA	1:783:A:HIS:C	1:784:A:SER:N	16	8.82
(1,75)	1:771:A:GLY:C	1:772:A:ILE:N	1:772:A:ILE:CA	1:772:A:ILE:C	5	8.76
(1,268)	1:943:A:VAL:N	1:943:A:VAL:CA	1:943:A:VAL:C	1:944:A:ARG:N	19	8.75
(1,143)	1:849:A:TYR:C	1:850:A:GLN:N	1:850:A:GLN:CA	1:850:A:GLN:C	15	8.75
(1,270)	1:944:A:ARG:N	1:944:A:ARG:CA	1:944:A:ARG:C	1:945:A:LYS:N	12	8.74
(1,177)	1:873:A:LEU:N	1:873:A:LEU:CA	1:873:A:LEU:C	1:874:A:SER:N	7	8.71
(1,68)	1:763:A:VAL:N	1:763:A:VAL:CA	1:763:A:VAL:C	1:764:A:THR:N	4	8.71
(1,113)	1:829:A:VAL:N	1:829:A:VAL:CA	1:829:A:VAL:C	1:830:A:VAL:N	6	8.69
(1,208)	1:902:A:VAL:N	1:902:A:VAL:CA	1:902:A:VAL:C	1:903:A:THR:N	17	8.66
(1,179)	1:874:A:SER:N	1:874:A:SER:CA	1:874:A:SER:C	1:875:A:ASP:N	1	8.66
(1,160)	1:859:A:ASP:N	1:859:A:ASP:CA	1:859:A:ASP:C	1:860:A:ALA:N	2	8.66
(1,144)	1:850:A:GLN:N	1:850:A:GLN:CA	1:850:A:GLN:C	1:851:A:CYS:N	16	8.61
(1,12)	1:715:A:ASN:C	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:CA	1:716:A:ALA:C	20	8.59
(1,128)	1:839:A:LEU:N	1:839:A:LEU:CA	1:839:A:LEU:C	1:840:A:LEU:N	4	8.57
(1,56)	1:748:A:ILE:N	1:748:A:ILE:CA	1:748:A:ILE:C	1:749:A:THR:N	17	8.56
(1,203)	1:899:A:VAL:C	1:900:A:ILE:N	1:900:A:ILE:CA	1:900:A:ILE:C	6	8.55
(1,128)	1:839:A:LEU:N	1:839:A:LEU:CA	1:839:A:LEU:C	1:840:A:LEU:N	3	8.55
(1,268)	1:943:A:VAL:N	1:943:A:VAL:CA	1:943:A:VAL:C	1:944:A:ARG:N	2	8.51
(1,83)	1:782:A:VAL:C	1:783:A:HIS:N	1:783:A:HIS:CA	1:783:A:HIS:C	16	8.5
(1,32)	1:725:A:SER:C	1:726:A:LEU:N	1:726:A:LEU:CA	1:726:A:LEU:C	9	8.48
(1,147)	1:851:A:CYS:C	1:852:A:LYS:N	1:852:A:LYS:CA	1:852:A:LYS:C	17	8.44

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,266)	1:942:A:ARG:N	1:942:A:ARG:CA	1:942:A:ARG:C	1:943:A:VAL:N	15	8.42
(1,148)	1:852:A:LYS:N	1:852:A:LYS:CA	1:852:A:LYS:C	1:853:A:THR:N	5	8.42
(1,142)	1:846:A:SER:N	1:846:A:SER:CA	1:846:A:SER:C	1:847:A:LEU:N	19	8.42
(1,117)	1:831:A:ASP:N	1:831:A:ASP:CA	1:831:A:ASP:C	1:832:A:ASP:N	13	8.42
(1,236)	1:923:A:LEU:N	1:923:A:LEU:CA	1:923:A:LEU:C	1:924:A:SER:N	7	8.4
(1,244)	1:931:A:VAL:N	1:931:A:VAL:CA	1:931:A:VAL:C	1:932:A:ILE:N	20	8.39
(1,10)	1:711:A:LEU:N	1:711:A:LEU:CA	1:711:A:LEU:C	1:712:A:ALA:N	20	8.35
(1,144)	1:850:A:GLN:N	1:850:A:GLN:CA	1:850:A:GLN:C	1:851:A:CYS:N	14	8.34
(1,130)	1:840:A:LEU:N	1:840:A:LEU:CA	1:840:A:LEU:C	1:841:A:ALA:N	10	8.34
(1,105)	1:825:A:MET:N	1:825:A:MET:CA	1:825:A:MET:C	1:826:A:MET:N	10	8.34
(1,199)	1:895:A:LEU:N	1:895:A:LEU:CA	1:895:A:LEU:C	1:896:A:THR:N	18	8.33
(1,203)	1:899:A:VAL:C	1:900:A:ILE:N	1:900:A:ILE:CA	1:900:A:ILE:C	2	8.31
(1,83)	1:782:A:VAL:C	1:783:A:HIS:N	1:783:A:HIS:CA	1:783:A:HIS:C	15	8.3
(1,62)	1:755:A:LYS:N	1:755:A:LYS:CA	1:755:A:LYS:C	1:756:A:LYS:N	8	8.3
(1,195)	1:891:A:ARG:N	1:891:A:ARG:CA	1:891:A:ARG:C	1:892:A:GLN:N	18	8.28
(1,266)	1:942:A:ARG:N	1:942:A:ARG:CA	1:942:A:ARG:C	1:943:A:VAL:N	16	8.27
(1,250)	1:934:A:GLN:N	1:934:A:GLN:CA	1:934:A:GLN:C	1:935:A:THR:N	15	8.27
(1,240)	1:929:A:LEU:N	1:929:A:LEU:CA	1:929:A:LEU:C	1:930:A:ASP:N	15	8.25
(1,268)	1:943:A:VAL:N	1:943:A:VAL:CA	1:943:A:VAL:C	1:944:A:ARG:N	1	8.24
(1,8)	1:710:A:TRP:N	1:710:A:TRP:CA	1:710:A:TRP:C	1:711:A:LEU:N	15	8.23
(1,130)	1:840:A:LEU:N	1:840:A:LEU:CA	1:840:A:LEU:C	1:841:A:ALA:N	20	8.21
(1,128)	1:839:A:LEU:N	1:839:A:LEU:CA	1:839:A:LEU:C	1:840:A:LEU:N	1	8.21
(1,207)	1:901:A:GLY:C	1:902:A:VAL:N	1:902:A:VAL:CA	1:902:A:VAL:C	15	8.2
(1,228)	1:917:A:SER:N	1:917:A:SER:CA	1:917:A:SER:C	1:918:A:GLY:N	6	8.18
(1,120)	1:835:A:ILE:N	1:835:A:ILE:CA	1:835:A:ILE:C	1:836:A:ASN:N	16	8.18
(1,266)	1:942:A:ARG:N	1:942:A:ARG:CA	1:942:A:ARG:C	1:943:A:VAL:N	14	8.17
(1,99)	1:797:A:ARG:N	1:797:A:ARG:CA	1:797:A:ARG:C	1:798:A:ILE:N	7	8.17
(1,56)	1:748:A:ILE:N	1:748:A:ILE:CA	1:748:A:ILE:C	1:749:A:THR:N	2	8.16
(1,160)	1:859:A:ASP:N	1:859:A:ASP:CA	1:859:A:ASP:C	1:860:A:ALA:N	13	8.15
(1,68)	1:763:A:VAL:N	1:763:A:VAL:CA	1:763:A:VAL:C	1:764:A:THR:N	6	8.13
(1,4)	1:708:A:ARG:N	1:708:A:ARG:CA	1:708:A:ARG:C	1:709:A:CYS:N	12	8.13
(1,1)	1:706:A:GLY:C	1:707:A:LYS:N	1:707:A:LYS:CA	1:707:A:LYS:C	6	8.13
(1,244)	1:931:A:VAL:N	1:931:A:VAL:CA	1:931:A:VAL:C	1:932:A:ILE:N	17	8.12
(1,270)	1:944:A:ARG:N	1:944:A:ARG:CA	1:944:A:ARG:C	1:945:A:LYS:N	11	8.1
(1,181)	1:875:A:ASP:N	1:875:A:ASP:CA	1:875:A:ASP:C	1:876:A:VAL:N	3	8.1
(1,276)	1:947:A:ARG:N	1:947:A:ARG:CA	1:947:A:ARG:C	1:948:A:ASP:N	20	8.08
(1,227)	1:916:A:GLU:C	1:917:A:SER:N	1:917:A:SER:CA	1:917:A:SER:C	10	8.06
(1,216)	1:911:A:LYS:N	1:911:A:LYS:CA	1:911:A:LYS:C	1:912:A:GLN:N	9	8.06
(1,57)	1:748:A:ILE:C	1:749:A:THR:N	1:749:A:THR:CA	1:749:A:THR:C	15	8.06
(1,111)	1:828:A:LEU:N	1:828:A:LEU:CA	1:828:A:LEU:C	1:829:A:VAL:N	2	8.05
(1,238)	1:924:A:SER:N	1:924:A:SER:CA	1:924:A:SER:C	1:925:A:LYS:N	16	8.04
(1,226)	1:916:A:GLU:N	1:916:A:GLU:CA	1:916:A:GLU:C	1:917:A:SER:N	6	8.02
(1,234)	1:922:A:CYS:N	1:922:A:CYS:CA	1:922:A:CYS:C	1:923:A:LEU:N	3	8.01
(1,143)	1:849:A:TYR:C	1:850:A:GLN:N	1:850:A:GLN:CA	1:850:A:GLN:C	16	8.01
(1,143)	1:849:A:TYR:C	1:850:A:GLN:N	1:850:A:GLN:CA	1:850:A:GLN:C	10	7.97
(1,273)	1:945:A:LYS:C	1:946:A:SER:N	1:946:A:SER:CA	1:946:A:SER:C	17	7.96
(1,6)	1:709:A:CYS:N	1:709:A:CYS:CA	1:709:A:CYS:C	1:710:A:TRP:N	4	7.96
(1,110)	1:827:A:ILE:C	1:828:A:LEU:N	1:828:A:LEU:CA	1:828:A:LEU:C	7	7.94
(1,195)	1:891:A:ARG:N	1:891:A:ARG:CA	1:891:A:ARG:C	1:892:A:GLN:N	16	7.93
(1,63)	1:760:A:ARG:C	1:761:A:ALA:N	1:761:A:ALA:CA	1:761:A:ALA:C	10	7.93
(1,238)	1:924:A:SER:N	1:924:A:SER:CA	1:924:A:SER:C	1:925:A:LYS:N	17	7.9

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,228)	1:917:A:SER:N	1:917:A:SER:CA	1:917:A:SER:C	1:918:A:GLY:N	4	7.88
(1,1)	1:706:A:GLY:C	1:707:A:LYS:N	1:707:A:LYS:CA	1:707:A:LYS:C	7	7.88
(1,224)	1:915:A:LEU:N	1:915:A:LEU:CA	1:915:A:LEU:C	1:916:A:GLU:N	18	7.87
(1,128)	1:839:A:LEU:N	1:839:A:LEU:CA	1:839:A:LEU:C	1:840:A:LEU:N	18	7.87
(1,4)	1:708:A:ARG:N	1:708:A:ARG:CA	1:708:A:ARG:C	1:709:A:CYS:N	7	7.87
(1,203)	1:899:A:VAL:C	1:900:A:ILE:N	1:900:A:ILE:CA	1:900:A:ILE:C	9	7.85
(1,181)	1:875:A:ASP:N	1:875:A:ASP:CA	1:875:A:ASP:C	1:876:A:VAL:N	6	7.85
(1,268)	1:943:A:VAL:N	1:943:A:VAL:CA	1:943:A:VAL:C	1:944:A:ARG:N	7	7.84
(1,195)	1:891:A:ARG:N	1:891:A:ARG:CA	1:891:A:ARG:C	1:892:A:GLN:N	20	7.83
(1,117)	1:831:A:ASP:N	1:831:A:ASP:CA	1:831:A:ASP:C	1:832:A:ASP:N	16	7.83
(1,228)	1:917:A:SER:N	1:917:A:SER:CA	1:917:A:SER:C	1:918:A:GLY:N	19	7.8
(1,197)	1:892:A:GLN:N	1:892:A:GLN:CA	1:892:A:GLN:C	1:893:A:LEU:N	17	7.79
(1,229)	1:917:A:SER:C	1:918:A:GLY:N	1:918:A:GLY:CA	1:918:A:GLY:C	16	7.77
(1,34)	1:726:A:LEU:C	1:727:A:GLN:N	1:727:A:GLN:CA	1:727:A:GLN:C	2	7.77
(1,230)	1:918:A:GLY:N	1:918:A:GLY:CA	1:918:A:GLY:C	1:919:A:MET:N	3	7.75
(1,132)	1:841:A:ALA:N	1:841:A:ALA:CA	1:841:A:ALA:C	1:842:A:ASP:N	12	7.75
(1,63)	1:760:A:ARG:C	1:761:A:ALA:N	1:761:A:ALA:CA	1:761:A:ALA:C	1	7.75
(1,5)	1:708:A:ARG:C	1:709:A:CYS:N	1:709:A:CYS:CA	1:709:A:CYS:C	6	7.74
(1,224)	1:915:A:LEU:N	1:915:A:LEU:CA	1:915:A:LEU:C	1:916:A:GLU:N	7	7.73
(1,130)	1:840:A:LEU:N	1:840:A:LEU:CA	1:840:A:LEU:C	1:841:A:ALA:N	14	7.73
(1,36)	1:730:A:GLY:C	1:731:A:ILE:N	1:731:A:ILE:CA	1:731:A:ILE:C	3	7.68
(1,206)	1:901:A:GLY:N	1:901:A:GLY:CA	1:901:A:GLY:C	1:902:A:VAL:N	17	7.67
(1,39)	1:732:A:VAL:N	1:732:A:VAL:CA	1:732:A:VAL:C	1:733:A:VAL:N	12	7.67
(1,34)	1:726:A:LEU:C	1:727:A:GLN:N	1:727:A:GLN:CA	1:727:A:GLN:C	1	7.66
(1,266)	1:942:A:ARG:N	1:942:A:ARG:CA	1:942:A:ARG:C	1:943:A:VAL:N	8	7.65
(1,74)	1:766:A:CYS:N	1:766:A:CYS:CA	1:766:A:CYS:C	1:767:A:ARG:N	10	7.65
(1,260)	1:939:A:TYR:N	1:939:A:TYR:CA	1:939:A:TYR:C	1:940:A:ALA:N	2	7.64
(1,83)	1:782:A:VAL:C	1:783:A:HIS:N	1:783:A:HIS:CA	1:783:A:HIS:C	19	7.62
(1,178)	1:873:A:LEU:C	1:874:A:SER:N	1:874:A:SER:CA	1:874:A:SER:C	17	7.61
(1,145)	1:850:A:GLN:C	1:851:A:CYS:N	1:851:A:CYS:CA	1:851:A:CYS:C	2	7.61
(1,117)	1:831:A:ASP:N	1:831:A:ASP:CA	1:831:A:ASP:C	1:832:A:ASP:N	19	7.61
(1,13)	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:CA	1:716:A:ALA:C	1:717:A:SER:N	4	7.61
(1,128)	1:839:A:LEU:N	1:839:A:LEU:CA	1:839:A:LEU:C	1:840:A:LEU:N	11	7.6
(1,3)	1:707:A:LYS:C	1:708:A:ARG:N	1:708:A:ARG:CA	1:708:A:ARG:C	2	7.59
(1,55)	1:747:A:LEU:C	1:748:A:ILE:N	1:748:A:ILE:CA	1:748:A:ILE:C	16	7.58
(1,128)	1:839:A:LEU:N	1:839:A:LEU:CA	1:839:A:LEU:C	1:840:A:LEU:N	10	7.56
(1,234)	1:922:A:CYS:N	1:922:A:CYS:CA	1:922:A:CYS:C	1:923:A:LEU:N	20	7.54
(1,63)	1:760:A:ARG:C	1:761:A:ALA:N	1:761:A:ALA:CA	1:761:A:ALA:C	8	7.54
(1,63)	1:760:A:ARG:C	1:761:A:ALA:N	1:761:A:ALA:CA	1:761:A:ALA:C	19	7.51
(1,238)	1:924:A:SER:N	1:924:A:SER:CA	1:924:A:SER:C	1:925:A:LYS:N	4	7.49
(1,266)	1:942:A:ARG:N	1:942:A:ARG:CA	1:942:A:ARG:C	1:943:A:VAL:N	12	7.47
(1,201)	1:898:A:PRO:C	1:899:A:VAL:N	1:899:A:VAL:CA	1:899:A:VAL:C	7	7.46
(1,189)	1:888:A:GLN:N	1:888:A:GLN:CA	1:888:A:GLN:C	1:889:A:ARG:N	8	7.46
(1,56)	1:748:A:ILE:N	1:748:A:ILE:CA	1:748:A:ILE:C	1:749:A:THR:N	20	7.46
(1,99)	1:797:A:ARG:N	1:797:A:ARG:CA	1:797:A:ARG:C	1:798:A:ILE:N	2	7.44
(1,268)	1:943:A:VAL:N	1:943:A:VAL:CA	1:943:A:VAL:C	1:944:A:ARG:N	3	7.43
(1,266)	1:942:A:ARG:N	1:942:A:ARG:CA	1:942:A:ARG:C	1:943:A:VAL:N	6	7.43
(1,235)	1:922:A:CYS:C	1:923:A:LEU:N	1:923:A:LEU:CA	1:923:A:LEU:C	18	7.4
(1,200)	1:898:A:PRO:N	1:898:A:PRO:CA	1:898:A:PRO:C	1:899:A:VAL:N	6	7.4
(1,199)	1:895:A:LEU:N	1:895:A:LEU:CA	1:895:A:LEU:C	1:896:A:THR:N	9	7.4
(1,117)	1:831:A:ASP:N	1:831:A:ASP:CA	1:831:A:ASP:C	1:832:A:ASP:N	15	7.4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,260)	1:939:A:TYR:N	1:939:A:TYR:CA	1:939:A:TYR:C	1:940:A:ALA:N	15	7.37
(1,236)	1:923:A:LEU:N	1:923:A:LEU:CA	1:923:A:LEU:C	1:924:A:SER:N	19	7.35
(1,244)	1:931:A:VAL:N	1:931:A:VAL:CA	1:931:A:VAL:C	1:932:A:ILE:N	11	7.34
(1,212)	1:904:A:ALA:N	1:904:A:ALA:CA	1:904:A:ALA:C	1:905:A:ASN:N	15	7.33
(1,195)	1:891:A:ARG:N	1:891:A:ARG:CA	1:891:A:ARG:C	1:892:A:GLN:N	14	7.33
(1,130)	1:840:A:LEU:N	1:840:A:LEU:CA	1:840:A:LEU:C	1:841:A:ALA:N	5	7.32
(1,141)	1:845:A:GLY:C	1:846:A:SER:N	1:846:A:SER:CA	1:846:A:SER:C	8	7.31
(1,130)	1:840:A:LEU:N	1:840:A:LEU:CA	1:840:A:LEU:C	1:841:A:ALA:N	1	7.31
(1,1)	1:706:A:GLY:C	1:707:A:LYS:N	1:707:A:LYS:CA	1:707:A:LYS:C	1	7.3
(1,268)	1:943:A:VAL:N	1:943:A:VAL:CA	1:943:A:VAL:C	1:944:A:ARG:N	4	7.29
(1,189)	1:888:A:GLN:N	1:888:A:GLN:CA	1:888:A:GLN:C	1:889:A:ARG:N	6	7.29
(1,40)	1:732:A:VAL:C	1:733:A:VAL:N	1:733:A:VAL:CA	1:733:A:VAL:C	15	7.29
(1,150)	1:853:A:THR:N	1:853:A:THR:CA	1:853:A:THR:C	1:854:A:ALA:N	2	7.27
(1,266)	1:942:A:ARG:N	1:942:A:ARG:CA	1:942:A:ARG:C	1:943:A:VAL:N	5	7.26
(1,143)	1:849:A:TYR:C	1:850:A:GLN:N	1:850:A:GLN:CA	1:850:A:GLN:C	2	7.26
(1,157)	1:857:A:GLY:C	1:858:A:VAL:N	1:858:A:VAL:CA	1:858:A:VAL:C	2	7.22
(1,85)	1:783:A:HIS:C	1:784:A:SER:N	1:784:A:SER:CA	1:784:A:SER:C	2	7.22
(1,63)	1:760:A:ARG:C	1:761:A:ALA:N	1:761:A:ALA:CA	1:761:A:ALA:C	20	7.2
(1,266)	1:942:A:ARG:N	1:942:A:ARG:CA	1:942:A:ARG:C	1:943:A:VAL:N	4	7.19
(1,87)	1:790:A:GLU:C	1:791:A:LEU:N	1:791:A:LEU:CA	1:791:A:LEU:C	19	7.18
(1,268)	1:943:A:VAL:N	1:943:A:VAL:CA	1:943:A:VAL:C	1:944:A:ARG:N	17	7.17
(1,266)	1:942:A:ARG:N	1:942:A:ARG:CA	1:942:A:ARG:C	1:943:A:VAL:N	3	7.17
(1,150)	1:853:A:THR:N	1:853:A:THR:CA	1:853:A:THR:C	1:854:A:ALA:N	1	7.16
(1,270)	1:944:A:ARG:N	1:944:A:ARG:CA	1:944:A:ARG:C	1:945:A:LYS:N	4	7.15
(1,229)	1:917:A:SER:C	1:918:A:GLY:N	1:918:A:GLY:CA	1:918:A:GLY:C	17	7.15
(1,152)	1:854:A:ALA:N	1:854:A:ALA:CA	1:854:A:ALA:C	1:855:A:ASN:N	18	7.15
(1,129)	1:839:A:LEU:C	1:840:A:LEU:N	1:840:A:LEU:CA	1:840:A:LEU:C	13	7.15
(1,32)	1:725:A:SER:C	1:726:A:LEU:N	1:726:A:LEU:CA	1:726:A:LEU:C	8	7.14
(1,5)	1:708:A:ARG:C	1:709:A:CYS:N	1:709:A:CYS:CA	1:709:A:CYS:C	13	7.14
(1,195)	1:891:A:ARG:N	1:891:A:ARG:CA	1:891:A:ARG:C	1:892:A:GLN:N	2	7.13
(1,224)	1:915:A:LEU:N	1:915:A:LEU:CA	1:915:A:LEU:C	1:916:A:GLU:N	14	7.12
(1,87)	1:790:A:GLU:C	1:791:A:LEU:N	1:791:A:LEU:CA	1:791:A:LEU:C	13	7.12
(1,59)	1:749:A:THR:C	1:750:A:ASP:N	1:750:A:ASP:CA	1:750:A:ASP:C	16	7.12
(1,244)	1:931:A:VAL:N	1:931:A:VAL:CA	1:931:A:VAL:C	1:932:A:ILE:N	4	7.11
(1,268)	1:943:A:VAL:N	1:943:A:VAL:CA	1:943:A:VAL:C	1:944:A:ARG:N	18	7.1
(1,65)	1:761:A:ALA:C	1:762:A:VAL:N	1:762:A:VAL:CA	1:762:A:VAL:C	14	7.1
(1,195)	1:891:A:ARG:N	1:891:A:ARG:CA	1:891:A:ARG:C	1:892:A:GLN:N	10	7.07
(1,87)	1:790:A:GLU:C	1:791:A:LEU:N	1:791:A:LEU:CA	1:791:A:LEU:C	9	7.07
(1,266)	1:942:A:ARG:N	1:942:A:ARG:CA	1:942:A:ARG:C	1:943:A:VAL:N	13	7.06
(1,238)	1:924:A:SER:N	1:924:A:SER:CA	1:924:A:SER:C	1:925:A:LYS:N	20	7.06
(1,202)	1:899:A:VAL:N	1:899:A:VAL:CA	1:899:A:VAL:C	1:900:A:ILE:N	6	7.06
(1,130)	1:840:A:LEU:N	1:840:A:LEU:CA	1:840:A:LEU:C	1:841:A:ALA:N	3	7.05
(1,195)	1:891:A:ARG:N	1:891:A:ARG:CA	1:891:A:ARG:C	1:892:A:GLN:N	19	7.03
(1,266)	1:942:A:ARG:N	1:942:A:ARG:CA	1:942:A:ARG:C	1:943:A:VAL:N	9	7.01
(1,168)	1:863:A:VAL:N	1:863:A:VAL:CA	1:863:A:VAL:C	1:864:A:LEU:N	18	7.01
(1,42)	1:733:A:VAL:C	1:734:A:THR:N	1:734:A:THR:CA	1:734:A:THR:C	6	7.01
(1,72)	1:765:A:PHE:N	1:765:A:PHE:CA	1:765:A:PHE:C	1:766:A:CYS:N	10	7.0
(1,158)	1:858:A:VAL:N	1:858:A:VAL:CA	1:858:A:VAL:C	1:859:A:ASP:N	7	6.98
(1,116)	1:830:A:VAL:C	1:831:A:ASP:N	1:831:A:ASP:CA	1:831:A:ASP:C	6	6.97
(1,104)	1:824:A:ASP:C	1:825:A:MET:N	1:825:A:MET:CA	1:825:A:MET:C	2	6.96
(1,66)	1:762:A:VAL:N	1:762:A:VAL:CA	1:762:A:VAL:C	1:763:A:VAL:N	13	6.96

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,226)	1:916:A:GLU:N	1:916:A:GLU:CA	1:916:A:GLU:C	1:917:A:SER:N	4	6.93
(1,166)	1:862:A:ASN:N	1:862:A:ASN:CA	1:862:A:ASN:C	1:863:A:VAL:N	6	6.93
(1,36)	1:730:A:GLY:C	1:731:A:ILE:N	1:731:A:ILE:CA	1:731:A:ILE:C	10	6.91
(1,222)	1:914:A:CYS:N	1:914:A:CYS:CA	1:914:A:CYS:C	1:915:A:LEU:N	19	6.9
(1,218)	1:912:A:GLN:N	1:912:A:GLN:CA	1:912:A:GLN:C	1:913:A:ARG:N	16	6.9
(1,158)	1:858:A:VAL:N	1:858:A:VAL:CA	1:858:A:VAL:C	1:859:A:ASP:N	11	6.9
(1,266)	1:942:A:ARG:N	1:942:A:ARG:CA	1:942:A:ARG:C	1:943:A:VAL:N	2	6.89
(1,195)	1:891:A:ARG:N	1:891:A:ARG:CA	1:891:A:ARG:C	1:892:A:GLN:N	4	6.89
(1,224)	1:915:A:LEU:N	1:915:A:LEU:CA	1:915:A:LEU:C	1:916:A:GLU:N	8	6.86
(1,105)	1:825:A:MET:N	1:825:A:MET:CA	1:825:A:MET:C	1:826:A:MET:N	1	6.86
(1,118)	1:834:A:PRO:N	1:834:A:PRO:CA	1:834:A:PRO:C	1:835:A:ILE:N	6	6.85
(1,228)	1:917:A:SER:N	1:917:A:SER:CA	1:917:A:SER:C	1:918:A:GLY:N	5	6.82
(1,227)	1:916:A:GLU:C	1:917:A:SER:N	1:917:A:SER:CA	1:917:A:SER:C	9	6.8
(1,168)	1:863:A:VAL:N	1:863:A:VAL:CA	1:863:A:VAL:C	1:864:A:LEU:N	16	6.8
(1,117)	1:831:A:ASP:N	1:831:A:ASP:CA	1:831:A:ASP:C	1:832:A:ASP:N	20	6.8
(1,268)	1:943:A:VAL:N	1:943:A:VAL:CA	1:943:A:VAL:C	1:944:A:ARG:N	6	6.79
(1,232)	1:921:A:SER:N	1:921:A:SER:CA	1:921:A:SER:C	1:922:A:CYS:N	6	6.79
(1,211)	1:903:A:THR:C	1:904:A:ALA:N	1:904:A:ALA:CA	1:904:A:ALA:C	7	6.78
(1,34)	1:726:A:LEU:C	1:727:A:GLN:N	1:727:A:GLN:CA	1:727:A:GLN:C	3	6.77
(1,224)	1:915:A:LEU:N	1:915:A:LEU:CA	1:915:A:LEU:C	1:916:A:GLU:N	17	6.76
(1,7)	1:709:A:CYS:C	1:710:A:TRP:N	1:710:A:TRP:CA	1:710:A:TRP:C	16	6.76
(1,266)	1:942:A:ARG:N	1:942:A:ARG:CA	1:942:A:ARG:C	1:943:A:VAL:N	1	6.75
(1,105)	1:825:A:MET:N	1:825:A:MET:CA	1:825:A:MET:C	1:826:A:MET:N	14	6.75
(1,73)	1:765:A:PHE:C	1:766:A:CYS:N	1:766:A:CYS:CA	1:766:A:CYS:C	6	6.75
(1,65)	1:761:A:ALA:C	1:762:A:VAL:N	1:762:A:VAL:CA	1:762:A:VAL:C	4	6.75
(1,227)	1:916:A:GLU:C	1:917:A:SER:N	1:917:A:SER:CA	1:917:A:SER:C	20	6.74
(1,224)	1:915:A:LEU:N	1:915:A:LEU:CA	1:915:A:LEU:C	1:916:A:GLU:N	19	6.74
(1,132)	1:841:A:ALA:N	1:841:A:ALA:CA	1:841:A:ALA:C	1:842:A:ASP:N	13	6.74
(1,204)	1:900:A:ILE:N	1:900:A:ILE:CA	1:900:A:ILE:C	1:901:A:GLY:N	7	6.73
(1,168)	1:863:A:VAL:N	1:863:A:VAL:CA	1:863:A:VAL:C	1:864:A:LEU:N	11	6.73
(1,1)	1:706:A:GLY:C	1:707:A:LYS:N	1:707:A:LYS:CA	1:707:A:LYS:C	5	6.73
(1,175)	1:872:A:VAL:N	1:872:A:VAL:CA	1:872:A:VAL:C	1:873:A:LEU:N	20	6.71
(1,34)	1:726:A:LEU:C	1:727:A:GLN:N	1:727:A:GLN:CA	1:727:A:GLN:C	4	6.71
(1,168)	1:863:A:VAL:N	1:863:A:VAL:CA	1:863:A:VAL:C	1:864:A:LEU:N	14	6.7
(1,104)	1:824:A:ASP:C	1:825:A:MET:N	1:825:A:MET:CA	1:825:A:MET:C	20	6.7
(1,158)	1:858:A:VAL:N	1:858:A:VAL:CA	1:858:A:VAL:C	1:859:A:ASP:N	4	6.69
(1,236)	1:923:A:LEU:N	1:923:A:LEU:CA	1:923:A:LEU:C	1:924:A:SER:N	18	6.68
(1,235)	1:922:A:CYS:C	1:923:A:LEU:N	1:923:A:LEU:CA	1:923:A:LEU:C	1	6.68
(1,272)	1:945:A:LYS:N	1:945:A:LYS:CA	1:945:A:LYS:C	1:946:A:SER:N	11	6.67
(1,227)	1:916:A:GLU:C	1:917:A:SER:N	1:917:A:SER:CA	1:917:A:SER:C	11	6.67
(1,212)	1:904:A:ALA:N	1:904:A:ALA:CA	1:904:A:ALA:C	1:905:A:ASN:N	5	6.67
(1,229)	1:917:A:SER:C	1:918:A:GLY:N	1:918:A:GLY:CA	1:918:A:GLY:C	10	6.66
(1,158)	1:858:A:VAL:N	1:858:A:VAL:CA	1:858:A:VAL:C	1:859:A:ASP:N	18	6.66
(1,201)	1:898:A:PRO:C	1:899:A:VAL:N	1:899:A:VAL:CA	1:899:A:VAL:C	10	6.64
(1,168)	1:863:A:VAL:N	1:863:A:VAL:CA	1:863:A:VAL:C	1:864:A:LEU:N	8	6.64
(1,115)	1:830:A:VAL:N	1:830:A:VAL:CA	1:830:A:VAL:C	1:831:A:ASP:N	18	6.64
(1,158)	1:858:A:VAL:N	1:858:A:VAL:CA	1:858:A:VAL:C	1:859:A:ASP:N	12	6.63
(1,236)	1:923:A:LEU:N	1:923:A:LEU:CA	1:923:A:LEU:C	1:924:A:SER:N	15	6.62
(1,195)	1:891:A:ARG:N	1:891:A:ARG:CA	1:891:A:ARG:C	1:892:A:GLN:N	17	6.62
(1,228)	1:917:A:SER:N	1:917:A:SER:CA	1:917:A:SER:C	1:918:A:GLY:N	14	6.6
(1,202)	1:899:A:VAL:N	1:899:A:VAL:CA	1:899:A:VAL:C	1:900:A:ILE:N	17	6.6

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,120)	1:835:A:ILE:N	1:835:A:ILE:CA	1:835:A:ILE:C	1:836:A:ASN:N	4	6.6
(1,227)	1:916:A:GLU:C	1:917:A:SER:N	1:917:A:SER:CA	1:917:A:SER:C	16	6.59
(1,217)	1:911:A:LYS:C	1:912:A:GLN:N	1:912:A:GLN:CA	1:912:A:GLN:C	9	6.59
(1,224)	1:915:A:LEU:N	1:915:A:LEU:CA	1:915:A:LEU:C	1:916:A:GLU:N	3	6.57
(1,166)	1:862:A:ASN:N	1:862:A:ASN:CA	1:862:A:ASN:C	1:863:A:VAL:N	19	6.57
(1,268)	1:943:A:VAL:N	1:943:A:VAL:CA	1:943:A:VAL:C	1:944:A:ARG:N	12	6.56
(1,266)	1:942:A:ARG:N	1:942:A:ARG:CA	1:942:A:ARG:C	1:943:A:VAL:N	18	6.56
(1,148)	1:852:A:LYS:N	1:852:A:LYS:CA	1:852:A:LYS:C	1:853:A:THR:N	12	6.56
(1,266)	1:942:A:ARG:N	1:942:A:ARG:CA	1:942:A:ARG:C	1:943:A:VAL:N	11	6.55
(1,75)	1:771:A:GLY:C	1:772:A:ILE:N	1:772:A:ILE:CA	1:772:A:ILE:C	11	6.55
(1,243)	1:930:A:ASP:C	1:931:A:VAL:N	1:931:A:VAL:CA	1:931:A:VAL:C	16	6.54
(1,168)	1:863:A:VAL:N	1:863:A:VAL:CA	1:863:A:VAL:C	1:864:A:LEU:N	5	6.52
(1,168)	1:863:A:VAL:N	1:863:A:VAL:CA	1:863:A:VAL:C	1:864:A:LEU:N	6	6.51
(1,144)	1:850:A:GLN:N	1:850:A:GLN:CA	1:850:A:GLN:C	1:851:A:CYS:N	19	6.51
(1,222)	1:914:A:CYS:N	1:914:A:CYS:CA	1:914:A:CYS:C	1:915:A:LEU:N	9	6.5
(1,266)	1:942:A:ARG:N	1:942:A:ARG:CA	1:942:A:ARG:C	1:943:A:VAL:N	7	6.49
(1,216)	1:911:A:LYS:N	1:911:A:LYS:CA	1:911:A:LYS:C	1:912:A:GLN:N	1	6.49
(1,158)	1:858:A:VAL:N	1:858:A:VAL:CA	1:858:A:VAL:C	1:859:A:ASP:N	13	6.49
(1,189)	1:888:A:GLN:N	1:888:A:GLN:CA	1:888:A:GLN:C	1:889:A:ARG:N	19	6.48
(1,178)	1:873:A:LEU:C	1:874:A:SER:N	1:874:A:SER:CA	1:874:A:SER:C	12	6.48
(1,83)	1:782:A:VAL:C	1:783:A:HIS:N	1:783:A:HIS:CA	1:783:A:HIS:C	1	6.47
(1,34)	1:726:A:LEU:C	1:727:A:GLN:N	1:727:A:GLN:CA	1:727:A:GLN:C	10	6.47
(1,212)	1:904:A:ALA:N	1:904:A:ALA:CA	1:904:A:ALA:C	1:905:A:ASN:N	9	6.46
(1,168)	1:863:A:VAL:N	1:863:A:VAL:CA	1:863:A:VAL:C	1:864:A:LEU:N	15	6.46
(1,158)	1:858:A:VAL:N	1:858:A:VAL:CA	1:858:A:VAL:C	1:859:A:ASP:N	9	6.46
(1,230)	1:918:A:GLY:N	1:918:A:GLY:CA	1:918:A:GLY:C	1:919:A:MET:N	1	6.45
(1,158)	1:858:A:VAL:N	1:858:A:VAL:CA	1:858:A:VAL:C	1:859:A:ASP:N	6	6.44
(1,85)	1:783:A:HIS:C	1:784:A:SER:N	1:784:A:SER:CA	1:784:A:SER:C	10	6.44
(1,87)	1:790:A:GLU:C	1:791:A:LEU:N	1:791:A:LEU:CA	1:791:A:LEU:C	1	6.43
(1,268)	1:943:A:VAL:N	1:943:A:VAL:CA	1:943:A:VAL:C	1:944:A:ARG:N	20	6.42
(1,266)	1:942:A:ARG:N	1:942:A:ARG:CA	1:942:A:ARG:C	1:943:A:VAL:N	20	6.42
(1,136)	1:843:A:GLN:N	1:843:A:GLN:CA	1:843:A:GLN:C	1:844:A:LEU:N	17	6.42
(1,97)	1:796:A:ALA:N	1:796:A:ALA:CA	1:796:A:ALA:C	1:797:A:ARG:N	2	6.42
(1,38)	1:731:A:ILE:C	1:732:A:VAL:N	1:732:A:VAL:CA	1:732:A:VAL:C	11	6.42
(1,6)	1:709:A:CYS:N	1:709:A:CYS:CA	1:709:A:CYS:C	1:710:A:TRP:N	18	6.42
(1,240)	1:929:A:LEU:N	1:929:A:LEU:CA	1:929:A:LEU:C	1:930:A:ASP:N	19	6.41
(1,168)	1:863:A:VAL:N	1:863:A:VAL:CA	1:863:A:VAL:C	1:864:A:LEU:N	2	6.41
(1,60)	1:750:A:ASP:N	1:750:A:ASP:CA	1:750:A:ASP:C	1:751:A:GLU:N	4	6.41
(1,275)	1:946:A:SER:C	1:947:A:ARG:N	1:947:A:ARG:CA	1:947:A:ARG:C	3	6.4
(1,128)	1:839:A:LEU:N	1:839:A:LEU:CA	1:839:A:LEU:C	1:840:A:LEU:N	17	6.4
(1,268)	1:943:A:VAL:N	1:943:A:VAL:CA	1:943:A:VAL:C	1:944:A:ARG:N	14	6.39
(1,229)	1:917:A:SER:C	1:918:A:GLY:N	1:918:A:GLY:CA	1:918:A:GLY:C	9	6.38
(1,129)	1:839:A:LEU:C	1:840:A:LEU:N	1:840:A:LEU:CA	1:840:A:LEU:C	14	6.38
(1,80)	1:781:A:TRP:N	1:781:A:TRP:CA	1:781:A:TRP:C	1:782:A:VAL:N	10	6.38
(1,204)	1:900:A:ILE:N	1:900:A:ILE:CA	1:900:A:ILE:C	1:901:A:GLY:N	6	6.37
(1,201)	1:898:A:PRO:C	1:899:A:VAL:N	1:899:A:VAL:CA	1:899:A:VAL:C	17	6.36
(1,189)	1:888:A:GLN:N	1:888:A:GLN:CA	1:888:A:GLN:C	1:889:A:ARG:N	1	6.36
(1,162)	1:860:A:ALA:N	1:860:A:ALA:CA	1:860:A:ALA:C	1:861:A:LEU:N	11	6.36
(1,194)	1:890:A:ILE:C	1:891:A:ARG:N	1:891:A:ARG:CA	1:891:A:ARG:C	1	6.35
(1,232)	1:921:A:SER:N	1:921:A:SER:CA	1:921:A:SER:C	1:922:A:CYS:N	15	6.34
(1,168)	1:863:A:VAL:N	1:863:A:VAL:CA	1:863:A:VAL:C	1:864:A:LEU:N	4	6.34

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,240)	1:929:A:LEU:N	1:929:A:LEU:CA	1:929:A:LEU:C	1:930:A:ASP:N	6	6.33
(1,204)	1:900:A:ILE:N	1:900:A:ILE:CA	1:900:A:ILE:C	1:901:A:GLY:N	3	6.33
(1,57)	1:748:A:ILE:C	1:749:A:THR:N	1:749:A:THR:CA	1:749:A:THR:C	13	6.32
(1,226)	1:916:A:GLU:N	1:916:A:GLU:CA	1:916:A:GLU:C	1:917:A:SER:N	8	6.31
(1,32)	1:725:A:SER:C	1:726:A:LEU:N	1:726:A:LEU:CA	1:726:A:LEU:C	20	6.31
(1,148)	1:852:A:LYS:N	1:852:A:LYS:CA	1:852:A:LYS:C	1:853:A:THR:N	8	6.3
(1,157)	1:857:A:GLY:C	1:858:A:VAL:N	1:858:A:VAL:CA	1:858:A:VAL:C	14	6.29
(1,226)	1:916:A:GLU:N	1:916:A:GLU:CA	1:916:A:GLU:C	1:917:A:SER:N	12	6.28
(1,126)	1:838:A:ARG:N	1:838:A:ARG:CA	1:838:A:ARG:C	1:839:A:LEU:N	15	6.28
(1,56)	1:748:A:ILE:N	1:748:A:ILE:CA	1:748:A:ILE:C	1:749:A:THR:N	1	6.28
(1,157)	1:857:A:GLY:C	1:858:A:VAL:N	1:858:A:VAL:CA	1:858:A:VAL:C	1	6.27
(1,11)	1:711:A:LEU:C	1:712:A:ALA:N	1:712:A:ALA:CA	1:712:A:ALA:C	12	6.27
(1,129)	1:839:A:LEU:C	1:840:A:LEU:N	1:840:A:LEU:CA	1:840:A:LEU:C	9	6.26
(1,117)	1:831:A:ASP:N	1:831:A:ASP:CA	1:831:A:ASP:C	1:832:A:ASP:N	9	6.26
(1,126)	1:838:A:ARG:N	1:838:A:ARG:CA	1:838:A:ARG:C	1:839:A:LEU:N	1	6.25
(1,268)	1:943:A:VAL:N	1:943:A:VAL:CA	1:943:A:VAL:C	1:944:A:ARG:N	13	6.24
(1,158)	1:858:A:VAL:N	1:858:A:VAL:CA	1:858:A:VAL:C	1:859:A:ASP:N	19	6.24
(1,225)	1:915:A:LEU:C	1:916:A:GLU:N	1:916:A:GLU:CA	1:916:A:GLU:C	7	6.23
(1,224)	1:915:A:LEU:N	1:915:A:LEU:CA	1:915:A:LEU:C	1:916:A:GLU:N	10	6.23
(1,227)	1:916:A:GLU:C	1:917:A:SER:N	1:917:A:SER:CA	1:917:A:SER:C	14	6.22
(1,227)	1:916:A:GLU:C	1:917:A:SER:N	1:917:A:SER:CA	1:917:A:SER:C	17	6.21
(1,162)	1:860:A:ALA:N	1:860:A:ALA:CA	1:860:A:ALA:C	1:861:A:LEU:N	4	6.21
(1,129)	1:839:A:LEU:C	1:840:A:LEU:N	1:840:A:LEU:CA	1:840:A:LEU:C	15	6.21
(1,107)	1:826:A:MET:N	1:826:A:MET:CA	1:826:A:MET:C	1:827:A:ILE:N	14	6.21
(1,34)	1:726:A:LEU:C	1:727:A:GLN:N	1:727:A:GLN:CA	1:727:A:GLN:C	6	6.2
(1,227)	1:916:A:GLU:C	1:917:A:SER:N	1:917:A:SER:CA	1:917:A:SER:C	3	6.19
(1,27)	1:723:A:GLU:N	1:723:A:GLU:CA	1:723:A:GLU:C	1:724:A:THR:N	17	6.19
(1,275)	1:946:A:SER:C	1:947:A:ARG:N	1:947:A:ARG:CA	1:947:A:ARG:C	1	6.18
(1,238)	1:924:A:SER:N	1:924:A:SER:CA	1:924:A:SER:C	1:925:A:LYS:N	1	6.18
(1,206)	1:901:A:GLY:N	1:901:A:GLY:CA	1:901:A:GLY:C	1:902:A:VAL:N	11	6.18
(1,194)	1:890:A:ILE:C	1:891:A:ARG:N	1:891:A:ARG:CA	1:891:A:ARG:C	8	6.18
(1,17)	1:718:A:LEU:N	1:718:A:LEU:CA	1:718:A:LEU:C	1:719:A:CYS:N	9	6.17
(1,227)	1:916:A:GLU:C	1:917:A:SER:N	1:917:A:SER:CA	1:917:A:SER:C	18	6.16
(1,227)	1:916:A:GLU:C	1:917:A:SER:N	1:917:A:SER:CA	1:917:A:SER:C	19	6.15
(1,213)	1:909:A:GLU:C	1:910:A:GLU:N	1:910:A:GLU:CA	1:910:A:GLU:C	1	6.15
(1,143)	1:849:A:TYR:C	1:850:A:GLN:N	1:850:A:GLN:CA	1:850:A:GLN:C	1	6.14
(1,107)	1:826:A:MET:N	1:826:A:MET:CA	1:826:A:MET:C	1:827:A:ILE:N	10	6.14
(1,243)	1:930:A:ASP:C	1:931:A:VAL:N	1:931:A:VAL:CA	1:931:A:VAL:C	10	6.13
(1,205)	1:900:A:ILE:C	1:901:A:GLY:N	1:901:A:GLY:CA	1:901:A:GLY:C	17	6.13
(1,195)	1:891:A:ARG:N	1:891:A:ARG:CA	1:891:A:ARG:C	1:892:A:GLN:N	8	6.12
(1,113)	1:829:A:VAL:N	1:829:A:VAL:CA	1:829:A:VAL:C	1:830:A:VAL:N	4	6.12
(1,272)	1:945:A:LYS:N	1:945:A:LYS:CA	1:945:A:LYS:C	1:946:A:SER:N	14	6.11
(1,236)	1:923:A:LEU:N	1:923:A:LEU:CA	1:923:A:LEU:C	1:924:A:SER:N	20	6.11
(1,184)	1:885:A:ARG:C	1:886:A:LEU:N	1:886:A:LEU:CA	1:886:A:LEU:C	17	6.11
(1,266)	1:942:A:ARG:N	1:942:A:ARG:CA	1:942:A:ARG:C	1:943:A:VAL:N	17	6.09
(1,181)	1:875:A:ASP:N	1:875:A:ASP:CA	1:875:A:ASP:C	1:876:A:VAL:N	1	6.08
(1,268)	1:943:A:VAL:N	1:943:A:VAL:CA	1:943:A:VAL:C	1:944:A:ARG:N	9	6.07
(1,205)	1:900:A:ILE:C	1:901:A:GLY:N	1:901:A:GLY:CA	1:901:A:GLY:C	13	6.06
(1,274)	1:946:A:SER:N	1:946:A:SER:CA	1:946:A:SER:C	1:947:A:ARG:N	11	6.05
(1,240)	1:929:A:LEU:N	1:929:A:LEU:CA	1:929:A:LEU:C	1:930:A:ASP:N	9	6.05
(1,163)	1:860:A:ALA:C	1:861:A:LEU:N	1:861:A:LEU:CA	1:861:A:LEU:C	14	6.05

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,106)	1:825:A:MET:C	1:826:A:MET:N	1:826:A:MET:CA	1:826:A:MET:C	4	6.05
(1,99)	1:797:A:ARG:N	1:797:A:ARG:CA	1:797:A:ARG:C	1:798:A:ILE:N	6	6.05
(1,40)	1:732:A:VAL:C	1:733:A:VAL:N	1:733:A:VAL:CA	1:733:A:VAL:C	18	6.04
(1,214)	1:910:A:GLU:N	1:910:A:GLU:CA	1:910:A:GLU:C	1:911:A:LYS:N	10	6.03
(1,206)	1:901:A:GLY:N	1:901:A:GLY:CA	1:901:A:GLY:C	1:902:A:VAL:N	14	6.03
(1,71)	1:764:A:THR:C	1:765:A:PHE:N	1:765:A:PHE:CA	1:765:A:PHE:C	15	6.02
(1,264)	1:941:A:GLU:N	1:941:A:GLU:CA	1:941:A:GLU:C	1:942:A:ARG:N	11	6.01
(1,241)	1:929:A:LEU:C	1:930:A:ASP:N	1:930:A:ASP:CA	1:930:A:ASP:C	15	6.01
(1,168)	1:863:A:VAL:N	1:863:A:VAL:CA	1:863:A:VAL:C	1:864:A:LEU:N	17	6.01
(1,211)	1:903:A:THR:C	1:904:A:ALA:N	1:904:A:ALA:CA	1:904:A:ALA:C	1	6.0
(1,177)	1:873:A:LEU:N	1:873:A:LEU:CA	1:873:A:LEU:C	1:874:A:SER:N	18	6.0
(1,144)	1:850:A:GLN:N	1:850:A:GLN:CA	1:850:A:GLN:C	1:851:A:CYS:N	11	6.0
(1,189)	1:888:A:GLN:N	1:888:A:GLN:CA	1:888:A:GLN:C	1:889:A:ARG:N	17	5.99
(1,176)	1:872:A:VAL:C	1:873:A:LEU:N	1:873:A:LEU:CA	1:873:A:LEU:C	4	5.99
(1,244)	1:931:A:VAL:N	1:931:A:VAL:CA	1:931:A:VAL:C	1:932:A:ILE:N	5	5.98
(1,168)	1:863:A:VAL:N	1:863:A:VAL:CA	1:863:A:VAL:C	1:864:A:LEU:N	20	5.98
(1,129)	1:839:A:LEU:C	1:840:A:LEU:N	1:840:A:LEU:CA	1:840:A:LEU:C	5	5.95
(1,126)	1:838:A:ARG:N	1:838:A:ARG:CA	1:838:A:ARG:C	1:839:A:LEU:N	7	5.95
(1,212)	1:904:A:ALA:N	1:904:A:ALA:CA	1:904:A:ALA:C	1:905:A:ASN:N	19	5.94
(1,240)	1:929:A:LEU:N	1:929:A:LEU:CA	1:929:A:LEU:C	1:930:A:ASP:N	20	5.93
(1,260)	1:939:A:TYR:N	1:939:A:TYR:CA	1:939:A:TYR:C	1:940:A:ALA:N	20	5.91
(1,157)	1:857:A:GLY:C	1:858:A:VAL:N	1:858:A:VAL:CA	1:858:A:VAL:C	5	5.91
(1,264)	1:941:A:GLU:N	1:941:A:GLU:CA	1:941:A:GLU:C	1:942:A:ARG:N	9	5.9
(1,105)	1:825:A:MET:N	1:825:A:MET:CA	1:825:A:MET:C	1:826:A:MET:N	5	5.9
(1,46)	1:741:A:PRO:N	1:741:A:PRO:CA	1:741:A:PRO:C	1:742:A:THR:N	16	5.9
(1,11)	1:711:A:LEU:C	1:712:A:ALA:N	1:712:A:ALA:CA	1:712:A:ALA:C	1	5.9
(1,229)	1:917:A:SER:C	1:918:A:GLY:N	1:918:A:GLY:CA	1:918:A:GLY:C	8	5.89
(1,183)	1:885:A:ARG:N	1:885:A:ARG:CA	1:885:A:ARG:C	1:886:A:LEU:N	8	5.89
(1,266)	1:942:A:ARG:N	1:942:A:ARG:CA	1:942:A:ARG:C	1:943:A:VAL:N	19	5.88
(1,158)	1:858:A:VAL:N	1:858:A:VAL:CA	1:858:A:VAL:C	1:859:A:ASP:N	15	5.88
(1,126)	1:838:A:ARG:N	1:838:A:ARG:CA	1:838:A:ARG:C	1:839:A:LEU:N	10	5.87
(1,181)	1:875:A:ASP:N	1:875:A:ASP:CA	1:875:A:ASP:C	1:876:A:VAL:N	8	5.86
(1,101)	1:798:A:ILE:N	1:798:A:ILE:CA	1:798:A:ILE:C	1:799:A:TYR:N	8	5.85
(1,240)	1:929:A:LEU:N	1:929:A:LEU:CA	1:929:A:LEU:C	1:930:A:ASP:N	17	5.84
(1,191)	1:889:A:ARG:N	1:889:A:ARG:CA	1:889:A:ARG:C	1:890:A:ILE:N	8	5.83
(1,194)	1:890:A:ILE:C	1:891:A:ARG:N	1:891:A:ARG:CA	1:891:A:ARG:C	2	5.82
(1,128)	1:839:A:LEU:N	1:839:A:LEU:CA	1:839:A:LEU:C	1:840:A:LEU:N	2	5.82
(1,29)	1:724:A:THR:N	1:724:A:THR:CA	1:724:A:THR:C	1:725:A:SER:N	2	5.82
(1,4)	1:708:A:ARG:N	1:708:A:ARG:CA	1:708:A:ARG:C	1:709:A:CYS:N	10	5.82
(1,193)	1:890:A:ILE:N	1:890:A:ILE:CA	1:890:A:ILE:C	1:891:A:ARG:N	18	5.81
(1,85)	1:783:A:HIS:C	1:784:A:SER:N	1:784:A:SER:CA	1:784:A:SER:C	7	5.81
(1,235)	1:922:A:CYS:C	1:923:A:LEU:N	1:923:A:LEU:CA	1:923:A:LEU:C	19	5.8
(1,29)	1:724:A:THR:N	1:724:A:THR:CA	1:724:A:THR:C	1:725:A:SER:N	6	5.8
(1,260)	1:939:A:TYR:N	1:939:A:TYR:CA	1:939:A:TYR:C	1:940:A:ALA:N	11	5.79
(1,168)	1:863:A:VAL:N	1:863:A:VAL:CA	1:863:A:VAL:C	1:864:A:LEU:N	10	5.79
(1,7)	1:709:A:CYS:C	1:710:A:TRP:N	1:710:A:TRP:CA	1:710:A:TRP:C	14	5.79
(1,129)	1:839:A:LEU:C	1:840:A:LEU:N	1:840:A:LEU:CA	1:840:A:LEU:C	3	5.78
(1,99)	1:797:A:ARG:N	1:797:A:ARG:CA	1:797:A:ARG:C	1:798:A:ILE:N	20	5.78
(1,5)	1:708:A:ARG:C	1:709:A:CYS:N	1:709:A:CYS:CA	1:709:A:CYS:C	3	5.78
(1,4)	1:708:A:ARG:N	1:708:A:ARG:CA	1:708:A:ARG:C	1:709:A:CYS:N	8	5.78
(1,110)	1:827:A:ILE:C	1:828:A:LEU:N	1:828:A:LEU:CA	1:828:A:LEU:C	20	5.77

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,177)	1:873:A:LEU:N	1:873:A:LEU:CA	1:873:A:LEU:C	1:874:A:SER:N	3	5.76
(1,166)	1:862:A:ASN:N	1:862:A:ASN:CA	1:862:A:ASN:C	1:863:A:VAL:N	10	5.76
(1,240)	1:929:A:LEU:N	1:929:A:LEU:CA	1:929:A:LEU:C	1:930:A:ASP:N	14	5.75
(1,195)	1:891:A:ARG:N	1:891:A:ARG:CA	1:891:A:ARG:C	1:892:A:GLN:N	9	5.74
(1,168)	1:863:A:VAL:N	1:863:A:VAL:CA	1:863:A:VAL:C	1:864:A:LEU:N	3	5.74
(1,236)	1:923:A:LEU:N	1:923:A:LEU:CA	1:923:A:LEU:C	1:924:A:SER:N	5	5.73
(1,183)	1:885:A:ARG:N	1:885:A:ARG:CA	1:885:A:ARG:C	1:886:A:LEU:N	12	5.73
(1,163)	1:860:A:ALA:C	1:861:A:LEU:N	1:861:A:LEU:CA	1:861:A:LEU:C	16	5.73
(1,157)	1:857:A:GLY:C	1:858:A:VAL:N	1:858:A:VAL:CA	1:858:A:VAL:C	4	5.73
(1,227)	1:916:A:GLU:C	1:917:A:SER:N	1:917:A:SER:CA	1:917:A:SER:C	7	5.72
(1,158)	1:858:A:VAL:N	1:858:A:VAL:CA	1:858:A:VAL:C	1:859:A:ASP:N	3	5.72
(1,37)	1:731:A:ILE:N	1:731:A:ILE:CA	1:731:A:ILE:C	1:732:A:VAL:N	14	5.72
(1,218)	1:912:A:GLN:N	1:912:A:GLN:CA	1:912:A:GLN:C	1:913:A:ARG:N	12	5.71
(1,157)	1:857:A:GLY:C	1:858:A:VAL:N	1:858:A:VAL:CA	1:858:A:VAL:C	9	5.71
(1,227)	1:916:A:GLU:C	1:917:A:SER:N	1:917:A:SER:CA	1:917:A:SER:C	1	5.7
(1,157)	1:857:A:GLY:C	1:858:A:VAL:N	1:858:A:VAL:CA	1:858:A:VAL:C	10	5.7
(1,194)	1:890:A:ILE:C	1:891:A:ARG:N	1:891:A:ARG:CA	1:891:A:ARG:C	14	5.69
(1,138)	1:844:A:LEU:N	1:844:A:LEU:CA	1:844:A:LEU:C	1:845:A:GLY:N	3	5.69
(1,260)	1:939:A:TYR:N	1:939:A:TYR:CA	1:939:A:TYR:C	1:940:A:ALA:N	17	5.67
(1,234)	1:922:A:CYS:N	1:922:A:CYS:CA	1:922:A:CYS:C	1:923:A:LEU:N	9	5.67
(1,183)	1:885:A:ARG:N	1:885:A:ARG:CA	1:885:A:ARG:C	1:886:A:LEU:N	7	5.67
(1,111)	1:828:A:LEU:N	1:828:A:LEU:CA	1:828:A:LEU:C	1:829:A:VAL:N	4	5.67
(1,168)	1:863:A:VAL:N	1:863:A:VAL:CA	1:863:A:VAL:C	1:864:A:LEU:N	7	5.66
(1,68)	1:763:A:VAL:N	1:763:A:VAL:CA	1:763:A:VAL:C	1:764:A:THR:N	2	5.66
(1,63)	1:760:A:ARG:C	1:761:A:ALA:N	1:761:A:ALA:CA	1:761:A:ALA:C	17	5.66
(1,183)	1:885:A:ARG:N	1:885:A:ARG:CA	1:885:A:ARG:C	1:886:A:LEU:N	19	5.65
(1,140)	1:845:A:GLY:N	1:845:A:GLY:CA	1:845:A:GLY:C	1:846:A:SER:N	1	5.64
(1,129)	1:839:A:LEU:C	1:840:A:LEU:N	1:840:A:LEU:CA	1:840:A:LEU:C	4	5.64
(1,113)	1:829:A:VAL:N	1:829:A:VAL:CA	1:829:A:VAL:C	1:830:A:VAL:N	8	5.62
(1,116)	1:830:A:VAL:C	1:831:A:ASP:N	1:831:A:ASP:CA	1:831:A:ASP:C	10	5.61
(1,115)	1:830:A:VAL:N	1:830:A:VAL:CA	1:830:A:VAL:C	1:831:A:ASP:N	4	5.61
(1,58)	1:749:A:THR:N	1:749:A:THR:CA	1:749:A:THR:C	1:750:A:ASP:N	1	5.61
(1,171)	1:864:A:LEU:C	1:865:A:SER:N	1:865:A:SER:CA	1:865:A:SER:C	8	5.59
(1,15)	1:717:A:SER:N	1:717:A:SER:CA	1:717:A:SER:C	1:718:A:LEU:N	4	5.58
(1,194)	1:890:A:ILE:C	1:891:A:ARG:N	1:891:A:ARG:CA	1:891:A:ARG:C	9	5.57
(1,93)	1:794:A:LEU:N	1:794:A:LEU:CA	1:794:A:LEU:C	1:795:A:LEU:N	6	5.57
(1,168)	1:863:A:VAL:N	1:863:A:VAL:CA	1:863:A:VAL:C	1:864:A:LEU:N	19	5.55
(1,17)	1:718:A:LEU:N	1:718:A:LEU:CA	1:718:A:LEU:C	1:719:A:CYS:N	8	5.55
(1,157)	1:857:A:GLY:C	1:858:A:VAL:N	1:858:A:VAL:CA	1:858:A:VAL:C	3	5.53
(1,3)	1:707:A:LYS:C	1:708:A:ARG:N	1:708:A:ARG:CA	1:708:A:ARG:C	9	5.53
(1,225)	1:915:A:LEU:C	1:916:A:GLU:N	1:916:A:GLU:CA	1:916:A:GLU:C	19	5.52
(1,182)	1:884:A:TYR:C	1:885:A:ARG:N	1:885:A:ARG:CA	1:885:A:ARG:C	4	5.49
(1,27)	1:723:A:GLU:N	1:723:A:GLU:CA	1:723:A:GLU:C	1:724:A:THR:N	3	5.47
(1,5)	1:708:A:ARG:C	1:709:A:CYS:N	1:709:A:CYS:CA	1:709:A:CYS:C	12	5.47
(1,125)	1:837:A:ARG:C	1:838:A:ARG:N	1:838:A:ARG:CA	1:838:A:ARG:C	19	5.46
(1,240)	1:929:A:LEU:N	1:929:A:LEU:CA	1:929:A:LEU:C	1:930:A:ASP:N	7	5.45
(1,227)	1:916:A:GLU:C	1:917:A:SER:N	1:917:A:SER:CA	1:917:A:SER:C	2	5.45
(1,227)	1:916:A:GLU:C	1:917:A:SER:N	1:917:A:SER:CA	1:917:A:SER:C	15	5.45
(1,194)	1:890:A:ILE:C	1:891:A:ARG:N	1:891:A:ARG:CA	1:891:A:ARG:C	12	5.45
(1,130)	1:840:A:LEU:N	1:840:A:LEU:CA	1:840:A:LEU:C	1:841:A:ALA:N	15	5.45
(1,52)	1:746:A:VAL:N	1:746:A:VAL:CA	1:746:A:VAL:C	1:747:A:LEU:N	9	5.44

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,115)	1:830:A:VAL:N	1:830:A:VAL:CA	1:830:A:VAL:C	1:831:A:ASP:N	15	5.43
(1,28)	1:723:A:GLU:C	1:724:A:THR:N	1:724:A:THR:CA	1:724:A:THR:C	20	5.43
(1,204)	1:900:A:ILE:N	1:900:A:ILE:CA	1:900:A:ILE:C	1:901:A:GLY:N	2	5.42
(1,85)	1:783:A:HIS:C	1:784:A:SER:N	1:784:A:SER:CA	1:784:A:SER:C	9	5.42
(1,32)	1:725:A:SER:C	1:726:A:LEU:N	1:726:A:LEU:CA	1:726:A:LEU:C	6	5.42
(1,157)	1:857:A:GLY:C	1:858:A:VAL:N	1:858:A:VAL:CA	1:858:A:VAL:C	6	5.41
(1,146)	1:851:A:CYS:N	1:851:A:CYS:CA	1:851:A:CYS:C	1:852:A:LYS:N	20	5.41
(1,115)	1:830:A:VAL:N	1:830:A:VAL:CA	1:830:A:VAL:C	1:831:A:ASP:N	12	5.41
(1,228)	1:917:A:SER:N	1:917:A:SER:CA	1:917:A:SER:C	1:918:A:GLY:N	7	5.4
(1,194)	1:890:A:ILE:C	1:891:A:ARG:N	1:891:A:ARG:CA	1:891:A:ARG:C	7	5.4
(1,150)	1:853:A:THR:N	1:853:A:THR:CA	1:853:A:THR:C	1:854:A:ALA:N	20	5.4
(1,130)	1:840:A:LEU:N	1:840:A:LEU:CA	1:840:A:LEU:C	1:841:A:ALA:N	17	5.4
(1,126)	1:838:A:ARG:N	1:838:A:ARG:CA	1:838:A:ARG:C	1:839:A:LEU:N	17	5.4
(1,194)	1:890:A:ILE:C	1:891:A:ARG:N	1:891:A:ARG:CA	1:891:A:ARG:C	3	5.39
(1,126)	1:838:A:ARG:N	1:838:A:ARG:CA	1:838:A:ARG:C	1:839:A:LEU:N	18	5.39
(1,240)	1:929:A:LEU:N	1:929:A:LEU:CA	1:929:A:LEU:C	1:930:A:ASP:N	5	5.38
(1,227)	1:916:A:GLU:C	1:917:A:SER:N	1:917:A:SER:CA	1:917:A:SER:C	12	5.38
(1,138)	1:844:A:LEU:N	1:844:A:LEU:CA	1:844:A:LEU:C	1:845:A:GLY:N	17	5.38
(1,240)	1:929:A:LEU:N	1:929:A:LEU:CA	1:929:A:LEU:C	1:930:A:ASP:N	1	5.36
(1,144)	1:850:A:GLN:N	1:850:A:GLN:CA	1:850:A:GLN:C	1:851:A:CYS:N	7	5.36
(1,129)	1:839:A:LEU:C	1:840:A:LEU:N	1:840:A:LEU:CA	1:840:A:LEU:C	6	5.36
(1,71)	1:764:A:THR:C	1:765:A:PHE:N	1:765:A:PHE:CA	1:765:A:PHE:C	6	5.36
(1,9)	1:710:A:TRP:C	1:711:A:LEU:N	1:711:A:LEU:CA	1:711:A:LEU:C	20	5.36
(1,237)	1:923:A:LEU:C	1:924:A:SER:N	1:924:A:SER:CA	1:924:A:SER:C	7	5.34
(1,206)	1:901:A:GLY:N	1:901:A:GLY:CA	1:901:A:GLY:C	1:902:A:VAL:N	9	5.34
(1,194)	1:890:A:ILE:C	1:891:A:ARG:N	1:891:A:ARG:CA	1:891:A:ARG:C	4	5.32
(1,183)	1:885:A:ARG:N	1:885:A:ARG:CA	1:885:A:ARG:C	1:886:A:LEU:N	6	5.32
(1,194)	1:890:A:ILE:C	1:891:A:ARG:N	1:891:A:ARG:CA	1:891:A:ARG:C	6	5.31
(1,194)	1:890:A:ILE:C	1:891:A:ARG:N	1:891:A:ARG:CA	1:891:A:ARG:C	17	5.31
(1,168)	1:863:A:VAL:N	1:863:A:VAL:CA	1:863:A:VAL:C	1:864:A:LEU:N	9	5.31
(1,163)	1:860:A:ALA:C	1:861:A:LEU:N	1:861:A:LEU:CA	1:861:A:LEU:C	15	5.31
(1,143)	1:849:A:TYR:C	1:850:A:GLN:N	1:850:A:GLN:CA	1:850:A:GLN:C	5	5.31
(1,193)	1:890:A:ILE:N	1:890:A:ILE:CA	1:890:A:ILE:C	1:891:A:ARG:N	13	5.3
(1,124)	1:837:A:ARG:N	1:837:A:ARG:CA	1:837:A:ARG:C	1:838:A:ARG:N	13	5.3
(1,168)	1:863:A:VAL:N	1:863:A:VAL:CA	1:863:A:VAL:C	1:864:A:LEU:N	13	5.29
(1,123)	1:836:A:ASN:C	1:837:A:ARG:N	1:837:A:ARG:CA	1:837:A:ARG:C	18	5.28
(1,27)	1:723:A:GLU:N	1:723:A:GLU:CA	1:723:A:GLU:C	1:724:A:THR:N	15	5.26
(1,61)	1:754:A:SER:C	1:755:A:LYS:N	1:755:A:LYS:CA	1:755:A:LYS:C	17	5.25
(1,272)	1:945:A:LYS:N	1:945:A:LYS:CA	1:945:A:LYS:C	1:946:A:SER:N	18	5.24
(1,227)	1:916:A:GLU:C	1:917:A:SER:N	1:917:A:SER:CA	1:917:A:SER:C	4	5.24
(1,221)	1:913:A:ARG:C	1:914:A:CYS:N	1:914:A:CYS:CA	1:914:A:CYS:C	16	5.24
(1,93)	1:794:A:LEU:N	1:794:A:LEU:CA	1:794:A:LEU:C	1:795:A:LEU:N	17	5.24
(1,244)	1:931:A:VAL:N	1:931:A:VAL:CA	1:931:A:VAL:C	1:932:A:ILE:N	9	5.23
(1,210)	1:903:A:THR:N	1:903:A:THR:CA	1:903:A:THR:C	1:904:A:ALA:N	11	5.23
(1,157)	1:857:A:GLY:C	1:858:A:VAL:N	1:858:A:VAL:CA	1:858:A:VAL:C	19	5.23
(1,185)	1:886:A:LEU:N	1:886:A:LEU:CA	1:886:A:LEU:C	1:887:A:THR:N	1	5.22
(1,17)	1:718:A:LEU:N	1:718:A:LEU:CA	1:718:A:LEU:C	1:719:A:CYS:N	12	5.22
(1,197)	1:892:A:GLN:N	1:892:A:GLN:CA	1:892:A:GLN:C	1:893:A:LEU:N	16	5.21
(1,85)	1:783:A:HIS:C	1:784:A:SER:N	1:784:A:SER:CA	1:784:A:SER:C	11	5.21
(1,183)	1:885:A:ARG:N	1:885:A:ARG:CA	1:885:A:ARG:C	1:886:A:LEU:N	13	5.2
(1,90)	1:792:A:PRO:C	1:793:A:ALA:N	1:793:A:ALA:CA	1:793:A:ALA:C	3	5.19

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,138)	1:844:A:LEU:N	1:844:A:LEU:CA	1:844:A:LEU:C	1:845:A:GLY:N	7	5.18
(1,248)	1:933:A:LYS:N	1:933:A:LYS:CA	1:933:A:LYS:C	1:934:A:GLN:N	5	5.17
(1,225)	1:915:A:LEU:C	1:916:A:GLU:N	1:916:A:GLU:CA	1:916:A:GLU:C	18	5.17
(1,194)	1:890:A:ILE:C	1:891:A:ARG:N	1:891:A:ARG:CA	1:891:A:ARG:C	16	5.17
(1,71)	1:764:A:THR:C	1:765:A:PHE:N	1:765:A:PHE:CA	1:765:A:PHE:C	1	5.17
(1,228)	1:917:A:SER:N	1:917:A:SER:CA	1:917:A:SER:C	1:918:A:GLY:N	2	5.16
(1,208)	1:902:A:VAL:N	1:902:A:VAL:CA	1:902:A:VAL:C	1:903:A:THR:N	13	5.16
(1,166)	1:862:A:ASN:N	1:862:A:ASN:CA	1:862:A:ASN:C	1:863:A:VAL:N	13	5.16
(1,157)	1:857:A:GLY:C	1:858:A:VAL:N	1:858:A:VAL:CA	1:858:A:VAL:C	17	5.16
(1,6)	1:709:A:CYS:N	1:709:A:CYS:CA	1:709:A:CYS:C	1:710:A:TRP:N	8	5.16
(1,207)	1:901:A:GLY:C	1:902:A:VAL:N	1:902:A:VAL:CA	1:902:A:VAL:C	7	5.14
(1,163)	1:860:A:ALA:C	1:861:A:LEU:N	1:861:A:LEU:CA	1:861:A:LEU:C	10	5.14
(1,268)	1:943:A:VAL:N	1:943:A:VAL:CA	1:943:A:VAL:C	1:944:A:ARG:N	15	5.13
(1,93)	1:794:A:LEU:N	1:794:A:LEU:CA	1:794:A:LEU:C	1:795:A:LEU:N	18	5.13
(1,56)	1:748:A:ILE:N	1:748:A:ILE:CA	1:748:A:ILE:C	1:749:A:THR:N	10	5.11
(1,6)	1:709:A:CYS:N	1:709:A:CYS:CA	1:709:A:CYS:C	1:710:A:TRP:N	19	5.11
(1,228)	1:917:A:SER:N	1:917:A:SER:CA	1:917:A:SER:C	1:918:A:GLY:N	15	5.1
(1,123)	1:836:A:ASN:C	1:837:A:ARG:N	1:837:A:ARG:CA	1:837:A:ARG:C	20	5.1
(1,157)	1:857:A:GLY:C	1:858:A:VAL:N	1:858:A:VAL:CA	1:858:A:VAL:C	12	5.09
(1,114)	1:829:A:VAL:C	1:830:A:VAL:N	1:830:A:VAL:CA	1:830:A:VAL:C	17	5.09
(1,19)	1:719:A:CYS:N	1:719:A:CYS:CA	1:719:A:CYS:C	1:720:A:GLN:N	10	5.08
(1,200)	1:898:A:PRO:N	1:898:A:PRO:CA	1:898:A:PRO:C	1:899:A:VAL:N	11	5.07
(1,118)	1:834:A:PRO:N	1:834:A:PRO:CA	1:834:A:PRO:C	1:835:A:ILE:N	3	5.07
(1,84)	1:783:A:HIS:N	1:783:A:HIS:CA	1:783:A:HIS:C	1:784:A:SER:N	10	5.07
(1,73)	1:765:A:PHE:C	1:766:A:CYS:N	1:766:A:CYS:CA	1:766:A:CYS:C	11	5.07
(1,227)	1:916:A:GLU:C	1:917:A:SER:N	1:917:A:SER:CA	1:917:A:SER:C	13	5.06
(1,222)	1:914:A:CYS:N	1:914:A:CYS:CA	1:914:A:CYS:C	1:915:A:LEU:N	12	5.06
(1,17)	1:718:A:LEU:N	1:718:A:LEU:CA	1:718:A:LEU:C	1:719:A:CYS:N	17	5.06
(1,248)	1:933:A:LYS:N	1:933:A:LYS:CA	1:933:A:LYS:C	1:934:A:GLN:N	10	5.05
(1,160)	1:859:A:ASP:N	1:859:A:ASP:CA	1:859:A:ASP:C	1:860:A:ALA:N	14	5.05
(1,63)	1:760:A:ARG:C	1:761:A:ALA:N	1:761:A:ALA:CA	1:761:A:ALA:C	6	5.04
(1,92)	1:793:A:ALA:C	1:794:A:LEU:N	1:794:A:LEU:CA	1:794:A:LEU:C	18	5.03
(1,71)	1:764:A:THR:C	1:765:A:PHE:N	1:765:A:PHE:CA	1:765:A:PHE:C	4	5.02
(1,68)	1:763:A:VAL:N	1:763:A:VAL:CA	1:763:A:VAL:C	1:764:A:THR:N	5	5.01
(1,129)	1:839:A:LEU:C	1:840:A:LEU:N	1:840:A:LEU:CA	1:840:A:LEU:C	11	4.99
(1,125)	1:837:A:ARG:C	1:838:A:ARG:N	1:838:A:ARG:CA	1:838:A:ARG:C	15	4.99
(1,224)	1:915:A:LEU:N	1:915:A:LEU:CA	1:915:A:LEU:C	1:916:A:GLU:N	20	4.98
(1,250)	1:934:A:GLN:N	1:934:A:GLN:CA	1:934:A:GLN:C	1:935:A:THR:N	3	4.97
(1,227)	1:916:A:GLU:C	1:917:A:SER:N	1:917:A:SER:CA	1:917:A:SER:C	8	4.96
(1,130)	1:840:A:LEU:N	1:840:A:LEU:CA	1:840:A:LEU:C	1:841:A:ALA:N	13	4.96
(1,225)	1:915:A:LEU:C	1:916:A:GLU:N	1:916:A:GLU:CA	1:916:A:GLU:C	15	4.95
(1,166)	1:862:A:ASN:N	1:862:A:ASN:CA	1:862:A:ASN:C	1:863:A:VAL:N	8	4.95
(1,34)	1:726:A:LEU:C	1:727:A:GLN:N	1:727:A:GLN:CA	1:727:A:GLN:C	19	4.95
(1,123)	1:836:A:ASN:C	1:837:A:ARG:N	1:837:A:ARG:CA	1:837:A:ARG:C	13	4.94
(1,87)	1:790:A:GLU:C	1:791:A:LEU:N	1:791:A:LEU:CA	1:791:A:LEU:C	5	4.93
(1,248)	1:933:A:LYS:N	1:933:A:LYS:CA	1:933:A:LYS:C	1:934:A:GLN:N	2	4.9
(1,76)	1:772:A:ILE:N	1:772:A:ILE:CA	1:772:A:ILE:C	1:773:A:PRO:N	15	4.9
(1,222)	1:914:A:CYS:N	1:914:A:CYS:CA	1:914:A:CYS:C	1:915:A:LEU:N	20	4.89
(1,183)	1:885:A:ARG:N	1:885:A:ARG:CA	1:885:A:ARG:C	1:886:A:LEU:N	16	4.88
(1,166)	1:862:A:ASN:N	1:862:A:ASN:CA	1:862:A:ASN:C	1:863:A:VAL:N	2	4.88
(1,63)	1:760:A:ARG:C	1:761:A:ALA:N	1:761:A:ALA:CA	1:761:A:ALA:C	2	4.86

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,225)	1:915:A:LEU:C	1:916:A:GLU:N	1:916:A:GLU:CA	1:916:A:GLU:C	9	4.85
(1,169)	1:863:A:VAL:C	1:864:A:LEU:N	1:864:A:LEU:CA	1:864:A:LEU:C	12	4.85
(1,8)	1:710:A:TRP:N	1:710:A:TRP:CA	1:710:A:TRP:C	1:711:A:LEU:N	19	4.84
(1,235)	1:922:A:CYS:C	1:923:A:LEU:N	1:923:A:LEU:CA	1:923:A:LEU:C	12	4.82
(1,209)	1:902:A:VAL:C	1:903:A:THR:N	1:903:A:THR:CA	1:903:A:THR:C	9	4.82
(1,205)	1:900:A:ILE:C	1:901:A:GLY:N	1:901:A:GLY:CA	1:901:A:GLY:C	2	4.81
(1,17)	1:718:A:LEU:N	1:718:A:LEU:CA	1:718:A:LEU:C	1:719:A:CYS:N	15	4.81
(1,182)	1:884:A:TYR:C	1:885:A:ARG:N	1:885:A:ARG:CA	1:885:A:ARG:C	3	4.8
(1,136)	1:843:A:GLN:N	1:843:A:GLN:CA	1:843:A:GLN:C	1:844:A:LEU:N	11	4.8
(1,128)	1:839:A:LEU:N	1:839:A:LEU:CA	1:839:A:LEU:C	1:840:A:LEU:N	8	4.8
(1,103)	1:799:A:TYR:N	1:799:A:TYR:CA	1:799:A:TYR:C	1:800:A:LEU:N	3	4.8
(1,248)	1:933:A:LYS:N	1:933:A:LYS:CA	1:933:A:LYS:C	1:934:A:GLN:N	9	4.79
(1,121)	1:835:A:ILE:C	1:836:A:ASN:N	1:836:A:ASN:CA	1:836:A:ASN:C	15	4.79
(1,40)	1:732:A:VAL:C	1:733:A:VAL:N	1:733:A:VAL:CA	1:733:A:VAL:C	12	4.78
(1,25)	1:722:A:LEU:N	1:722:A:LEU:CA	1:722:A:LEU:C	1:723:A:GLU:N	8	4.78
(1,244)	1:931:A:VAL:N	1:931:A:VAL:CA	1:931:A:VAL:C	1:932:A:ILE:N	19	4.77
(1,166)	1:862:A:ASN:N	1:862:A:ASN:CA	1:862:A:ASN:C	1:863:A:VAL:N	1	4.77
(1,5)	1:708:A:ARG:C	1:709:A:CYS:N	1:709:A:CYS:CA	1:709:A:CYS:C	15	4.77
(1,137)	1:843:A:GLN:C	1:844:A:LEU:N	1:844:A:LEU:CA	1:844:A:LEU:C	14	4.76
(1,238)	1:924:A:SER:N	1:924:A:SER:CA	1:924:A:SER:C	1:925:A:LYS:N	5	4.75
(1,274)	1:946:A:SER:N	1:946:A:SER:CA	1:946:A:SER:C	1:947:A:ARG:N	5	4.74
(1,220)	1:913:A:ARG:N	1:913:A:ARG:CA	1:913:A:ARG:C	1:914:A:CYS:N	1	4.74
(1,17)	1:718:A:LEU:N	1:718:A:LEU:CA	1:718:A:LEU:C	1:719:A:CYS:N	13	4.74
(1,271)	1:944:A:ARG:C	1:945:A:LYS:N	1:945:A:LYS:CA	1:945:A:LYS:C	9	4.73
(1,209)	1:902:A:VAL:C	1:903:A:THR:N	1:903:A:THR:CA	1:903:A:THR:C	19	4.73
(1,239)	1:928:A:THR:C	1:929:A:LEU:N	1:929:A:LEU:CA	1:929:A:LEU:C	17	4.71
(1,225)	1:915:A:LEU:C	1:916:A:GLU:N	1:916:A:GLU:CA	1:916:A:GLU:C	5	4.71
(1,223)	1:914:A:CYS:C	1:915:A:LEU:N	1:915:A:LEU:CA	1:915:A:LEU:C	18	4.71
(1,39)	1:732:A:VAL:N	1:732:A:VAL:CA	1:732:A:VAL:C	1:733:A:VAL:N	3	4.71
(1,30)	1:724:A:THR:C	1:725:A:SER:N	1:725:A:SER:CA	1:725:A:SER:C	8	4.71
(1,17)	1:718:A:LEU:N	1:718:A:LEU:CA	1:718:A:LEU:C	1:719:A:CYS:N	19	4.71
(1,5)	1:708:A:ARG:C	1:709:A:CYS:N	1:709:A:CYS:CA	1:709:A:CYS:C	20	4.69
(1,224)	1:915:A:LEU:N	1:915:A:LEU:CA	1:915:A:LEU:C	1:916:A:GLU:N	12	4.68
(1,190)	1:888:A:GLN:C	1:889:A:ARG:N	1:889:A:ARG:CA	1:889:A:ARG:C	9	4.68
(1,129)	1:839:A:LEU:C	1:840:A:LEU:N	1:840:A:LEU:CA	1:840:A:LEU:C	10	4.68
(1,126)	1:838:A:ARG:N	1:838:A:ARG:CA	1:838:A:ARG:C	1:839:A:LEU:N	16	4.68
(1,248)	1:933:A:LYS:N	1:933:A:LYS:CA	1:933:A:LYS:C	1:934:A:GLN:N	1	4.67
(1,194)	1:890:A:ILE:C	1:891:A:ARG:N	1:891:A:ARG:CA	1:891:A:ARG:C	5	4.67
(1,38)	1:731:A:ILE:C	1:732:A:VAL:N	1:732:A:VAL:CA	1:732:A:VAL:C	9	4.67
(1,30)	1:724:A:THR:C	1:725:A:SER:N	1:725:A:SER:CA	1:725:A:SER:C	13	4.67
(1,79)	1:780:A:GLU:C	1:781:A:TRP:N	1:781:A:TRP:CA	1:781:A:TRP:C	12	4.66
(1,242)	1:930:A:ASP:N	1:930:A:ASP:CA	1:930:A:ASP:C	1:931:A:VAL:N	10	4.65
(1,119)	1:834:A:PRO:C	1:835:A:ILE:N	1:835:A:ILE:CA	1:835:A:ILE:C	4	4.65
(1,123)	1:836:A:ASN:C	1:837:A:ARG:N	1:837:A:ARG:CA	1:837:A:ARG:C	2	4.64
(1,19)	1:719:A:CYS:N	1:719:A:CYS:CA	1:719:A:CYS:C	1:720:A:GLN:N	4	4.64
(1,236)	1:923:A:LEU:N	1:923:A:LEU:CA	1:923:A:LEU:C	1:924:A:SER:N	17	4.62
(1,46)	1:741:A:PRO:N	1:741:A:PRO:CA	1:741:A:PRO:C	1:742:A:THR:N	7	4.62
(1,145)	1:850:A:GLN:C	1:851:A:CYS:N	1:851:A:CYS:CA	1:851:A:CYS:C	9	4.61
(1,183)	1:885:A:ARG:N	1:885:A:ARG:CA	1:885:A:ARG:C	1:886:A:LEU:N	3	4.6
(1,163)	1:860:A:ALA:C	1:861:A:LEU:N	1:861:A:LEU:CA	1:861:A:LEU:C	11	4.59
(1,31)	1:725:A:SER:N	1:725:A:SER:CA	1:725:A:SER:C	1:726:A:LEU:N	8	4.59

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,221)	1:913:A:ARG:C	1:914:A:CYS:N	1:914:A:CYS:CA	1:914:A:CYS:C	7	4.58
(1,153)	1:854:A:ALA:C	1:855:A:ASN:N	1:855:A:ASN:CA	1:855:A:ASN:C	18	4.58
(1,34)	1:726:A:LEU:C	1:727:A:GLN:N	1:727:A:GLN:CA	1:727:A:GLN:C	5	4.58
(1,143)	1:849:A:TYR:C	1:850:A:GLN:N	1:850:A:GLN:CA	1:850:A:GLN:C	14	4.57
(1,17)	1:718:A:LEU:N	1:718:A:LEU:CA	1:718:A:LEU:C	1:719:A:CYS:N	11	4.57
(1,182)	1:884:A:TYR:C	1:885:A:ARG:N	1:885:A:ARG:CA	1:885:A:ARG:C	7	4.56
(1,130)	1:840:A:LEU:N	1:840:A:LEU:CA	1:840:A:LEU:C	1:841:A:ALA:N	11	4.56
(1,238)	1:924:A:SER:N	1:924:A:SER:CA	1:924:A:SER:C	1:925:A:LYS:N	12	4.55
(1,261)	1:939:A:TYR:C	1:940:A:ALA:N	1:940:A:ALA:CA	1:940:A:ALA:C	12	4.54
(1,251)	1:934:A:GLN:C	1:935:A:THR:N	1:935:A:THR:CA	1:935:A:THR:C	2	4.52
(1,189)	1:888:A:GLN:N	1:888:A:GLN:CA	1:888:A:GLN:C	1:889:A:ARG:N	18	4.52
(1,163)	1:860:A:ALA:C	1:861:A:LEU:N	1:861:A:LEU:CA	1:861:A:LEU:C	5	4.52
(1,118)	1:834:A:PRO:N	1:834:A:PRO:CA	1:834:A:PRO:C	1:835:A:ILE:N	20	4.52
(1,58)	1:749:A:THR:N	1:749:A:THR:CA	1:749:A:THR:C	1:750:A:ASP:N	17	4.52
(1,123)	1:836:A:ASN:C	1:837:A:ARG:N	1:837:A:ARG:CA	1:837:A:ARG:C	3	4.51
(1,225)	1:915:A:LEU:C	1:916:A:GLU:N	1:916:A:GLU:CA	1:916:A:GLU:C	17	4.5
(1,75)	1:771:A:GLY:C	1:772:A:ILE:N	1:772:A:ILE:CA	1:772:A:ILE:C	8	4.5
(1,25)	1:722:A:LEU:N	1:722:A:LEU:CA	1:722:A:LEU:C	1:723:A:GLU:N	16	4.5
(1,226)	1:916:A:GLU:N	1:916:A:GLU:CA	1:916:A:GLU:C	1:917:A:SER:N	16	4.49
(1,194)	1:890:A:ILE:C	1:891:A:ARG:N	1:891:A:ARG:CA	1:891:A:ARG:C	20	4.49
(1,248)	1:933:A:LYS:N	1:933:A:LYS:CA	1:933:A:LYS:C	1:934:A:GLN:N	12	4.47
(1,223)	1:914:A:CYS:C	1:915:A:LEU:N	1:915:A:LEU:CA	1:915:A:LEU:C	8	4.47
(1,110)	1:827:A:ILE:C	1:828:A:LEU:N	1:828:A:LEU:CA	1:828:A:LEU:C	5	4.47
(1,66)	1:762:A:VAL:N	1:762:A:VAL:CA	1:762:A:VAL:C	1:763:A:VAL:N	2	4.47
(1,30)	1:724:A:THR:C	1:725:A:SER:N	1:725:A:SER:CA	1:725:A:SER:C	5	4.47
(1,120)	1:835:A:ILE:N	1:835:A:ILE:CA	1:835:A:ILE:C	1:836:A:ASN:N	7	4.46
(1,118)	1:834:A:PRO:N	1:834:A:PRO:CA	1:834:A:PRO:C	1:835:A:ILE:N	4	4.46
(1,182)	1:884:A:TYR:C	1:885:A:ARG:N	1:885:A:ARG:CA	1:885:A:ARG:C	11	4.45
(1,138)	1:844:A:LEU:N	1:844:A:LEU:CA	1:844:A:LEU:C	1:845:A:GLY:N	2	4.45
(1,113)	1:829:A:VAL:N	1:829:A:VAL:CA	1:829:A:VAL:C	1:830:A:VAL:N	10	4.45
(1,11)	1:711:A:LEU:C	1:712:A:ALA:N	1:712:A:ALA:CA	1:712:A:ALA:C	19	4.45
(1,57)	1:748:A:ILE:C	1:749:A:THR:N	1:749:A:THR:CA	1:749:A:THR:C	14	4.44
(1,260)	1:939:A:TYR:N	1:939:A:TYR:CA	1:939:A:TYR:C	1:940:A:ALA:N	9	4.43
(1,248)	1:933:A:LYS:N	1:933:A:LYS:CA	1:933:A:LYS:C	1:934:A:GLN:N	14	4.42
(1,68)	1:763:A:VAL:N	1:763:A:VAL:CA	1:763:A:VAL:C	1:764:A:THR:N	15	4.41
(1,25)	1:722:A:LEU:N	1:722:A:LEU:CA	1:722:A:LEU:C	1:723:A:GLU:N	2	4.41
(1,272)	1:945:A:LYS:N	1:945:A:LYS:CA	1:945:A:LYS:C	1:946:A:SER:N	10	4.4
(1,150)	1:853:A:THR:N	1:853:A:THR:CA	1:853:A:THR:C	1:854:A:ALA:N	17	4.4
(1,162)	1:860:A:ALA:N	1:860:A:ALA:CA	1:860:A:ALA:C	1:861:A:LEU:N	14	4.39
(1,91)	1:793:A:ALA:N	1:793:A:ALA:CA	1:793:A:ALA:C	1:794:A:LEU:N	20	4.39
(1,248)	1:933:A:LYS:N	1:933:A:LYS:CA	1:933:A:LYS:C	1:934:A:GLN:N	3	4.38
(1,120)	1:835:A:ILE:N	1:835:A:ILE:CA	1:835:A:ILE:C	1:836:A:ASN:N	10	4.38
(1,92)	1:793:A:ALA:C	1:794:A:LEU:N	1:794:A:LEU:CA	1:794:A:LEU:C	4	4.38
(1,17)	1:718:A:LEU:N	1:718:A:LEU:CA	1:718:A:LEU:C	1:719:A:CYS:N	10	4.38
(1,2)	1:707:A:LYS:N	1:707:A:LYS:CA	1:707:A:LYS:C	1:708:A:ARG:N	16	4.38
(1,273)	1:945:A:LYS:C	1:946:A:SER:N	1:946:A:SER:CA	1:946:A:SER:C	14	4.37
(1,115)	1:830:A:VAL:N	1:830:A:VAL:CA	1:830:A:VAL:C	1:831:A:ASP:N	8	4.37
(1,99)	1:797:A:ARG:N	1:797:A:ARG:CA	1:797:A:ARG:C	1:798:A:ILE:N	13	4.37
(1,92)	1:793:A:ALA:C	1:794:A:LEU:N	1:794:A:LEU:CA	1:794:A:LEU:C	5	4.37
(1,36)	1:730:A:GLY:C	1:731:A:ILE:N	1:731:A:ILE:CA	1:731:A:ILE:C	15	4.37
(1,17)	1:718:A:LEU:N	1:718:A:LEU:CA	1:718:A:LEU:C	1:719:A:CYS:N	2	4.37

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,147)	1:851:A:CYS:C	1:852:A:LYS:N	1:852:A:LYS:CA	1:852:A:LYS:C	19	4.36
(1,25)	1:722:A:LEU:N	1:722:A:LEU:CA	1:722:A:LEU:C	1:723:A:GLU:N	7	4.35
(1,25)	1:722:A:LEU:N	1:722:A:LEU:CA	1:722:A:LEU:C	1:723:A:GLU:N	12	4.35
(1,7)	1:709:A:CYS:C	1:710:A:TRP:N	1:710:A:TRP:CA	1:710:A:TRP:C	18	4.35
(1,183)	1:885:A:ARG:N	1:885:A:ARG:CA	1:885:A:ARG:C	1:886:A:LEU:N	2	4.33
(1,205)	1:900:A:ILE:C	1:901:A:GLY:N	1:901:A:GLY:CA	1:901:A:GLY:C	5	4.32
(1,192)	1:889:A:ARG:C	1:890:A:ILE:N	1:890:A:ILE:CA	1:890:A:ILE:C	9	4.32
(1,129)	1:839:A:LEU:C	1:840:A:LEU:N	1:840:A:LEU:CA	1:840:A:LEU:C	17	4.32
(1,103)	1:799:A:TYR:N	1:799:A:TYR:CA	1:799:A:TYR:C	1:800:A:LEU:N	16	4.32
(1,248)	1:933:A:LYS:N	1:933:A:LYS:CA	1:933:A:LYS:C	1:934:A:GLN:N	7	4.31
(1,239)	1:928:A:THR:C	1:929:A:LEU:N	1:929:A:LEU:CA	1:929:A:LEU:C	12	4.31
(1,95)	1:795:A:LEU:N	1:795:A:LEU:CA	1:795:A:LEU:C	1:796:A:ALA:N	4	4.3
(1,123)	1:836:A:ASN:C	1:837:A:ARG:N	1:837:A:ARG:CA	1:837:A:ARG:C	15	4.27
(1,113)	1:829:A:VAL:N	1:829:A:VAL:CA	1:829:A:VAL:C	1:830:A:VAL:N	12	4.27
(1,101)	1:798:A:ILE:N	1:798:A:ILE:CA	1:798:A:ILE:C	1:799:A:TYR:N	18	4.27
(1,23)	1:721:A:PHE:N	1:721:A:PHE:CA	1:721:A:PHE:C	1:722:A:LEU:N	3	4.27
(1,225)	1:915:A:LEU:C	1:916:A:GLU:N	1:916:A:GLU:CA	1:916:A:GLU:C	20	4.26
(1,142)	1:846:A:SER:N	1:846:A:SER:CA	1:846:A:SER:C	1:847:A:LEU:N	5	4.26
(1,92)	1:793:A:ALA:C	1:794:A:LEU:N	1:794:A:LEU:CA	1:794:A:LEU:C	13	4.25
(1,25)	1:722:A:LEU:N	1:722:A:LEU:CA	1:722:A:LEU:C	1:723:A:GLU:N	9	4.25
(1,25)	1:722:A:LEU:N	1:722:A:LEU:CA	1:722:A:LEU:C	1:723:A:GLU:N	18	4.25
(1,138)	1:844:A:LEU:N	1:844:A:LEU:CA	1:844:A:LEU:C	1:845:A:GLY:N	12	4.24
(1,129)	1:839:A:LEU:C	1:840:A:LEU:N	1:840:A:LEU:CA	1:840:A:LEU:C	1	4.24
(1,129)	1:839:A:LEU:C	1:840:A:LEU:N	1:840:A:LEU:CA	1:840:A:LEU:C	18	4.24
(1,78)	1:780:A:GLU:N	1:780:A:GLU:CA	1:780:A:GLU:C	1:781:A:TRP:N	7	4.24
(1,270)	1:944:A:ARG:N	1:944:A:ARG:CA	1:944:A:ARG:C	1:945:A:LYS:N	19	4.23
(1,183)	1:885:A:ARG:N	1:885:A:ARG:CA	1:885:A:ARG:C	1:886:A:LEU:N	11	4.23
(1,166)	1:862:A:ASN:N	1:862:A:ASN:CA	1:862:A:ASN:C	1:863:A:VAL:N	9	4.23
(1,149)	1:852:A:LYS:C	1:853:A:THR:N	1:853:A:THR:CA	1:853:A:THR:C	5	4.23
(1,264)	1:941:A:GLU:N	1:941:A:GLU:CA	1:941:A:GLU:C	1:942:A:ARG:N	12	4.22
(1,1)	1:706:A:GLY:C	1:707:A:LYS:N	1:707:A:LYS:CA	1:707:A:LYS:C	3	4.22
(1,19)	1:719:A:CYS:N	1:719:A:CYS:CA	1:719:A:CYS:C	1:720:A:GLN:N	2	4.21
(1,25)	1:722:A:LEU:N	1:722:A:LEU:CA	1:722:A:LEU:C	1:723:A:GLU:N	11	4.19
(1,17)	1:718:A:LEU:N	1:718:A:LEU:CA	1:718:A:LEU:C	1:719:A:CYS:N	5	4.19
(1,99)	1:797:A:ARG:N	1:797:A:ARG:CA	1:797:A:ARG:C	1:798:A:ILE:N	12	4.18
(1,19)	1:719:A:CYS:N	1:719:A:CYS:CA	1:719:A:CYS:C	1:720:A:GLN:N	1	4.18
(1,238)	1:924:A:SER:N	1:924:A:SER:CA	1:924:A:SER:C	1:925:A:LYS:N	8	4.17
(1,193)	1:890:A:ILE:N	1:890:A:ILE:CA	1:890:A:ILE:C	1:891:A:ARG:N	5	4.17
(1,123)	1:836:A:ASN:C	1:837:A:ARG:N	1:837:A:ARG:CA	1:837:A:ARG:C	9	4.17
(1,128)	1:839:A:LEU:N	1:839:A:LEU:CA	1:839:A:LEU:C	1:840:A:LEU:N	5	4.16
(1,194)	1:890:A:ILE:C	1:891:A:ARG:N	1:891:A:ARG:CA	1:891:A:ARG:C	11	4.15
(1,128)	1:839:A:LEU:N	1:839:A:LEU:CA	1:839:A:LEU:C	1:840:A:LEU:N	9	4.15
(1,235)	1:922:A:CYS:C	1:923:A:LEU:N	1:923:A:LEU:CA	1:923:A:LEU:C	13	4.14
(1,225)	1:915:A:LEU:C	1:916:A:GLU:N	1:916:A:GLU:CA	1:916:A:GLU:C	4	4.14
(1,171)	1:864:A:LEU:C	1:865:A:SER:N	1:865:A:SER:CA	1:865:A:SER:C	15	4.13
(1,128)	1:839:A:LEU:N	1:839:A:LEU:CA	1:839:A:LEU:C	1:840:A:LEU:N	16	4.13
(1,137)	1:843:A:GLN:C	1:844:A:LEU:N	1:844:A:LEU:CA	1:844:A:LEU:C	5	4.12
(1,137)	1:843:A:GLN:C	1:844:A:LEU:N	1:844:A:LEU:CA	1:844:A:LEU:C	6	4.12
(1,25)	1:722:A:LEU:N	1:722:A:LEU:CA	1:722:A:LEU:C	1:723:A:GLU:N	10	4.12
(1,226)	1:916:A:GLU:N	1:916:A:GLU:CA	1:916:A:GLU:C	1:917:A:SER:N	9	4.11
(1,225)	1:915:A:LEU:C	1:916:A:GLU:N	1:916:A:GLU:CA	1:916:A:GLU:C	10	4.11

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,168)	1:863:A:VAL:N	1:863:A:VAL:CA	1:863:A:VAL:C	1:864:A:LEU:N	12	4.1
(1,54)	1:747:A:LEU:N	1:747:A:LEU:CA	1:747:A:LEU:C	1:748:A:ILE:N	19	4.1
(1,191)	1:889:A:ARG:N	1:889:A:ARG:CA	1:889:A:ARG:C	1:890:A:ILE:N	12	4.09
(1,30)	1:724:A:THR:C	1:725:A:SER:N	1:725:A:SER:CA	1:725:A:SER:C	15	4.09
(1,184)	1:885:A:ARG:C	1:886:A:LEU:N	1:886:A:LEU:CA	1:886:A:LEU:C	19	4.08
(1,34)	1:726:A:LEU:C	1:727:A:GLN:N	1:727:A:GLN:CA	1:727:A:GLN:C	16	4.07
(1,201)	1:898:A:PRO:C	1:899:A:VAL:N	1:899:A:VAL:CA	1:899:A:VAL:C	6	4.05
(1,232)	1:921:A:SER:N	1:921:A:SER:CA	1:921:A:SER:C	1:922:A:CYS:N	8	4.04
(1,98)	1:796:A:ALA:C	1:797:A:ARG:N	1:797:A:ARG:CA	1:797:A:ARG:C	2	4.04
(1,97)	1:796:A:ALA:N	1:796:A:ALA:CA	1:796:A:ALA:C	1:797:A:ARG:N	1	4.04
(1,17)	1:718:A:LEU:N	1:718:A:LEU:CA	1:718:A:LEU:C	1:719:A:CYS:N	3	4.04
(1,183)	1:885:A:ARG:N	1:885:A:ARG:CA	1:885:A:ARG:C	1:886:A:LEU:N	1	4.03
(1,34)	1:726:A:LEU:C	1:727:A:GLN:N	1:727:A:GLN:CA	1:727:A:GLN:C	8	4.03
(1,223)	1:914:A:CYS:C	1:915:A:LEU:N	1:915:A:LEU:CA	1:915:A:LEU:C	12	4.02
(1,128)	1:839:A:LEU:N	1:839:A:LEU:CA	1:839:A:LEU:C	1:840:A:LEU:N	13	4.02
(1,243)	1:930:A:ASP:C	1:931:A:VAL:N	1:931:A:VAL:CA	1:931:A:VAL:C	14	4.01
(1,120)	1:835:A:ILE:N	1:835:A:ILE:CA	1:835:A:ILE:C	1:836:A:ASN:N	20	4.0
(1,90)	1:792:A:PRO:C	1:793:A:ALA:N	1:793:A:ALA:CA	1:793:A:ALA:C	16	4.0
(1,98)	1:796:A:ALA:C	1:797:A:ARG:N	1:797:A:ARG:CA	1:797:A:ARG:C	7	3.99
(1,54)	1:747:A:LEU:N	1:747:A:LEU:CA	1:747:A:LEU:C	1:748:A:ILE:N	12	3.99
(1,165)	1:861:A:LEU:C	1:862:A:ASN:N	1:862:A:ASN:CA	1:862:A:ASN:C	7	3.98
(1,83)	1:782:A:VAL:C	1:783:A:HIS:N	1:783:A:HIS:CA	1:783:A:HIS:C	14	3.98
(1,17)	1:718:A:LEU:N	1:718:A:LEU:CA	1:718:A:LEU:C	1:719:A:CYS:N	18	3.98
(1,232)	1:921:A:SER:N	1:921:A:SER:CA	1:921:A:SER:C	1:922:A:CYS:N	9	3.97
(1,195)	1:891:A:ARG:N	1:891:A:ARG:CA	1:891:A:ARG:C	1:892:A:GLN:N	6	3.97
(1,158)	1:858:A:VAL:N	1:858:A:VAL:CA	1:858:A:VAL:C	1:859:A:ASP:N	2	3.97
(1,140)	1:845:A:GLY:N	1:845:A:GLY:CA	1:845:A:GLY:C	1:846:A:SER:N	8	3.95
(1,243)	1:930:A:ASP:C	1:931:A:VAL:N	1:931:A:VAL:CA	1:931:A:VAL:C	11	3.94
(1,228)	1:917:A:SER:N	1:917:A:SER:CA	1:917:A:SER:C	1:918:A:GLY:N	18	3.94
(1,221)	1:913:A:ARG:C	1:914:A:CYS:N	1:914:A:CYS:CA	1:914:A:CYS:C	19	3.94
(1,6)	1:709:A:CYS:N	1:709:A:CYS:CA	1:709:A:CYS:C	1:710:A:TRP:N	17	3.94
(1,268)	1:943:A:VAL:N	1:943:A:VAL:CA	1:943:A:VAL:C	1:944:A:ARG:N	11	3.93
(1,220)	1:913:A:ARG:N	1:913:A:ARG:CA	1:913:A:ARG:C	1:914:A:CYS:N	20	3.93
(1,202)	1:899:A:VAL:N	1:899:A:VAL:CA	1:899:A:VAL:C	1:900:A:ILE:N	3	3.93
(1,177)	1:873:A:LEU:N	1:873:A:LEU:CA	1:873:A:LEU:C	1:874:A:SER:N	14	3.93
(1,40)	1:732:A:VAL:C	1:733:A:VAL:N	1:733:A:VAL:CA	1:733:A:VAL:C	1	3.92
(1,203)	1:899:A:VAL:C	1:900:A:ILE:N	1:900:A:ILE:CA	1:900:A:ILE:C	3	3.91
(1,123)	1:836:A:ASN:C	1:837:A:ARG:N	1:837:A:ARG:CA	1:837:A:ARG:C	4	3.91
(1,98)	1:796:A:ALA:C	1:797:A:ARG:N	1:797:A:ARG:CA	1:797:A:ARG:C	20	3.91
(1,30)	1:724:A:THR:C	1:725:A:SER:N	1:725:A:SER:CA	1:725:A:SER:C	17	3.91
(1,244)	1:931:A:VAL:N	1:931:A:VAL:CA	1:931:A:VAL:C	1:932:A:ILE:N	7	3.9
(1,229)	1:917:A:SER:C	1:918:A:GLY:N	1:918:A:GLY:CA	1:918:A:GLY:C	12	3.9
(1,156)	1:856:A:ASP:N	1:856:A:ASP:CA	1:856:A:ASP:C	1:857:A:GLY:N	14	3.9
(1,95)	1:795:A:LEU:N	1:795:A:LEU:CA	1:795:A:LEU:C	1:796:A:ALA:N	7	3.9
(1,264)	1:941:A:GLU:N	1:941:A:GLU:CA	1:941:A:GLU:C	1:942:A:ARG:N	1	3.89
(1,126)	1:838:A:ARG:N	1:838:A:ARG:CA	1:838:A:ARG:C	1:839:A:LEU:N	6	3.89
(1,94)	1:794:A:LEU:C	1:795:A:LEU:N	1:795:A:LEU:CA	1:795:A:LEU:C	4	3.89
(1,87)	1:790:A:GLU:C	1:791:A:LEU:N	1:791:A:LEU:CA	1:791:A:LEU:C	16	3.89
(1,5)	1:708:A:ARG:C	1:709:A:CYS:N	1:709:A:CYS:CA	1:709:A:CYS:C	11	3.88
(1,248)	1:933:A:LYS:N	1:933:A:LYS:CA	1:933:A:LYS:C	1:934:A:GLN:N	18	3.87
(1,170)	1:864:A:LEU:N	1:864:A:LEU:CA	1:864:A:LEU:C	1:865:A:SER:N	13	3.87

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,158)	1:858:A:VAL:N	1:858:A:VAL:CA	1:858:A:VAL:C	1:859:A:ASP:N	17	3.86
(1,39)	1:732:A:VAL:N	1:732:A:VAL:CA	1:732:A:VAL:C	1:733:A:VAL:N	18	3.86
(1,5)	1:708:A:ARG:C	1:709:A:CYS:N	1:709:A:CYS:CA	1:709:A:CYS:C	1	3.86
(1,137)	1:843:A:GLN:C	1:844:A:LEU:N	1:844:A:LEU:CA	1:844:A:LEU:C	9	3.85
(1,84)	1:783:A:HIS:N	1:783:A:HIS:CA	1:783:A:HIS:C	1:784:A:SER:N	7	3.84
(1,47)	1:741:A:PRO:C	1:742:A:THR:N	1:742:A:THR:CA	1:742:A:THR:C	10	3.84
(1,137)	1:843:A:GLN:C	1:844:A:LEU:N	1:844:A:LEU:CA	1:844:A:LEU:C	16	3.82
(1,119)	1:834:A:PRO:C	1:835:A:ILE:N	1:835:A:ILE:CA	1:835:A:ILE:C	20	3.82
(1,98)	1:796:A:ALA:C	1:797:A:ARG:N	1:797:A:ARG:CA	1:797:A:ARG:C	18	3.82
(1,259)	1:938:A:LEU:C	1:939:A:TYR:N	1:939:A:TYR:CA	1:939:A:TYR:C	13	3.81
(1,250)	1:934:A:GLN:N	1:934:A:GLN:CA	1:934:A:GLN:C	1:935:A:THR:N	6	3.81
(1,138)	1:844:A:LEU:N	1:844:A:LEU:CA	1:844:A:LEU:C	1:845:A:GLY:N	20	3.81
(1,223)	1:914:A:CYS:C	1:915:A:LEU:N	1:915:A:LEU:CA	1:915:A:LEU:C	16	3.8
(1,110)	1:827:A:ILE:C	1:828:A:LEU:N	1:828:A:LEU:CA	1:828:A:LEU:C	3	3.8
(1,110)	1:827:A:ILE:C	1:828:A:LEU:N	1:828:A:LEU:CA	1:828:A:LEU:C	11	3.79
(1,58)	1:749:A:THR:N	1:749:A:THR:CA	1:749:A:THR:C	1:750:A:ASP:N	6	3.79
(1,268)	1:943:A:VAL:N	1:943:A:VAL:CA	1:943:A:VAL:C	1:944:A:ARG:N	8	3.77
(1,19)	1:719:A:CYS:N	1:719:A:CYS:CA	1:719:A:CYS:C	1:720:A:GLN:N	18	3.77
(1,143)	1:849:A:TYR:C	1:850:A:GLN:N	1:850:A:GLN:CA	1:850:A:GLN:C	12	3.76
(1,125)	1:837:A:ARG:C	1:838:A:ARG:N	1:838:A:ARG:CA	1:838:A:ARG:C	7	3.76
(1,212)	1:904:A:ALA:N	1:904:A:ALA:CA	1:904:A:ALA:C	1:905:A:ASN:N	14	3.74
(1,58)	1:749:A:THR:N	1:749:A:THR:CA	1:749:A:THR:C	1:750:A:ASP:N	11	3.74
(1,223)	1:914:A:CYS:C	1:915:A:LEU:N	1:915:A:LEU:CA	1:915:A:LEU:C	7	3.73
(1,162)	1:860:A:ALA:N	1:860:A:ALA:CA	1:860:A:ALA:C	1:861:A:LEU:N	13	3.73
(1,160)	1:859:A:ASP:N	1:859:A:ASP:CA	1:859:A:ASP:C	1:860:A:ALA:N	6	3.72
(1,157)	1:857:A:GLY:C	1:858:A:VAL:N	1:858:A:VAL:CA	1:858:A:VAL:C	20	3.71
(1,157)	1:857:A:GLY:C	1:858:A:VAL:N	1:858:A:VAL:CA	1:858:A:VAL:C	7	3.7
(1,215)	1:910:A:GLU:C	1:911:A:LYS:N	1:911:A:LYS:CA	1:911:A:LYS:C	9	3.69
(1,92)	1:793:A:ALA:C	1:794:A:LEU:N	1:794:A:LEU:CA	1:794:A:LEU:C	19	3.69
(1,63)	1:760:A:ARG:C	1:761:A:ALA:N	1:761:A:ALA:CA	1:761:A:ALA:C	15	3.69
(1,248)	1:933:A:LYS:N	1:933:A:LYS:CA	1:933:A:LYS:C	1:934:A:GLN:N	20	3.68
(1,223)	1:914:A:CYS:C	1:915:A:LEU:N	1:915:A:LEU:CA	1:915:A:LEU:C	14	3.67
(1,157)	1:857:A:GLY:C	1:858:A:VAL:N	1:858:A:VAL:CA	1:858:A:VAL:C	11	3.67
(1,85)	1:783:A:HIS:C	1:784:A:SER:N	1:784:A:SER:CA	1:784:A:SER:C	17	3.67
(1,248)	1:933:A:LYS:N	1:933:A:LYS:CA	1:933:A:LYS:C	1:934:A:GLN:N	19	3.64
(1,147)	1:851:A:CYS:C	1:852:A:LYS:N	1:852:A:LYS:CA	1:852:A:LYS:C	10	3.64
(1,123)	1:836:A:ASN:C	1:837:A:ARG:N	1:837:A:ARG:CA	1:837:A:ARG:C	1	3.64
(1,221)	1:913:A:ARG:C	1:914:A:CYS:N	1:914:A:CYS:CA	1:914:A:CYS:C	1	3.63
(1,155)	1:855:A:ASN:C	1:856:A:ASP:N	1:856:A:ASP:CA	1:856:A:ASP:C	7	3.61
(1,63)	1:760:A:ARG:C	1:761:A:ALA:N	1:761:A:ALA:CA	1:761:A:ALA:C	5	3.61
(1,248)	1:933:A:LYS:N	1:933:A:LYS:CA	1:933:A:LYS:C	1:934:A:GLN:N	17	3.6
(1,243)	1:930:A:ASP:C	1:931:A:VAL:N	1:931:A:VAL:CA	1:931:A:VAL:C	12	3.6
(1,211)	1:903:A:THR:C	1:904:A:ALA:N	1:904:A:ALA:CA	1:904:A:ALA:C	16	3.6
(1,99)	1:797:A:ARG:N	1:797:A:ARG:CA	1:797:A:ARG:C	1:798:A:ILE:N	18	3.6
(1,29)	1:724:A:THR:N	1:724:A:THR:CA	1:724:A:THR:C	1:725:A:SER:N	3	3.6
(1,223)	1:914:A:CYS:C	1:915:A:LEU:N	1:915:A:LEU:CA	1:915:A:LEU:C	3	3.59
(1,110)	1:827:A:ILE:C	1:828:A:LEU:N	1:828:A:LEU:CA	1:828:A:LEU:C	1	3.59
(1,111)	1:828:A:LEU:N	1:828:A:LEU:CA	1:828:A:LEU:C	1:829:A:VAL:N	7	3.58
(1,123)	1:836:A:ASN:C	1:837:A:ARG:N	1:837:A:ARG:CA	1:837:A:ARG:C	12	3.57
(1,130)	1:840:A:LEU:N	1:840:A:LEU:CA	1:840:A:LEU:C	1:841:A:ALA:N	9	3.56
(1,92)	1:793:A:ALA:C	1:794:A:LEU:N	1:794:A:LEU:CA	1:794:A:LEU:C	9	3.56

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,19)	1:719:A:CYS:N	1:719:A:CYS:CA	1:719:A:CYS:C	1:720:A:GLN:N	16	3.56
(1,123)	1:836:A:ASN:C	1:837:A:ARG:N	1:837:A:ARG:CA	1:837:A:ARG:C	16	3.55
(1,98)	1:796:A:ALA:C	1:797:A:ARG:N	1:797:A:ARG:CA	1:797:A:ARG:C	9	3.55
(1,272)	1:945:A:LYS:N	1:945:A:LYS:CA	1:945:A:LYS:C	1:946:A:SER:N	4	3.53
(1,231)	1:920:A:ASP:C	1:921:A:SER:N	1:921:A:SER:CA	1:921:A:SER:C	8	3.52
(1,137)	1:843:A:GLN:C	1:844:A:LEU:N	1:844:A:LEU:CA	1:844:A:LEU:C	11	3.52
(1,136)	1:843:A:GLN:N	1:843:A:GLN:CA	1:843:A:GLN:C	1:844:A:LEU:N	8	3.51
(1,32)	1:725:A:SER:C	1:726:A:LEU:N	1:726:A:LEU:CA	1:726:A:LEU:C	3	3.51
(1,153)	1:854:A:ALA:C	1:855:A:ASN:N	1:855:A:ASN:CA	1:855:A:ASN:C	16	3.5
(1,52)	1:746:A:VAL:N	1:746:A:VAL:CA	1:746:A:VAL:C	1:747:A:LEU:N	14	3.49
(1,245)	1:931:A:VAL:C	1:932:A:ILE:N	1:932:A:ILE:CA	1:932:A:ILE:C	11	3.48
(1,66)	1:762:A:VAL:N	1:762:A:VAL:CA	1:762:A:VAL:C	1:763:A:VAL:N	18	3.48
(1,79)	1:780:A:GLU:C	1:781:A:TRP:N	1:781:A:TRP:CA	1:781:A:TRP:C	1	3.47
(1,56)	1:748:A:ILE:N	1:748:A:ILE:CA	1:748:A:ILE:C	1:749:A:THR:N	11	3.47
(1,39)	1:732:A:VAL:N	1:732:A:VAL:CA	1:732:A:VAL:C	1:733:A:VAL:N	4	3.47
(1,27)	1:723:A:GLU:N	1:723:A:GLU:CA	1:723:A:GLU:C	1:724:A:THR:N	19	3.47
(1,92)	1:793:A:ALA:C	1:794:A:LEU:N	1:794:A:LEU:CA	1:794:A:LEU:C	3	3.46
(1,25)	1:722:A:LEU:N	1:722:A:LEU:CA	1:722:A:LEU:C	1:723:A:GLU:N	6	3.46
(1,6)	1:709:A:CYS:N	1:709:A:CYS:CA	1:709:A:CYS:C	1:710:A:TRP:N	14	3.46
(1,143)	1:849:A:TYR:C	1:850:A:GLN:N	1:850:A:GLN:CA	1:850:A:GLN:C	18	3.45
(1,98)	1:796:A:ALA:C	1:797:A:ARG:N	1:797:A:ARG:CA	1:797:A:ARG:C	17	3.45
(1,248)	1:933:A:LYS:N	1:933:A:LYS:CA	1:933:A:LYS:C	1:934:A:GLN:N	11	3.43
(1,221)	1:913:A:ARG:C	1:914:A:CYS:N	1:914:A:CYS:CA	1:914:A:CYS:C	20	3.42
(1,158)	1:858:A:VAL:N	1:858:A:VAL:CA	1:858:A:VAL:C	1:859:A:ASP:N	8	3.42
(1,25)	1:722:A:LEU:N	1:722:A:LEU:CA	1:722:A:LEU:C	1:723:A:GLU:N	5	3.42
(1,24)	1:721:A:PHE:C	1:722:A:LEU:N	1:722:A:LEU:CA	1:722:A:LEU:C	13	3.42
(1,15)	1:717:A:SER:N	1:717:A:SER:CA	1:717:A:SER:C	1:718:A:LEU:N	10	3.41
(1,204)	1:900:A:ILE:N	1:900:A:ILE:CA	1:900:A:ILE:C	1:901:A:GLY:N	18	3.4
(1,63)	1:760:A:ARG:C	1:761:A:ALA:N	1:761:A:ALA:CA	1:761:A:ALA:C	9	3.4
(1,29)	1:724:A:THR:N	1:724:A:THR:CA	1:724:A:THR:C	1:725:A:SER:N	9	3.4
(1,24)	1:721:A:PHE:C	1:722:A:LEU:N	1:722:A:LEU:CA	1:722:A:LEU:C	2	3.4
(1,63)	1:760:A:ARG:C	1:761:A:ALA:N	1:761:A:ALA:CA	1:761:A:ALA:C	13	3.39
(1,262)	1:940:A:ALA:N	1:940:A:ALA:CA	1:940:A:ALA:C	1:941:A:GLU:N	16	3.38
(1,168)	1:863:A:VAL:N	1:863:A:VAL:CA	1:863:A:VAL:C	1:864:A:LEU:N	1	3.38
(1,55)	1:747:A:LEU:C	1:748:A:ILE:N	1:748:A:ILE:CA	1:748:A:ILE:C	19	3.38
(1,172)	1:865:A:SER:N	1:865:A:SER:CA	1:865:A:SER:C	1:866:A:LYS:N	12	3.37
(1,9)	1:710:A:TRP:C	1:711:A:LEU:N	1:711:A:LEU:CA	1:711:A:LEU:C	9	3.37
(1,197)	1:892:A:GLN:N	1:892:A:GLN:CA	1:892:A:GLN:C	1:893:A:LEU:N	7	3.36
(1,162)	1:860:A:ALA:N	1:860:A:ALA:CA	1:860:A:ALA:C	1:861:A:LEU:N	18	3.36
(1,97)	1:796:A:ALA:N	1:796:A:ALA:CA	1:796:A:ALA:C	1:797:A:ARG:N	18	3.36
(1,42)	1:733:A:VAL:C	1:734:A:THR:N	1:734:A:THR:CA	1:734:A:THR:C	11	3.36
(1,262)	1:940:A:ALA:N	1:940:A:ALA:CA	1:940:A:ALA:C	1:941:A:GLU:N	20	3.35
(1,137)	1:843:A:GLN:C	1:844:A:LEU:N	1:844:A:LEU:CA	1:844:A:LEU:C	8	3.35
(1,129)	1:839:A:LEU:C	1:840:A:LEU:N	1:840:A:LEU:CA	1:840:A:LEU:C	7	3.35
(1,72)	1:765:A:PHE:N	1:765:A:PHE:CA	1:765:A:PHE:C	1:766:A:CYS:N	9	3.35
(1,24)	1:721:A:PHE:C	1:722:A:LEU:N	1:722:A:LEU:CA	1:722:A:LEU:C	10	3.35
(1,17)	1:718:A:LEU:N	1:718:A:LEU:CA	1:718:A:LEU:C	1:719:A:CYS:N	20	3.35
(1,161)	1:859:A:ASP:C	1:860:A:ALA:N	1:860:A:ALA:CA	1:860:A:ALA:C	11	3.34
(1,90)	1:792:A:PRO:C	1:793:A:ALA:N	1:793:A:ALA:CA	1:793:A:ALA:C	19	3.34
(1,87)	1:790:A:GLU:C	1:791:A:LEU:N	1:791:A:LEU:CA	1:791:A:LEU:C	3	3.34
(1,272)	1:945:A:LYS:N	1:945:A:LYS:CA	1:945:A:LYS:C	1:946:A:SER:N	2	3.33

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,200)	1:898:A:PRO:N	1:898:A:PRO:CA	1:898:A:PRO:C	1:899:A:VAL:N	17	3.33
(1,158)	1:858:A:VAL:N	1:858:A:VAL:CA	1:858:A:VAL:C	1:859:A:ASP:N	20	3.33
(1,223)	1:914:A:CYS:C	1:915:A:LEU:N	1:915:A:LEU:CA	1:915:A:LEU:C	15	3.31
(1,269)	1:943:A:VAL:C	1:944:A:ARG:N	1:944:A:ARG:CA	1:944:A:ARG:C	5	3.3
(1,205)	1:900:A:ILE:C	1:901:A:GLY:N	1:901:A:GLY:CA	1:901:A:GLY:C	11	3.3
(1,189)	1:888:A:GLN:N	1:888:A:GLN:CA	1:888:A:GLN:C	1:889:A:ARG:N	5	3.3
(1,158)	1:858:A:VAL:N	1:858:A:VAL:CA	1:858:A:VAL:C	1:859:A:ASP:N	10	3.3
(1,98)	1:796:A:ALA:C	1:797:A:ARG:N	1:797:A:ARG:CA	1:797:A:ARG:C	1	3.3
(1,102)	1:798:A:ILE:C	1:799:A:TYR:N	1:799:A:TYR:CA	1:799:A:TYR:C	5	3.29
(1,92)	1:793:A:ALA:C	1:794:A:LEU:N	1:794:A:LEU:CA	1:794:A:LEU:C	15	3.29
(1,98)	1:796:A:ALA:C	1:797:A:ARG:N	1:797:A:ARG:CA	1:797:A:ARG:C	11	3.28
(1,50)	1:745:A:ASP:N	1:745:A:ASP:CA	1:745:A:ASP:C	1:746:A:VAL:N	13	3.28
(1,123)	1:836:A:ASN:C	1:837:A:ARG:N	1:837:A:ARG:CA	1:837:A:ARG:C	17	3.27
(1,97)	1:796:A:ALA:N	1:796:A:ALA:CA	1:796:A:ALA:C	1:797:A:ARG:N	12	3.27
(1,6)	1:709:A:CYS:N	1:709:A:CYS:CA	1:709:A:CYS:C	1:710:A:TRP:N	1	3.27
(1,240)	1:929:A:LEU:N	1:929:A:LEU:CA	1:929:A:LEU:C	1:930:A:ASP:N	12	3.26
(1,118)	1:834:A:PRO:N	1:834:A:PRO:CA	1:834:A:PRO:C	1:835:A:ILE:N	17	3.26
(1,25)	1:722:A:LEU:N	1:722:A:LEU:CA	1:722:A:LEU:C	1:723:A:GLU:N	3	3.26
(1,24)	1:721:A:PHE:C	1:722:A:LEU:N	1:722:A:LEU:CA	1:722:A:LEU:C	16	3.26
(1,208)	1:902:A:VAL:N	1:902:A:VAL:CA	1:902:A:VAL:C	1:903:A:THR:N	3	3.24
(1,189)	1:888:A:GLN:N	1:888:A:GLN:CA	1:888:A:GLN:C	1:889:A:ARG:N	2	3.24
(1,29)	1:724:A:THR:N	1:724:A:THR:CA	1:724:A:THR:C	1:725:A:SER:N	13	3.24
(1,105)	1:825:A:MET:N	1:825:A:MET:CA	1:825:A:MET:C	1:826:A:MET:N	2	3.23
(1,29)	1:724:A:THR:N	1:724:A:THR:CA	1:724:A:THR:C	1:725:A:SER:N	17	3.23
(1,47)	1:741:A:PRO:C	1:742:A:THR:N	1:742:A:THR:CA	1:742:A:THR:C	16	3.21
(1,268)	1:943:A:VAL:N	1:943:A:VAL:CA	1:943:A:VAL:C	1:944:A:ARG:N	10	3.2
(1,203)	1:899:A:VAL:C	1:900:A:ILE:N	1:900:A:ILE:CA	1:900:A:ILE:C	15	3.2
(1,123)	1:836:A:ASN:C	1:837:A:ARG:N	1:837:A:ARG:CA	1:837:A:ARG:C	7	3.2
(1,137)	1:843:A:GLN:C	1:844:A:LEU:N	1:844:A:LEU:CA	1:844:A:LEU:C	18	3.19
(1,26)	1:722:A:LEU:C	1:723:A:GLU:N	1:723:A:GLU:CA	1:723:A:GLU:C	17	3.18
(1,223)	1:914:A:CYS:C	1:915:A:LEU:N	1:915:A:LEU:CA	1:915:A:LEU:C	13	3.17
(1,158)	1:858:A:VAL:N	1:858:A:VAL:CA	1:858:A:VAL:C	1:859:A:ASP:N	1	3.17
(1,128)	1:839:A:LEU:N	1:839:A:LEU:CA	1:839:A:LEU:C	1:840:A:LEU:N	14	3.17
(1,93)	1:794:A:LEU:N	1:794:A:LEU:CA	1:794:A:LEU:C	1:795:A:LEU:N	4	3.17
(1,24)	1:721:A:PHE:C	1:722:A:LEU:N	1:722:A:LEU:CA	1:722:A:LEU:C	7	3.17
(1,274)	1:946:A:SER:N	1:946:A:SER:CA	1:946:A:SER:C	1:947:A:ARG:N	14	3.16
(1,123)	1:836:A:ASN:C	1:837:A:ARG:N	1:837:A:ARG:CA	1:837:A:ARG:C	14	3.15
(1,244)	1:931:A:VAL:N	1:931:A:VAL:CA	1:931:A:VAL:C	1:932:A:ILE:N	12	3.14
(1,59)	1:749:A:THR:C	1:750:A:ASP:N	1:750:A:ASP:CA	1:750:A:ASP:C	19	3.14
(1,232)	1:921:A:SER:N	1:921:A:SER:CA	1:921:A:SER:C	1:922:A:CYS:N	2	3.13
(1,29)	1:724:A:THR:N	1:724:A:THR:CA	1:724:A:THR:C	1:725:A:SER:N	5	3.13
(1,170)	1:864:A:LEU:N	1:864:A:LEU:CA	1:864:A:LEU:C	1:865:A:SER:N	19	3.12
(1,153)	1:854:A:ALA:C	1:855:A:ASN:N	1:855:A:ASN:CA	1:855:A:ASN:C	4	3.11
(1,35)	1:728:A:ARG:N	1:728:A:ARG:CA	1:728:A:ARG:C	1:729:A:SER:N	10	3.11
(1,238)	1:924:A:SER:N	1:924:A:SER:CA	1:924:A:SER:C	1:925:A:LYS:N	10	3.1
(1,170)	1:864:A:LEU:N	1:864:A:LEU:CA	1:864:A:LEU:C	1:865:A:SER:N	8	3.1
(1,44)	1:734:A:THR:C	1:735:A:THR:N	1:735:A:THR:CA	1:735:A:THR:C	2	3.1
(1,250)	1:934:A:GLN:N	1:934:A:GLN:CA	1:934:A:GLN:C	1:935:A:THR:N	16	3.09
(1,267)	1:942:A:ARG:C	1:943:A:VAL:N	1:943:A:VAL:CA	1:943:A:VAL:C	10	3.08
(1,196)	1:891:A:ARG:C	1:892:A:GLN:N	1:892:A:GLN:CA	1:892:A:GLN:C	11	3.07
(1,38)	1:731:A:ILE:C	1:732:A:VAL:N	1:732:A:VAL:CA	1:732:A:VAL:C	5	3.07

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,128)	1:839:A:LEU:N	1:839:A:LEU:CA	1:839:A:LEU:C	1:840:A:LEU:N	19	3.06
(1,205)	1:900:A:ILE:C	1:901:A:GLY:N	1:901:A:GLY:CA	1:901:A:GLY:C	18	3.05
(1,156)	1:856:A:ASP:N	1:856:A:ASP:CA	1:856:A:ASP:C	1:857:A:GLY:N	5	3.05
(1,98)	1:796:A:ALA:C	1:797:A:ARG:N	1:797:A:ARG:CA	1:797:A:ARG:C	10	3.05
(1,87)	1:790:A:GLU:C	1:791:A:LEU:N	1:791:A:LEU:CA	1:791:A:LEU:C	2	3.04
(1,125)	1:837:A:ARG:C	1:838:A:ARG:N	1:838:A:ARG:CA	1:838:A:ARG:C	1	3.03
(1,30)	1:724:A:THR:C	1:725:A:SER:N	1:725:A:SER:CA	1:725:A:SER:C	12	3.03
(1,232)	1:921:A:SER:N	1:921:A:SER:CA	1:921:A:SER:C	1:922:A:CYS:N	10	3.02
(1,223)	1:914:A:CYS:C	1:915:A:LEU:N	1:915:A:LEU:CA	1:915:A:LEU:C	19	3.02
(1,169)	1:863:A:VAL:C	1:864:A:LEU:N	1:864:A:LEU:CA	1:864:A:LEU:C	7	3.02
(1,98)	1:796:A:ALA:C	1:797:A:ARG:N	1:797:A:ARG:CA	1:797:A:ARG:C	13	3.02
(1,19)	1:719:A:CYS:N	1:719:A:CYS:CA	1:719:A:CYS:C	1:720:A:GLN:N	13	3.02
(1,153)	1:854:A:ALA:C	1:855:A:ASN:N	1:855:A:ASN:CA	1:855:A:ASN:C	17	3.01
(1,29)	1:724:A:THR:N	1:724:A:THR:CA	1:724:A:THR:C	1:725:A:SER:N	15	3.01
(1,177)	1:873:A:LEU:N	1:873:A:LEU:CA	1:873:A:LEU:C	1:874:A:SER:N	15	3.0
(1,257)	1:937:A:THR:C	1:938:A:LEU:N	1:938:A:LEU:CA	1:938:A:LEU:C	13	2.98
(1,251)	1:934:A:GLN:C	1:935:A:THR:N	1:935:A:THR:CA	1:935:A:THR:C	20	2.97
(1,223)	1:914:A:CYS:C	1:915:A:LEU:N	1:915:A:LEU:CA	1:915:A:LEU:C	6	2.97
(1,190)	1:888:A:GLN:C	1:889:A:ARG:N	1:889:A:ARG:CA	1:889:A:ARG:C	11	2.97
(1,255)	1:936:A:LEU:C	1:937:A:THR:N	1:937:A:THR:CA	1:937:A:THR:C	13	2.96
(1,57)	1:748:A:ILE:C	1:749:A:THR:N	1:749:A:THR:CA	1:749:A:THR:C	6	2.95
(1,239)	1:928:A:THR:C	1:929:A:LEU:N	1:929:A:LEU:CA	1:929:A:LEU:C	14	2.93
(1,137)	1:843:A:GLN:C	1:844:A:LEU:N	1:844:A:LEU:CA	1:844:A:LEU:C	15	2.93
(1,144)	1:850:A:GLN:N	1:850:A:GLN:CA	1:850:A:GLN:C	1:851:A:CYS:N	10	2.92
(1,47)	1:741:A:PRO:C	1:742:A:THR:N	1:742:A:THR:CA	1:742:A:THR:C	2	2.92
(1,98)	1:796:A:ALA:C	1:797:A:ARG:N	1:797:A:ARG:CA	1:797:A:ARG:C	15	2.91
(1,20)	1:719:A:CYS:C	1:720:A:GLN:N	1:720:A:GLN:CA	1:720:A:GLN:C	19	2.91
(1,185)	1:886:A:LEU:N	1:886:A:LEU:CA	1:886:A:LEU:C	1:887:A:THR:N	19	2.89
(1,129)	1:839:A:LEU:C	1:840:A:LEU:N	1:840:A:LEU:CA	1:840:A:LEU:C	20	2.88
(1,123)	1:836:A:ASN:C	1:837:A:ARG:N	1:837:A:ARG:CA	1:837:A:ARG:C	8	2.88
(1,268)	1:943:A:VAL:N	1:943:A:VAL:CA	1:943:A:VAL:C	1:944:A:ARG:N	16	2.87
(1,129)	1:839:A:LEU:C	1:840:A:LEU:N	1:840:A:LEU:CA	1:840:A:LEU:C	19	2.87
(1,30)	1:724:A:THR:C	1:725:A:SER:N	1:725:A:SER:CA	1:725:A:SER:C	2	2.87
(1,203)	1:899:A:VAL:C	1:900:A:ILE:N	1:900:A:ILE:CA	1:900:A:ILE:C	13	2.85
(1,193)	1:890:A:ILE:N	1:890:A:ILE:CA	1:890:A:ILE:C	1:891:A:ARG:N	16	2.85
(1,196)	1:891:A:ARG:C	1:892:A:GLN:N	1:892:A:GLN:CA	1:892:A:GLN:C	16	2.84
(1,221)	1:913:A:ARG:C	1:914:A:CYS:N	1:914:A:CYS:CA	1:914:A:CYS:C	15	2.83
(1,148)	1:852:A:LYS:N	1:852:A:LYS:CA	1:852:A:LYS:C	1:853:A:THR:N	4	2.83
(1,147)	1:851:A:CYS:C	1:852:A:LYS:N	1:852:A:LYS:CA	1:852:A:LYS:C	14	2.83
(1,110)	1:827:A:ILE:C	1:828:A:LEU:N	1:828:A:LEU:CA	1:828:A:LEU:C	10	2.83
(1,165)	1:861:A:LEU:C	1:862:A:ASN:N	1:862:A:ASN:CA	1:862:A:ASN:C	13	2.82
(1,84)	1:783:A:HIS:N	1:783:A:HIS:CA	1:783:A:HIS:C	1:784:A:SER:N	9	2.81
(1,56)	1:748:A:ILE:N	1:748:A:ILE:CA	1:748:A:ILE:C	1:749:A:THR:N	8	2.81
(1,58)	1:749:A:THR:N	1:749:A:THR:CA	1:749:A:THR:C	1:750:A:ASP:N	7	2.8
(1,130)	1:840:A:LEU:N	1:840:A:LEU:CA	1:840:A:LEU:C	1:841:A:ALA:N	2	2.79
(1,38)	1:731:A:ILE:C	1:732:A:VAL:N	1:732:A:VAL:CA	1:732:A:VAL:C	18	2.78
(1,224)	1:915:A:LEU:N	1:915:A:LEU:CA	1:915:A:LEU:C	1:916:A:GLU:N	16	2.75
(1,119)	1:834:A:PRO:C	1:835:A:ILE:N	1:835:A:ILE:CA	1:835:A:ILE:C	12	2.75
(1,243)	1:930:A:ASP:C	1:931:A:VAL:N	1:931:A:VAL:CA	1:931:A:VAL:C	15	2.74
(1,32)	1:725:A:SER:C	1:726:A:LEU:N	1:726:A:LEU:CA	1:726:A:LEU:C	17	2.74
(1,226)	1:916:A:GLU:N	1:916:A:GLU:CA	1:916:A:GLU:C	1:917:A:SER:N	18	2.73

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,118)	1:834:A:PRO:N	1:834:A:PRO:CA	1:834:A:PRO:C	1:835:A:ILE:N	8	2.72
(1,238)	1:924:A:SER:N	1:924:A:SER:CA	1:924:A:SER:C	1:925:A:LYS:N	19	2.71
(1,104)	1:824:A:ASP:C	1:825:A:MET:N	1:825:A:MET:CA	1:825:A:MET:C	12	2.71
(1,235)	1:922:A:CYS:C	1:923:A:LEU:N	1:923:A:LEU:CA	1:923:A:LEU:C	9	2.7
(1,120)	1:835:A:ILE:N	1:835:A:ILE:CA	1:835:A:ILE:C	1:836:A:ASN:N	5	2.7
(1,170)	1:864:A:LEU:N	1:864:A:LEU:CA	1:864:A:LEU:C	1:865:A:SER:N	1	2.67
(1,203)	1:899:A:VAL:C	1:900:A:ILE:N	1:900:A:ILE:CA	1:900:A:ILE:C	11	2.66
(1,87)	1:790:A:GLU:C	1:791:A:LEU:N	1:791:A:LEU:CA	1:791:A:LEU:C	6	2.66
(1,68)	1:763:A:VAL:N	1:763:A:VAL:CA	1:763:A:VAL:C	1:764:A:THR:N	19	2.66
(1,24)	1:721:A:PHE:C	1:722:A:LEU:N	1:722:A:LEU:CA	1:722:A:LEU:C	11	2.66
(1,192)	1:889:A:ARG:C	1:890:A:ILE:N	1:890:A:ILE:CA	1:890:A:ILE:C	8	2.65
(1,23)	1:721:A:PHE:N	1:721:A:PHE:CA	1:721:A:PHE:C	1:722:A:LEU:N	14	2.65
(1,110)	1:827:A:ILE:C	1:828:A:LEU:N	1:828:A:LEU:CA	1:828:A:LEU:C	12	2.64
(1,272)	1:945:A:LYS:N	1:945:A:LYS:CA	1:945:A:LYS:C	1:946:A:SER:N	16	2.63
(1,196)	1:891:A:ARG:C	1:892:A:GLN:N	1:892:A:GLN:CA	1:892:A:GLN:C	6	2.63
(1,100)	1:797:A:ARG:C	1:798:A:ILE:N	1:798:A:ILE:CA	1:798:A:ILE:C	13	2.62
(1,223)	1:914:A:CYS:C	1:915:A:LEU:N	1:915:A:LEU:CA	1:915:A:LEU:C	9	2.6
(1,162)	1:860:A:ALA:N	1:860:A:ALA:CA	1:860:A:ALA:C	1:861:A:LEU:N	3	2.58
(1,239)	1:928:A:THR:C	1:929:A:LEU:N	1:929:A:LEU:CA	1:929:A:LEU:C	20	2.57
(1,237)	1:923:A:LEU:C	1:924:A:SER:N	1:924:A:SER:CA	1:924:A:SER:C	17	2.57
(1,118)	1:834:A:PRO:N	1:834:A:PRO:CA	1:834:A:PRO:C	1:835:A:ILE:N	1	2.57
(1,98)	1:796:A:ALA:C	1:797:A:ARG:N	1:797:A:ARG:CA	1:797:A:ARG:C	3	2.57
(1,269)	1:943:A:VAL:C	1:944:A:ARG:N	1:944:A:ARG:CA	1:944:A:ARG:C	10	2.56
(1,183)	1:885:A:ARG:N	1:885:A:ARG:CA	1:885:A:ARG:C	1:886:A:LEU:N	15	2.56
(1,163)	1:860:A:ALA:C	1:861:A:LEU:N	1:861:A:LEU:CA	1:861:A:LEU:C	13	2.56
(1,95)	1:795:A:LEU:N	1:795:A:LEU:CA	1:795:A:LEU:C	1:796:A:ALA:N	5	2.56
(1,52)	1:746:A:VAL:N	1:746:A:VAL:CA	1:746:A:VAL:C	1:747:A:LEU:N	18	2.56
(1,103)	1:799:A:TYR:N	1:799:A:TYR:CA	1:799:A:TYR:C	1:800:A:LEU:N	11	2.55
(1,225)	1:915:A:LEU:C	1:916:A:GLU:N	1:916:A:GLU:CA	1:916:A:GLU:C	3	2.54
(1,25)	1:722:A:LEU:N	1:722:A:LEU:CA	1:722:A:LEU:C	1:723:A:GLU:N	13	2.54
(1,261)	1:939:A:TYR:C	1:940:A:ALA:N	1:940:A:ALA:CA	1:940:A:ALA:C	15	2.53
(1,83)	1:782:A:VAL:C	1:783:A:HIS:N	1:783:A:HIS:CA	1:783:A:HIS:C	13	2.52
(1,276)	1:947:A:ARG:N	1:947:A:ARG:CA	1:947:A:ARG:C	1:948:A:ASP:N	14	2.51
(1,190)	1:888:A:GLN:C	1:889:A:ARG:N	1:889:A:ARG:CA	1:889:A:ARG:C	8	2.51
(1,257)	1:937:A:THR:C	1:938:A:LEU:N	1:938:A:LEU:CA	1:938:A:LEU:C	4	2.5
(1,137)	1:843:A:GLN:C	1:844:A:LEU:N	1:844:A:LEU:CA	1:844:A:LEU:C	1	2.5
(1,99)	1:797:A:ARG:N	1:797:A:ARG:CA	1:797:A:ARG:C	1:798:A:ILE:N	14	2.5
(1,272)	1:945:A:LYS:N	1:945:A:LYS:CA	1:945:A:LYS:C	1:946:A:SER:N	15	2.49
(1,92)	1:793:A:ALA:C	1:794:A:LEU:N	1:794:A:LEU:CA	1:794:A:LEU:C	14	2.49
(1,75)	1:771:A:GLY:C	1:772:A:ILE:N	1:772:A:ILE:CA	1:772:A:ILE:C	3	2.49
(1,63)	1:760:A:ARG:C	1:761:A:ALA:N	1:761:A:ALA:CA	1:761:A:ALA:C	4	2.49
(1,228)	1:917:A:SER:N	1:917:A:SER:CA	1:917:A:SER:C	1:918:A:GLY:N	3	2.48
(1,59)	1:749:A:THR:C	1:750:A:ASP:N	1:750:A:ASP:CA	1:750:A:ASP:C	14	2.48
(1,29)	1:724:A:THR:N	1:724:A:THR:CA	1:724:A:THR:C	1:725:A:SER:N	10	2.48
(1,195)	1:891:A:ARG:N	1:891:A:ARG:CA	1:891:A:ARG:C	1:892:A:GLN:N	12	2.47
(1,151)	1:853:A:THR:C	1:854:A:ALA:N	1:854:A:ALA:CA	1:854:A:ALA:C	3	2.46
(1,251)	1:934:A:GLN:C	1:935:A:THR:N	1:935:A:THR:CA	1:935:A:THR:C	15	2.45
(1,241)	1:929:A:LEU:C	1:930:A:ASP:N	1:930:A:ASP:CA	1:930:A:ASP:C	3	2.45
(1,110)	1:827:A:ILE:C	1:828:A:LEU:N	1:828:A:LEU:CA	1:828:A:LEU:C	4	2.45
(1,259)	1:938:A:LEU:C	1:939:A:TYR:N	1:939:A:TYR:CA	1:939:A:TYR:C	3	2.43
(1,223)	1:914:A:CYS:C	1:915:A:LEU:N	1:915:A:LEU:CA	1:915:A:LEU:C	20	2.43

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,179)	1:874:A:SER:N	1:874:A:SER:CA	1:874:A:SER:C	1:875:A:ASP:N	15	2.43
(1,128)	1:839:A:LEU:N	1:839:A:LEU:CA	1:839:A:LEU:C	1:840:A:LEU:N	6	2.43
(1,113)	1:829:A:VAL:N	1:829:A:VAL:CA	1:829:A:VAL:C	1:830:A:VAL:N	16	2.43
(1,195)	1:891:A:ARG:N	1:891:A:ARG:CA	1:891:A:ARG:C	1:892:A:GLN:N	3	2.42
(1,92)	1:793:A:ALA:C	1:794:A:LEU:N	1:794:A:LEU:CA	1:794:A:LEU:C	1	2.41
(1,87)	1:790:A:GLU:C	1:791:A:LEU:N	1:791:A:LEU:CA	1:791:A:LEU:C	18	2.41
(1,20)	1:719:A:CYS:C	1:720:A:GLN:N	1:720:A:GLN:CA	1:720:A:GLN:C	17	2.41
(1,24)	1:721:A:PHE:C	1:722:A:LEU:N	1:722:A:LEU:CA	1:722:A:LEU:C	9	2.4
(1,231)	1:920:A:ASP:C	1:921:A:SER:N	1:921:A:SER:CA	1:921:A:SER:C	20	2.39
(1,161)	1:859:A:ASP:C	1:860:A:ALA:N	1:860:A:ALA:CA	1:860:A:ALA:C	15	2.39
(1,239)	1:928:A:THR:C	1:929:A:LEU:N	1:929:A:LEU:CA	1:929:A:LEU:C	10	2.38
(1,258)	1:938:A:LEU:N	1:938:A:LEU:CA	1:938:A:LEU:C	1:939:A:TYR:N	18	2.36
(1,187)	1:887:A:THR:N	1:887:A:THR:CA	1:887:A:THR:C	1:888:A:GLN:N	12	2.36
(1,260)	1:939:A:TYR:N	1:939:A:TYR:CA	1:939:A:TYR:C	1:940:A:ALA:N	19	2.35
(1,19)	1:719:A:CYS:N	1:719:A:CYS:CA	1:719:A:CYS:C	1:720:A:GLN:N	19	2.35
(1,221)	1:913:A:ARG:C	1:914:A:CYS:N	1:914:A:CYS:CA	1:914:A:CYS:C	10	2.34
(1,44)	1:734:A:THR:C	1:735:A:THR:N	1:735:A:THR:CA	1:735:A:THR:C	4	2.34
(1,183)	1:885:A:ARG:N	1:885:A:ARG:CA	1:885:A:ARG:C	1:886:A:LEU:N	10	2.33
(1,119)	1:834:A:PRO:C	1:835:A:ILE:N	1:835:A:ILE:CA	1:835:A:ILE:C	19	2.33
(1,129)	1:839:A:LEU:C	1:840:A:LEU:N	1:840:A:LEU:CA	1:840:A:LEU:C	8	2.32
(1,92)	1:793:A:ALA:C	1:794:A:LEU:N	1:794:A:LEU:CA	1:794:A:LEU:C	8	2.32
(1,4)	1:708:A:ARG:N	1:708:A:ARG:CA	1:708:A:ARG:C	1:709:A:CYS:N	11	2.32
(1,263)	1:940:A:ALA:C	1:941:A:GLU:N	1:941:A:GLU:CA	1:941:A:GLU:C	1	2.31
(1,138)	1:844:A:LEU:N	1:844:A:LEU:CA	1:844:A:LEU:C	1:845:A:GLY:N	18	2.31
(1,196)	1:891:A:ARG:C	1:892:A:GLN:N	1:892:A:GLN:CA	1:892:A:GLN:C	8	2.3
(1,195)	1:891:A:ARG:N	1:891:A:ARG:CA	1:891:A:ARG:C	1:892:A:GLN:N	11	2.3
(1,132)	1:841:A:ALA:N	1:841:A:ALA:CA	1:841:A:ALA:C	1:842:A:ASP:N	6	2.3
(1,98)	1:796:A:ALA:C	1:797:A:ARG:N	1:797:A:ARG:CA	1:797:A:ARG:C	14	2.3
(1,273)	1:945:A:LYS:C	1:946:A:SER:N	1:946:A:SER:CA	1:946:A:SER:C	12	2.29
(1,166)	1:862:A:ASN:N	1:862:A:ASN:CA	1:862:A:ASN:C	1:863:A:VAL:N	18	2.28
(1,130)	1:840:A:LEU:N	1:840:A:LEU:CA	1:840:A:LEU:C	1:841:A:ALA:N	7	2.28
(1,123)	1:836:A:ASN:C	1:837:A:ARG:N	1:837:A:ARG:CA	1:837:A:ARG:C	19	2.28
(1,147)	1:851:A:CYS:C	1:852:A:LYS:N	1:852:A:LYS:CA	1:852:A:LYS:C	5	2.27
(1,30)	1:724:A:THR:C	1:725:A:SER:N	1:725:A:SER:CA	1:725:A:SER:C	3	2.27
(1,24)	1:721:A:PHE:C	1:722:A:LEU:N	1:722:A:LEU:CA	1:722:A:LEU:C	14	2.27
(1,206)	1:901:A:GLY:N	1:901:A:GLY:CA	1:901:A:GLY:C	1:902:A:VAL:N	1	2.25
(1,107)	1:826:A:MET:N	1:826:A:MET:CA	1:826:A:MET:C	1:827:A:ILE:N	16	2.25
(1,240)	1:929:A:LEU:N	1:929:A:LEU:CA	1:929:A:LEU:C	1:930:A:ASP:N	13	2.24
(1,249)	1:933:A:LYS:C	1:934:A:GLN:N	1:934:A:GLN:CA	1:934:A:GLN:C	5	2.22
(1,219)	1:912:A:GLN:C	1:913:A:ARG:N	1:913:A:ARG:CA	1:913:A:ARG:C	15	2.22
(1,3)	1:707:A:LYS:C	1:708:A:ARG:N	1:708:A:ARG:CA	1:708:A:ARG:C	19	2.22
(1,193)	1:890:A:ILE:N	1:890:A:ILE:CA	1:890:A:ILE:C	1:891:A:ARG:N	14	2.21
(1,180)	1:874:A:SER:C	1:875:A:ASP:N	1:875:A:ASP:CA	1:875:A:ASP:C	8	2.21
(1,71)	1:764:A:THR:C	1:765:A:PHE:N	1:765:A:PHE:CA	1:765:A:PHE:C	11	2.21
(1,225)	1:915:A:LEU:C	1:916:A:GLU:N	1:916:A:GLU:CA	1:916:A:GLU:C	2	2.2
(1,202)	1:899:A:VAL:N	1:899:A:VAL:CA	1:899:A:VAL:C	1:900:A:ILE:N	2	2.2
(1,117)	1:831:A:ASP:N	1:831:A:ASP:CA	1:831:A:ASP:C	1:832:A:ASP:N	4	2.2
(1,233)	1:921:A:SER:C	1:922:A:CYS:N	1:922:A:CYS:CA	1:922:A:CYS:C	2	2.18
(1,163)	1:860:A:ALA:C	1:861:A:LEU:N	1:861:A:LEU:CA	1:861:A:LEU:C	3	2.18
(1,118)	1:834:A:PRO:N	1:834:A:PRO:CA	1:834:A:PRO:C	1:835:A:ILE:N	14	2.18
(1,83)	1:782:A:VAL:C	1:783:A:HIS:N	1:783:A:HIS:CA	1:783:A:HIS:C	17	2.18

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,271)	1:944:A:ARG:C	1:945:A:LYS:N	1:945:A:LYS:CA	1:945:A:LYS:C	16	2.17
(1,259)	1:938:A:LEU:C	1:939:A:TYR:N	1:939:A:TYR:CA	1:939:A:TYR:C	4	2.17
(1,259)	1:938:A:LEU:C	1:939:A:TYR:N	1:939:A:TYR:CA	1:939:A:TYR:C	14	2.17
(1,32)	1:725:A:SER:C	1:726:A:LEU:N	1:726:A:LEU:CA	1:726:A:LEU:C	10	2.15
(1,32)	1:725:A:SER:C	1:726:A:LEU:N	1:726:A:LEU:CA	1:726:A:LEU:C	15	2.15
(1,170)	1:864:A:LEU:N	1:864:A:LEU:CA	1:864:A:LEU:C	1:865:A:SER:N	16	2.14
(1,163)	1:860:A:ALA:C	1:861:A:LEU:N	1:861:A:LEU:CA	1:861:A:LEU:C	9	2.14
(1,248)	1:933:A:LYS:N	1:933:A:LYS:CA	1:933:A:LYS:C	1:934:A:GLN:N	8	2.13
(1,181)	1:875:A:ASP:N	1:875:A:ASP:CA	1:875:A:ASP:C	1:876:A:VAL:N	14	2.11
(1,128)	1:839:A:LEU:N	1:839:A:LEU:CA	1:839:A:LEU:C	1:840:A:LEU:N	7	2.11
(1,239)	1:928:A:THR:C	1:929:A:LEU:N	1:929:A:LEU:CA	1:929:A:LEU:C	5	2.1
(1,132)	1:841:A:ALA:N	1:841:A:ALA:CA	1:841:A:ALA:C	1:842:A:ASP:N	3	2.1
(1,132)	1:841:A:ALA:N	1:841:A:ALA:CA	1:841:A:ALA:C	1:842:A:ASP:N	14	2.1
(1,92)	1:793:A:ALA:C	1:794:A:LEU:N	1:794:A:LEU:CA	1:794:A:LEU:C	11	2.1
(1,25)	1:722:A:LEU:N	1:722:A:LEU:CA	1:722:A:LEU:C	1:723:A:GLU:N	14	2.1
(1,138)	1:844:A:LEU:N	1:844:A:LEU:CA	1:844:A:LEU:C	1:845:A:GLY:N	13	2.09
(1,92)	1:793:A:ALA:C	1:794:A:LEU:N	1:794:A:LEU:CA	1:794:A:LEU:C	7	2.09
(1,126)	1:838:A:ARG:N	1:838:A:ARG:CA	1:838:A:ARG:C	1:839:A:LEU:N	20	2.08
(1,101)	1:798:A:ILE:N	1:798:A:ILE:CA	1:798:A:ILE:C	1:799:A:TYR:N	19	2.08
(1,31)	1:725:A:SER:N	1:725:A:SER:CA	1:725:A:SER:C	1:726:A:LEU:N	13	2.08
(1,24)	1:721:A:PHE:C	1:722:A:LEU:N	1:722:A:LEU:CA	1:722:A:LEU:C	6	2.08
(1,232)	1:921:A:SER:N	1:921:A:SER:CA	1:921:A:SER:C	1:922:A:CYS:N	12	2.06
(1,130)	1:840:A:LEU:N	1:840:A:LEU:CA	1:840:A:LEU:C	1:841:A:ALA:N	16	2.06
(1,119)	1:834:A:PRO:C	1:835:A:ILE:N	1:835:A:ILE:CA	1:835:A:ILE:C	18	2.06
(1,40)	1:732:A:VAL:C	1:733:A:VAL:N	1:733:A:VAL:CA	1:733:A:VAL:C	11	2.06
(1,272)	1:945:A:LYS:N	1:945:A:LYS:CA	1:945:A:LYS:C	1:946:A:SER:N	13	2.05
(1,137)	1:843:A:GLN:C	1:844:A:LEU:N	1:844:A:LEU:CA	1:844:A:LEU:C	19	2.05
(1,136)	1:843:A:GLN:N	1:843:A:GLN:CA	1:843:A:GLN:C	1:844:A:LEU:N	18	2.05
(1,20)	1:719:A:CYS:C	1:720:A:GLN:N	1:720:A:GLN:CA	1:720:A:GLN:C	6	2.05
(1,138)	1:844:A:LEU:N	1:844:A:LEU:CA	1:844:A:LEU:C	1:845:A:GLY:N	10	2.04
(1,84)	1:783:A:HIS:N	1:783:A:HIS:CA	1:783:A:HIS:C	1:784:A:SER:N	11	2.04
(1,227)	1:916:A:GLU:C	1:917:A:SER:N	1:917:A:SER:CA	1:917:A:SER:C	5	2.03
(1,13)	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:CA	1:716:A:ALA:C	1:717:A:SER:N	15	2.03
(1,135)	1:842:A:ASP:C	1:843:A:GLN:N	1:843:A:GLN:CA	1:843:A:GLN:C	8	2.02
(1,248)	1:933:A:LYS:N	1:933:A:LYS:CA	1:933:A:LYS:C	1:934:A:GLN:N	15	2.01
(1,194)	1:890:A:ILE:C	1:891:A:ARG:N	1:891:A:ARG:CA	1:891:A:ARG:C	15	2.01
(1,235)	1:922:A:CYS:C	1:923:A:LEU:N	1:923:A:LEU:CA	1:923:A:LEU:C	6	2.0
(1,85)	1:783:A:HIS:C	1:784:A:SER:N	1:784:A:SER:CA	1:784:A:SER:C	8	2.0
(1,46)	1:741:A:PRO:N	1:741:A:PRO:CA	1:741:A:PRO:C	1:742:A:THR:N	2	2.0
(1,42)	1:733:A:VAL:C	1:734:A:THR:N	1:734:A:THR:CA	1:734:A:THR:C	3	1.98
(1,123)	1:836:A:ASN:C	1:837:A:ARG:N	1:837:A:ARG:CA	1:837:A:ARG:C	10	1.97
(1,206)	1:901:A:GLY:N	1:901:A:GLY:CA	1:901:A:GLY:C	1:902:A:VAL:N	20	1.96
(1,159)	1:858:A:VAL:C	1:859:A:ASP:N	1:859:A:ASP:CA	1:859:A:ASP:C	18	1.96
(1,32)	1:725:A:SER:C	1:726:A:LEU:N	1:726:A:LEU:CA	1:726:A:LEU:C	16	1.96
(1,248)	1:933:A:LYS:N	1:933:A:LYS:CA	1:933:A:LYS:C	1:934:A:GLN:N	6	1.95
(1,275)	1:946:A:SER:C	1:947:A:ARG:N	1:947:A:ARG:CA	1:947:A:ARG:C	13	1.94
(1,261)	1:939:A:TYR:C	1:940:A:ALA:N	1:940:A:ALA:CA	1:940:A:ALA:C	6	1.94
(1,124)	1:837:A:ARG:N	1:837:A:ARG:CA	1:837:A:ARG:C	1:838:A:ARG:N	9	1.93
(1,167)	1:862:A:ASN:C	1:863:A:VAL:N	1:863:A:VAL:CA	1:863:A:VAL:C	1	1.92
(1,26)	1:722:A:LEU:C	1:723:A:GLU:N	1:723:A:GLU:CA	1:723:A:GLU:C	19	1.92
(1,195)	1:891:A:ARG:N	1:891:A:ARG:CA	1:891:A:ARG:C	1:892:A:GLN:N	7	1.91

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,90)	1:792:A:PRO:C	1:793:A:ALA:N	1:793:A:ALA:CA	1:793:A:ALA:C	8	1.91
(1,263)	1:940:A:ALA:C	1:941:A:GLU:N	1:941:A:GLU:CA	1:941:A:GLU:C	19	1.9
(1,240)	1:929:A:LEU:N	1:929:A:LEU:CA	1:929:A:LEU:C	1:930:A:ASP:N	4	1.9
(1,24)	1:721:A:PHE:C	1:722:A:LEU:N	1:722:A:LEU:CA	1:722:A:LEU:C	18	1.9
(1,130)	1:840:A:LEU:N	1:840:A:LEU:CA	1:840:A:LEU:C	1:841:A:ALA:N	18	1.89
(1,42)	1:733:A:VAL:C	1:734:A:THR:N	1:734:A:THR:CA	1:734:A:THR:C	20	1.89
(1,5)	1:708:A:ARG:C	1:709:A:CYS:N	1:709:A:CYS:CA	1:709:A:CYS:C	19	1.88
(1,131)	1:840:A:LEU:C	1:841:A:ALA:N	1:841:A:ALA:CA	1:841:A:ALA:C	13	1.87
(1,50)	1:745:A:ASP:N	1:745:A:ASP:CA	1:745:A:ASP:C	1:746:A:VAL:N	19	1.87
(1,138)	1:844:A:LEU:N	1:844:A:LEU:CA	1:844:A:LEU:C	1:845:A:GLY:N	6	1.86
(1,222)	1:914:A:CYS:N	1:914:A:CYS:CA	1:914:A:CYS:C	1:915:A:LEU:N	14	1.85
(1,137)	1:843:A:GLN:C	1:844:A:LEU:N	1:844:A:LEU:CA	1:844:A:LEU:C	10	1.85
(1,97)	1:796:A:ALA:N	1:796:A:ALA:CA	1:796:A:ALA:C	1:797:A:ARG:N	17	1.85
(1,38)	1:731:A:ILE:C	1:732:A:VAL:N	1:732:A:VAL:CA	1:732:A:VAL:C	8	1.85
(1,223)	1:914:A:CYS:C	1:915:A:LEU:N	1:915:A:LEU:CA	1:915:A:LEU:C	10	1.84
(1,222)	1:914:A:CYS:N	1:914:A:CYS:CA	1:914:A:CYS:C	1:915:A:LEU:N	7	1.84
(1,262)	1:940:A:ALA:N	1:940:A:ALA:CA	1:940:A:ALA:C	1:941:A:GLU:N	5	1.83
(1,205)	1:900:A:ILE:C	1:901:A:GLY:N	1:901:A:GLY:CA	1:901:A:GLY:C	1	1.83
(1,190)	1:888:A:GLN:C	1:889:A:ARG:N	1:889:A:ARG:CA	1:889:A:ARG:C	15	1.82
(1,201)	1:898:A:PRO:C	1:899:A:VAL:N	1:899:A:VAL:CA	1:899:A:VAL:C	13	1.81
(1,178)	1:873:A:LEU:C	1:874:A:SER:N	1:874:A:SER:CA	1:874:A:SER:C	14	1.81
(1,166)	1:862:A:ASN:N	1:862:A:ASN:CA	1:862:A:ASN:C	1:863:A:VAL:N	3	1.81
(1,152)	1:854:A:ALA:N	1:854:A:ALA:CA	1:854:A:ALA:C	1:855:A:ASN:N	1	1.81
(1,137)	1:843:A:GLN:C	1:844:A:LEU:N	1:844:A:LEU:CA	1:844:A:LEU:C	4	1.8
(1,182)	1:884:A:TYR:C	1:885:A:ARG:N	1:885:A:ARG:CA	1:885:A:ARG:C	1	1.79
(1,167)	1:862:A:ASN:C	1:863:A:VAL:N	1:863:A:VAL:CA	1:863:A:VAL:C	13	1.79
(1,212)	1:904:A:ALA:N	1:904:A:ALA:CA	1:904:A:ALA:C	1:905:A:ASN:N	7	1.77
(1,29)	1:724:A:THR:N	1:724:A:THR:CA	1:724:A:THR:C	1:725:A:SER:N	8	1.77
(1,270)	1:944:A:ARG:N	1:944:A:ARG:CA	1:944:A:ARG:C	1:945:A:LYS:N	20	1.76
(1,248)	1:933:A:LYS:N	1:933:A:LYS:CA	1:933:A:LYS:C	1:934:A:GLN:N	4	1.76
(1,185)	1:886:A:LEU:N	1:886:A:LEU:CA	1:886:A:LEU:C	1:887:A:THR:N	15	1.76
(1,158)	1:858:A:VAL:N	1:858:A:VAL:CA	1:858:A:VAL:C	1:859:A:ASP:N	14	1.76
(1,111)	1:828:A:LEU:N	1:828:A:LEU:CA	1:828:A:LEU:C	1:829:A:VAL:N	20	1.76
(1,30)	1:724:A:THR:C	1:725:A:SER:N	1:725:A:SER:CA	1:725:A:SER:C	10	1.76
(1,27)	1:723:A:GLU:N	1:723:A:GLU:CA	1:723:A:GLU:C	1:724:A:THR:N	18	1.76
(1,20)	1:719:A:CYS:C	1:720:A:GLN:N	1:720:A:GLN:CA	1:720:A:GLN:C	13	1.76
(1,256)	1:937:A:THR:N	1:937:A:THR:CA	1:937:A:THR:C	1:938:A:LEU:N	14	1.75
(1,191)	1:889:A:ARG:N	1:889:A:ARG:CA	1:889:A:ARG:C	1:890:A:ILE:N	16	1.75
(1,166)	1:862:A:ASN:N	1:862:A:ASN:CA	1:862:A:ASN:C	1:863:A:VAL:N	16	1.75
(1,55)	1:747:A:LEU:C	1:748:A:ILE:N	1:748:A:ILE:CA	1:748:A:ILE:C	9	1.75
(1,144)	1:850:A:GLN:N	1:850:A:GLN:CA	1:850:A:GLN:C	1:851:A:CYS:N	1	1.74
(1,107)	1:826:A:MET:N	1:826:A:MET:CA	1:826:A:MET:C	1:827:A:ILE:N	7	1.74
(1,216)	1:911:A:LYS:N	1:911:A:LYS:CA	1:911:A:LYS:C	1:912:A:GLN:N	15	1.73
(1,25)	1:722:A:LEU:N	1:722:A:LEU:CA	1:722:A:LEU:C	1:723:A:GLU:N	20	1.73
(1,104)	1:824:A:ASP:C	1:825:A:MET:N	1:825:A:MET:CA	1:825:A:MET:C	16	1.72
(1,261)	1:939:A:TYR:C	1:940:A:ALA:N	1:940:A:ALA:CA	1:940:A:ALA:C	9	1.71
(1,256)	1:937:A:THR:N	1:937:A:THR:CA	1:937:A:THR:C	1:938:A:LEU:N	15	1.69
(1,204)	1:900:A:ILE:N	1:900:A:ILE:CA	1:900:A:ILE:C	1:901:A:GLY:N	14	1.69
(1,164)	1:861:A:LEU:N	1:861:A:LEU:CA	1:861:A:LEU:C	1:862:A:ASN:N	16	1.69
(1,130)	1:840:A:LEU:N	1:840:A:LEU:CA	1:840:A:LEU:C	1:841:A:ALA:N	4	1.69
(1,12)	1:715:A:ASN:C	1:716:A:ALA:N	1:716:A:ALA:CA	1:716:A:ALA:C	4	1.69

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,170)	1:864:A:LEU:N	1:864:A:LEU:CA	1:864:A:LEU:C	1:865:A:SER:N	2	1.68
(1,119)	1:834:A:PRO:C	1:835:A:ILE:N	1:835:A:ILE:CA	1:835:A:ILE:C	3	1.68
(1,166)	1:862:A:ASN:N	1:862:A:ASN:CA	1:862:A:ASN:C	1:863:A:VAL:N	4	1.67
(1,142)	1:846:A:SER:N	1:846:A:SER:CA	1:846:A:SER:C	1:847:A:LEU:N	3	1.64
(1,83)	1:782:A:VAL:C	1:783:A:HIS:N	1:783:A:HIS:CA	1:783:A:HIS:C	3	1.64
(1,259)	1:938:A:LEU:C	1:939:A:TYR:N	1:939:A:TYR:CA	1:939:A:TYR:C	17	1.63
(1,201)	1:898:A:PRO:C	1:899:A:VAL:N	1:899:A:VAL:CA	1:899:A:VAL:C	12	1.62
(1,119)	1:834:A:PRO:C	1:835:A:ILE:N	1:835:A:ILE:CA	1:835:A:ILE:C	15	1.62
(1,200)	1:898:A:PRO:N	1:898:A:PRO:CA	1:898:A:PRO:C	1:899:A:VAL:N	12	1.61
(1,185)	1:886:A:LEU:N	1:886:A:LEU:CA	1:886:A:LEU:C	1:887:A:THR:N	12	1.61
(1,182)	1:884:A:TYR:C	1:885:A:ARG:N	1:885:A:ARG:CA	1:885:A:ARG:C	12	1.61
(1,162)	1:860:A:ALA:N	1:860:A:ALA:CA	1:860:A:ALA:C	1:861:A:LEU:N	10	1.61
(1,111)	1:828:A:LEU:N	1:828:A:LEU:CA	1:828:A:LEU:C	1:829:A:VAL:N	11	1.61
(1,95)	1:795:A:LEU:N	1:795:A:LEU:CA	1:795:A:LEU:C	1:796:A:ALA:N	10	1.61
(1,57)	1:748:A:ILE:C	1:749:A:THR:N	1:749:A:THR:CA	1:749:A:THR:C	5	1.61
(1,50)	1:745:A:ASP:N	1:745:A:ASP:CA	1:745:A:ASP:C	1:746:A:VAL:N	20	1.61
(1,42)	1:733:A:VAL:C	1:734:A:THR:N	1:734:A:THR:CA	1:734:A:THR:C	10	1.61
(1,227)	1:916:A:GLU:C	1:917:A:SER:N	1:917:A:SER:CA	1:917:A:SER:C	6	1.6
(1,114)	1:829:A:VAL:C	1:830:A:VAL:N	1:830:A:VAL:CA	1:830:A:VAL:C	9	1.6
(1,99)	1:797:A:ARG:N	1:797:A:ARG:CA	1:797:A:ARG:C	1:798:A:ILE:N	8	1.6
(1,276)	1:947:A:ARG:N	1:947:A:ARG:CA	1:947:A:ARG:C	1:948:A:ASP:N	17	1.59
(1,191)	1:889:A:ARG:N	1:889:A:ARG:CA	1:889:A:ARG:C	1:890:A:ILE:N	5	1.59
(1,136)	1:843:A:GLN:N	1:843:A:GLN:CA	1:843:A:GLN:C	1:844:A:LEU:N	4	1.59
(1,271)	1:944:A:ARG:C	1:945:A:LYS:N	1:945:A:LYS:CA	1:945:A:LYS:C	15	1.58
(1,149)	1:852:A:LYS:C	1:853:A:THR:N	1:853:A:THR:CA	1:853:A:THR:C	2	1.58
(1,32)	1:725:A:SER:C	1:726:A:LEU:N	1:726:A:LEU:CA	1:726:A:LEU:C	1	1.58
(1,161)	1:859:A:ASP:C	1:860:A:ALA:N	1:860:A:ALA:CA	1:860:A:ALA:C	20	1.57
(1,120)	1:835:A:ILE:N	1:835:A:ILE:CA	1:835:A:ILE:C	1:836:A:ASN:N	15	1.57
(1,269)	1:943:A:VAL:C	1:944:A:ARG:N	1:944:A:ARG:CA	1:944:A:ARG:C	16	1.56
(1,155)	1:855:A:ASN:C	1:856:A:ASP:N	1:856:A:ASP:CA	1:856:A:ASP:C	13	1.56
(1,183)	1:885:A:ARG:N	1:885:A:ARG:CA	1:885:A:ARG:C	1:886:A:LEU:N	5	1.54
(1,126)	1:838:A:ARG:N	1:838:A:ARG:CA	1:838:A:ARG:C	1:839:A:LEU:N	19	1.54
(1,19)	1:719:A:CYS:N	1:719:A:CYS:CA	1:719:A:CYS:C	1:720:A:GLN:N	12	1.54
(1,134)	1:842:A:ASP:N	1:842:A:ASP:CA	1:842:A:ASP:C	1:843:A:GLN:N	15	1.53
(1,111)	1:828:A:LEU:N	1:828:A:LEU:CA	1:828:A:LEU:C	1:829:A:VAL:N	16	1.53
(1,260)	1:939:A:TYR:N	1:939:A:TYR:CA	1:939:A:TYR:C	1:940:A:ALA:N	13	1.52
(1,259)	1:938:A:LEU:C	1:939:A:TYR:N	1:939:A:TYR:CA	1:939:A:TYR:C	6	1.51
(1,189)	1:888:A:GLN:N	1:888:A:GLN:CA	1:888:A:GLN:C	1:889:A:ARG:N	13	1.51
(1,149)	1:852:A:LYS:C	1:853:A:THR:N	1:853:A:THR:CA	1:853:A:THR:C	3	1.51
(1,32)	1:725:A:SER:C	1:726:A:LEU:N	1:726:A:LEU:CA	1:726:A:LEU:C	4	1.49
(1,26)	1:722:A:LEU:C	1:723:A:GLU:N	1:723:A:GLU:CA	1:723:A:GLU:C	9	1.49
(1,194)	1:890:A:ILE:C	1:891:A:ARG:N	1:891:A:ARG:CA	1:891:A:ARG:C	18	1.48
(1,183)	1:885:A:ARG:N	1:885:A:ARG:CA	1:885:A:ARG:C	1:886:A:LEU:N	14	1.48
(1,39)	1:732:A:VAL:N	1:732:A:VAL:CA	1:732:A:VAL:C	1:733:A:VAL:N	5	1.48
(1,257)	1:937:A:THR:C	1:938:A:LEU:N	1:938:A:LEU:CA	1:938:A:LEU:C	2	1.47
(1,242)	1:930:A:ASP:N	1:930:A:ASP:CA	1:930:A:ASP:C	1:931:A:VAL:N	16	1.47
(1,223)	1:914:A:CYS:C	1:915:A:LEU:N	1:915:A:LEU:CA	1:915:A:LEU:C	4	1.47
(1,181)	1:875:A:ASP:N	1:875:A:ASP:CA	1:875:A:ASP:C	1:876:A:VAL:N	15	1.46
(1,87)	1:790:A:GLU:C	1:791:A:LEU:N	1:791:A:LEU:CA	1:791:A:LEU:C	12	1.46
(1,146)	1:851:A:CYS:N	1:851:A:CYS:CA	1:851:A:CYS:C	1:852:A:LYS:N	1	1.45
(1,119)	1:834:A:PRO:C	1:835:A:ILE:N	1:835:A:ILE:CA	1:835:A:ILE:C	10	1.45

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,29)	1:724:A:THR:N	1:724:A:THR:CA	1:724:A:THR:C	1:725:A:SER:N	12	1.45
(1,255)	1:936:A:LEU:C	1:937:A:THR:N	1:937:A:THR:CA	1:937:A:THR:C	4	1.44
(1,50)	1:745:A:ASP:N	1:745:A:ASP:CA	1:745:A:ASP:C	1:746:A:VAL:N	11	1.44
(1,38)	1:731:A:ILE:C	1:732:A:VAL:N	1:732:A:VAL:CA	1:732:A:VAL:C	20	1.44
(1,261)	1:939:A:TYR:C	1:940:A:ALA:N	1:940:A:ALA:CA	1:940:A:ALA:C	3	1.43
(1,157)	1:857:A:GLY:C	1:858:A:VAL:N	1:858:A:VAL:CA	1:858:A:VAL:C	18	1.41
(1,255)	1:936:A:LEU:C	1:937:A:THR:N	1:937:A:THR:CA	1:937:A:THR:C	11	1.4
(1,221)	1:913:A:ARG:C	1:914:A:CYS:N	1:914:A:CYS:CA	1:914:A:CYS:C	2	1.4
(1,145)	1:850:A:GLN:C	1:851:A:CYS:N	1:851:A:CYS:CA	1:851:A:CYS:C	12	1.4
(1,97)	1:796:A:ALA:N	1:796:A:ALA:CA	1:796:A:ALA:C	1:797:A:ARG:N	10	1.4
(1,87)	1:790:A:GLU:C	1:791:A:LEU:N	1:791:A:LEU:CA	1:791:A:LEU:C	14	1.4
(1,245)	1:931:A:VAL:C	1:932:A:ILE:N	1:932:A:ILE:CA	1:932:A:ILE:C	16	1.39
(1,205)	1:900:A:ILE:C	1:901:A:GLY:N	1:901:A:GLY:CA	1:901:A:GLY:C	7	1.39
(1,111)	1:828:A:LEU:N	1:828:A:LEU:CA	1:828:A:LEU:C	1:829:A:VAL:N	10	1.39
(1,73)	1:765:A:PHE:C	1:766:A:CYS:N	1:766:A:CYS:CA	1:766:A:CYS:C	13	1.39
(1,60)	1:750:A:ASP:N	1:750:A:ASP:CA	1:750:A:ASP:C	1:751:A:GLU:N	13	1.39
(1,29)	1:724:A:THR:N	1:724:A:THR:CA	1:724:A:THR:C	1:725:A:SER:N	1	1.39
(1,270)	1:944:A:ARG:N	1:944:A:ARG:CA	1:944:A:ARG:C	1:945:A:LYS:N	16	1.38
(1,79)	1:780:A:GLU:C	1:781:A:TRP:N	1:781:A:TRP:CA	1:781:A:TRP:C	6	1.38
(1,137)	1:843:A:GLN:C	1:844:A:LEU:N	1:844:A:LEU:CA	1:844:A:LEU:C	17	1.37
(1,261)	1:939:A:TYR:C	1:940:A:ALA:N	1:940:A:ALA:CA	1:940:A:ALA:C	10	1.36
(1,123)	1:836:A:ASN:C	1:837:A:ARG:N	1:837:A:ARG:CA	1:837:A:ARG:C	5	1.36
(1,95)	1:795:A:LEU:N	1:795:A:LEU:CA	1:795:A:LEU:C	1:796:A:ALA:N	13	1.36
(1,275)	1:946:A:SER:C	1:947:A:ARG:N	1:947:A:ARG:CA	1:947:A:ARG:C	15	1.35
(1,193)	1:890:A:ILE:N	1:890:A:ILE:CA	1:890:A:ILE:C	1:891:A:ARG:N	20	1.35
(1,162)	1:860:A:ALA:N	1:860:A:ALA:CA	1:860:A:ALA:C	1:861:A:LEU:N	2	1.35
(1,52)	1:746:A:VAL:N	1:746:A:VAL:CA	1:746:A:VAL:C	1:747:A:LEU:N	1	1.35
(1,257)	1:937:A:THR:C	1:938:A:LEU:N	1:938:A:LEU:CA	1:938:A:LEU:C	6	1.34
(1,137)	1:843:A:GLN:C	1:844:A:LEU:N	1:844:A:LEU:CA	1:844:A:LEU:C	20	1.34
(1,92)	1:793:A:ALA:C	1:794:A:LEU:N	1:794:A:LEU:CA	1:794:A:LEU:C	16	1.34
(1,25)	1:722:A:LEU:N	1:722:A:LEU:CA	1:722:A:LEU:C	1:723:A:GLU:N	17	1.34
(1,23)	1:721:A:PHE:N	1:721:A:PHE:CA	1:721:A:PHE:C	1:722:A:LEU:N	20	1.34
(1,21)	1:720:A:GLN:N	1:720:A:GLN:CA	1:720:A:GLN:C	1:721:A:PHE:N	10	1.34
(1,222)	1:914:A:CYS:N	1:914:A:CYS:CA	1:914:A:CYS:C	1:915:A:LEU:N	5	1.33
(1,97)	1:796:A:ALA:N	1:796:A:ALA:CA	1:796:A:ALA:C	1:797:A:ARG:N	7	1.33
(1,166)	1:862:A:ASN:N	1:862:A:ASN:CA	1:862:A:ASN:C	1:863:A:VAL:N	14	1.32
(1,110)	1:827:A:ILE:C	1:828:A:LEU:N	1:828:A:LEU:CA	1:828:A:LEU:C	9	1.32
(1,62)	1:755:A:LYS:N	1:755:A:LYS:CA	1:755:A:LYS:C	1:756:A:LYS:N	1	1.29
(1,233)	1:921:A:SER:C	1:922:A:CYS:N	1:922:A:CYS:CA	1:922:A:CYS:C	3	1.28
(1,161)	1:859:A:ASP:C	1:860:A:ALA:N	1:860:A:ALA:CA	1:860:A:ALA:C	17	1.28
(1,152)	1:854:A:ALA:N	1:854:A:ALA:CA	1:854:A:ALA:C	1:855:A:ASN:N	14	1.27
(1,142)	1:846:A:SER:N	1:846:A:SER:CA	1:846:A:SER:C	1:847:A:LEU:N	6	1.27
(1,22)	1:720:A:GLN:C	1:721:A:PHE:N	1:721:A:PHE:CA	1:721:A:PHE:C	16	1.27
(1,270)	1:944:A:ARG:N	1:944:A:ARG:CA	1:944:A:ARG:C	1:945:A:LYS:N	6	1.26
(1,205)	1:900:A:ILE:C	1:901:A:GLY:N	1:901:A:GLY:CA	1:901:A:GLY:C	4	1.26
(1,160)	1:859:A:ASP:N	1:859:A:ASP:CA	1:859:A:ASP:C	1:860:A:ALA:N	10	1.26
(1,224)	1:915:A:LEU:N	1:915:A:LEU:CA	1:915:A:LEU:C	1:916:A:GLU:N	5	1.25
(1,114)	1:829:A:VAL:C	1:830:A:VAL:N	1:830:A:VAL:CA	1:830:A:VAL:C	13	1.25
(1,60)	1:750:A:ASP:N	1:750:A:ASP:CA	1:750:A:ASP:C	1:751:A:GLU:N	2	1.25
(1,52)	1:746:A:VAL:N	1:746:A:VAL:CA	1:746:A:VAL:C	1:747:A:LEU:N	12	1.25
(1,183)	1:885:A:ARG:N	1:885:A:ARG:CA	1:885:A:ARG:C	1:886:A:LEU:N	17	1.24

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,99)	1:797:A:ARG:N	1:797:A:ARG:CA	1:797:A:ARG:C	1:798:A:ILE:N	1	1.24
(1,98)	1:796:A:ALA:C	1:797:A:ARG:N	1:797:A:ARG:CA	1:797:A:ARG:C	12	1.24
(1,36)	1:730:A:GLY:C	1:731:A:ILE:N	1:731:A:ILE:CA	1:731:A:ILE:C	19	1.24
(1,27)	1:723:A:GLU:N	1:723:A:GLU:CA	1:723:A:GLU:C	1:724:A:THR:N	13	1.23
(1,274)	1:946:A:SER:N	1:946:A:SER:CA	1:946:A:SER:C	1:947:A:ARG:N	12	1.22
(1,189)	1:888:A:GLN:N	1:888:A:GLN:CA	1:888:A:GLN:C	1:889:A:ARG:N	12	1.22
(1,138)	1:844:A:LEU:N	1:844:A:LEU:CA	1:844:A:LEU:C	1:845:A:GLY:N	11	1.22
(1,30)	1:724:A:THR:C	1:725:A:SER:N	1:725:A:SER:CA	1:725:A:SER:C	19	1.22
(1,26)	1:722:A:LEU:C	1:723:A:GLU:N	1:723:A:GLU:CA	1:723:A:GLU:C	20	1.22
(1,187)	1:887:A:THR:N	1:887:A:THR:CA	1:887:A:THR:C	1:888:A:GLN:N	14	1.2
(1,66)	1:762:A:VAL:N	1:762:A:VAL:CA	1:762:A:VAL:C	1:763:A:VAL:N	10	1.2
(1,137)	1:843:A:GLN:C	1:844:A:LEU:N	1:844:A:LEU:CA	1:844:A:LEU:C	13	1.19
(1,40)	1:732:A:VAL:C	1:733:A:VAL:N	1:733:A:VAL:CA	1:733:A:VAL:C	13	1.19
(1,225)	1:915:A:LEU:C	1:916:A:GLU:N	1:916:A:GLU:CA	1:916:A:GLU:C	12	1.18
(1,225)	1:915:A:LEU:C	1:916:A:GLU:N	1:916:A:GLU:CA	1:916:A:GLU:C	14	1.18
(1,223)	1:914:A:CYS:C	1:915:A:LEU:N	1:915:A:LEU:CA	1:915:A:LEU:C	11	1.17
(1,165)	1:861:A:LEU:C	1:862:A:ASN:N	1:862:A:ASN:CA	1:862:A:ASN:C	6	1.17
(1,162)	1:860:A:ALA:N	1:860:A:ALA:CA	1:860:A:ALA:C	1:861:A:LEU:N	16	1.17
(1,123)	1:836:A:ASN:C	1:837:A:ARG:N	1:837:A:ARG:CA	1:837:A:ARG:C	11	1.17
(1,170)	1:864:A:LEU:N	1:864:A:LEU:CA	1:864:A:LEU:C	1:865:A:SER:N	11	1.16
(1,138)	1:844:A:LEU:N	1:844:A:LEU:CA	1:844:A:LEU:C	1:845:A:GLY:N	14	1.16
(1,24)	1:721:A:PHE:C	1:722:A:LEU:N	1:722:A:LEU:CA	1:722:A:LEU:C	8	1.16
(1,260)	1:939:A:TYR:N	1:939:A:TYR:CA	1:939:A:TYR:C	1:940:A:ALA:N	8	1.15
(1,129)	1:839:A:LEU:C	1:840:A:LEU:N	1:840:A:LEU:CA	1:840:A:LEU:C	2	1.15
(1,26)	1:722:A:LEU:C	1:723:A:GLU:N	1:723:A:GLU:CA	1:723:A:GLU:C	14	1.15
(1,21)	1:720:A:GLN:N	1:720:A:GLN:CA	1:720:A:GLN:C	1:721:A:PHE:N	19	1.15
(1,16)	1:717:A:SER:C	1:718:A:LEU:N	1:718:A:LEU:CA	1:718:A:LEU:C	16	1.14
(1,250)	1:934:A:GLN:N	1:934:A:GLN:CA	1:934:A:GLN:C	1:935:A:THR:N	8	1.13
(1,199)	1:895:A:LEU:N	1:895:A:LEU:CA	1:895:A:LEU:C	1:896:A:THR:N	1	1.13
(1,113)	1:829:A:VAL:N	1:829:A:VAL:CA	1:829:A:VAL:C	1:830:A:VAL:N	1	1.13
(1,219)	1:912:A:GLN:C	1:913:A:ARG:N	1:913:A:ARG:CA	1:913:A:ARG:C	7	1.12
(1,140)	1:845:A:GLY:N	1:845:A:GLY:CA	1:845:A:GLY:C	1:846:A:SER:N	7	1.12
(1,127)	1:838:A:ARG:C	1:839:A:LEU:N	1:839:A:LEU:CA	1:839:A:LEU:C	11	1.12
(1,267)	1:942:A:ARG:C	1:943:A:VAL:N	1:943:A:VAL:CA	1:943:A:VAL:C	6	1.11
(1,44)	1:734:A:THR:C	1:735:A:THR:N	1:735:A:THR:CA	1:735:A:THR:C	19	1.11
(1,175)	1:872:A:VAL:N	1:872:A:VAL:CA	1:872:A:VAL:C	1:873:A:LEU:N	18	1.1
(1,25)	1:722:A:LEU:N	1:722:A:LEU:CA	1:722:A:LEU:C	1:723:A:GLU:N	19	1.1
(1,250)	1:934:A:GLN:N	1:934:A:GLN:CA	1:934:A:GLN:C	1:935:A:THR:N	19	1.08
(1,232)	1:921:A:SER:N	1:921:A:SER:CA	1:921:A:SER:C	1:922:A:CYS:N	17	1.08
(1,239)	1:928:A:THR:C	1:929:A:LEU:N	1:929:A:LEU:CA	1:929:A:LEU:C	11	1.07
(1,204)	1:900:A:ILE:N	1:900:A:ILE:CA	1:900:A:ILE:C	1:901:A:GLY:N	8	1.07
(1,141)	1:845:A:GLY:C	1:846:A:SER:N	1:846:A:SER:CA	1:846:A:SER:C	3	1.06
(1,116)	1:830:A:VAL:C	1:831:A:ASP:N	1:831:A:ASP:CA	1:831:A:ASP:C	20	1.06
(1,275)	1:946:A:SER:C	1:947:A:ARG:N	1:947:A:ARG:CA	1:947:A:ARG:C	14	1.05
(1,129)	1:839:A:LEU:C	1:840:A:LEU:N	1:840:A:LEU:CA	1:840:A:LEU:C	16	1.05
(1,20)	1:719:A:CYS:C	1:720:A:GLN:N	1:720:A:GLN:CA	1:720:A:GLN:C	9	1.05
(1,66)	1:762:A:VAL:N	1:762:A:VAL:CA	1:762:A:VAL:C	1:763:A:VAL:N	9	1.04
(1,34)	1:726:A:LEU:C	1:727:A:GLN:N	1:727:A:GLN:CA	1:727:A:GLN:C	15	1.04
(1,188)	1:887:A:THR:C	1:888:A:GLN:N	1:888:A:GLN:CA	1:888:A:GLN:C	11	1.02
(1,162)	1:860:A:ALA:N	1:860:A:ALA:CA	1:860:A:ALA:C	1:861:A:LEU:N	1	1.02
(1,31)	1:725:A:SER:N	1:725:A:SER:CA	1:725:A:SER:C	1:726:A:LEU:N	5	1.02

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,28)	1:723:A:GLU:C	1:724:A:THR:N	1:724:A:THR:CA	1:724:A:THR:C	6	1.01
(1,16)	1:717:A:SER:C	1:718:A:LEU:N	1:718:A:LEU:CA	1:718:A:LEU:C	10	1.01