



Full wwPDB NMR Structure Validation Report ⓘ

Mar 8, 2026 – 03:40 AM UTC

PDB ID : 2LNS / pdb_00002lns
BMRB ID : 18178
Title : Solution structure of AGR2 residues 41-175
Authors : Patel, P.; Clarke, C.J.; Barraclough, D.L.; Rudland, P.S.; Barraclough, R.;
Lian, L.
Deposited on : 2012-01-04

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

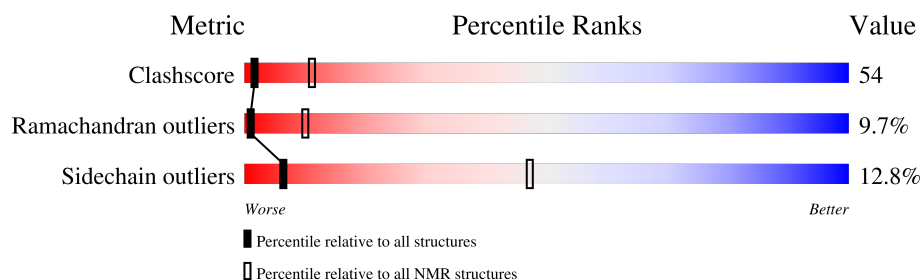
1 Overall quality at a glance

The following experimental techniques were used to determine the structure:

SOLUTION NMR

The overall completeness of chemical shifts assignment is 24%.

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	140	 27% 59% 13% .
1	B	140	 27% 59% 11% ..

2 Ensemble composition and analysis

This entry contains 10 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*.

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:36-A:175 (140)	0.13	2
2	B:36-B:48, B:52-B:175 (137)	0.13	5

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 1 clusters and 2 single-model clusters were found.

Cluster number	Models
1	1, 2, 4, 5, 6, 7, 9, 10
Single-model clusters	3; 8

3 Entry composition

There is only 1 type of molecule in this entry. The entry contains 4596 atoms, of which 2316 are hydrogens and 0 are deuteriums.

- Molecule 1 is a protein called Anterior gradient protein 2 homolog.

Mol	Chain	Residues	Atoms						Trace
1	A	140	Total	C	H	N	O	S	0
			2298	733	1158	189	214	4	
1	B	140	Total	C	H	N	O	S	0
			2298	733	1158	189	214	4	

There are 10 discrepancies between the modelled and reference sequences:

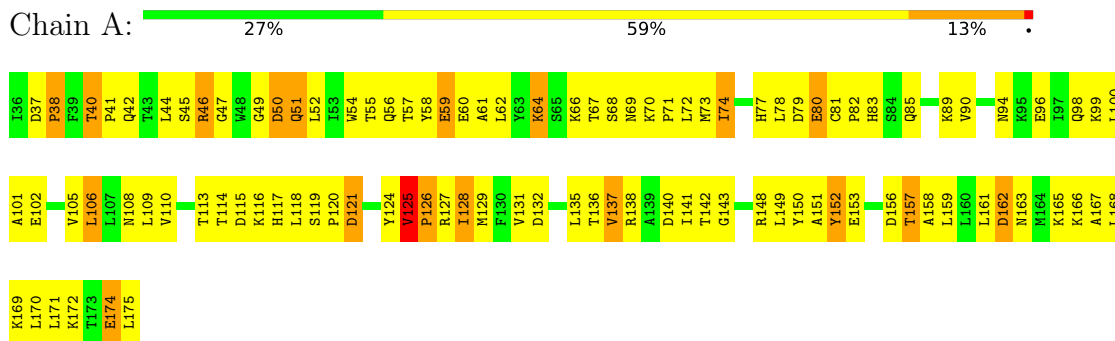
Chain	Residue	Modelled	Actual	Comment	Reference
A	36	ILE	-	expression tag	UNP O95994
A	37	ASP	-	expression tag	UNP O95994
A	38	PRO	-	expression tag	UNP O95994
A	39	PHE	-	expression tag	UNP O95994
A	40	THR	-	expression tag	UNP O95994
B	36	ILE	-	expression tag	UNP O95994
B	37	ASP	-	expression tag	UNP O95994
B	38	PRO	-	expression tag	UNP O95994
B	39	PHE	-	expression tag	UNP O95994
B	40	THR	-	expression tag	UNP O95994

4 Residue-property plots

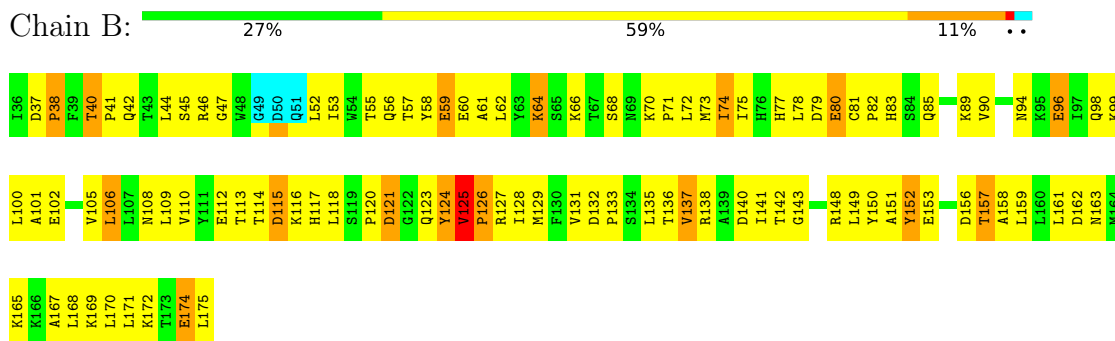
4.1 Average score per residue in the NMR ensemble

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: Anterior gradient protein 2 homolog



- Molecule 1: Anterior gradient protein 2 homolog

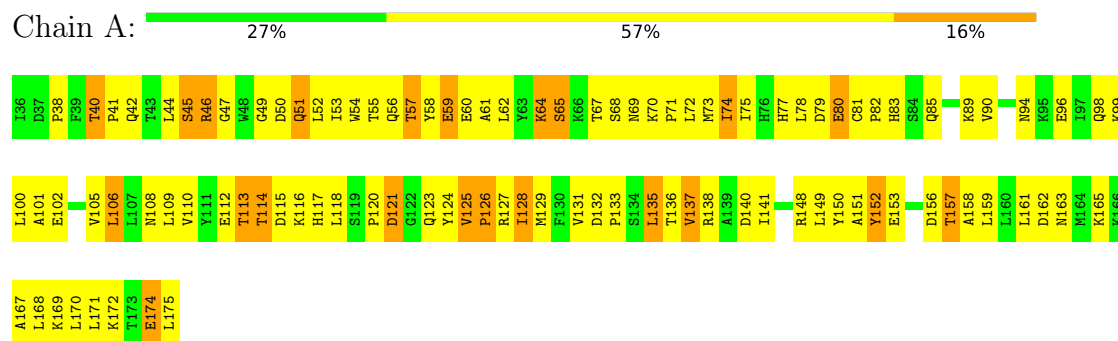


4.2 Scores per residue for each member of the ensemble

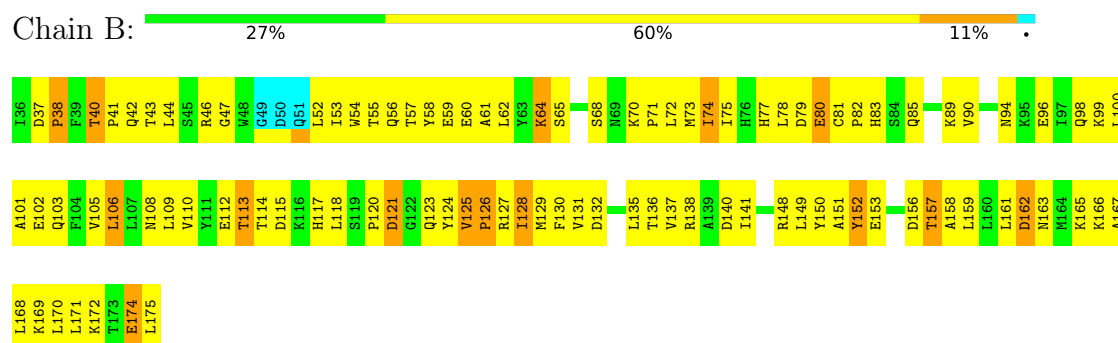
Colouring as in section 4.1 above.

4.2.1 Score per residue for model 1

- Molecule 1: Anterior gradient protein 2 homolog

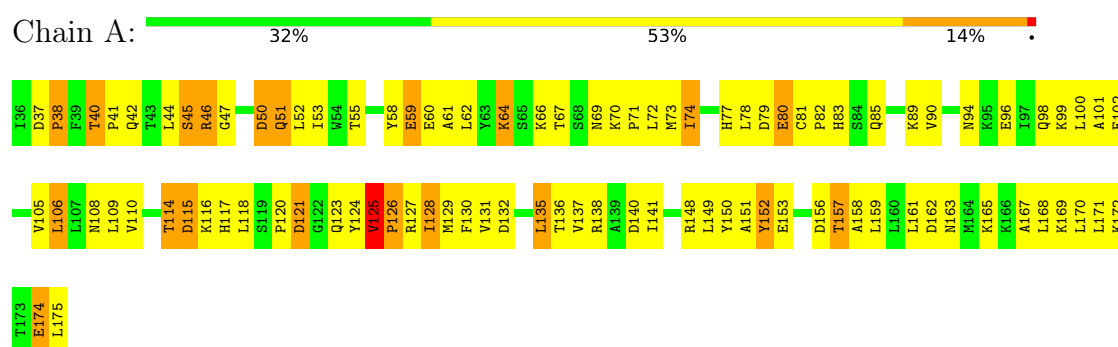


- Molecule 1: Anterior gradient protein 2 homolog

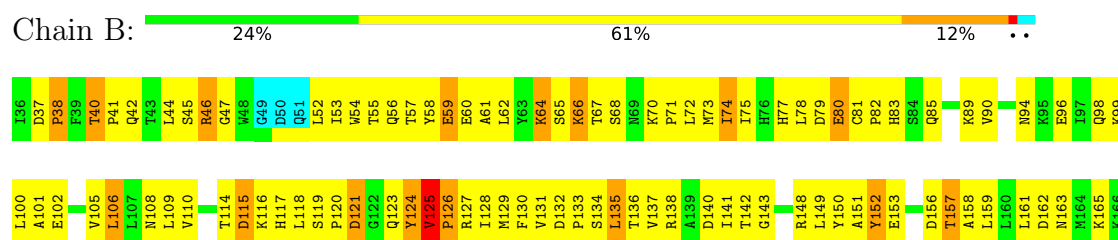


4.2.2 Score per residue for model 2 (medoid)

- Molecule 1: Anterior gradient protein 2 homolog



- Molecule 1: Anterior gradient protein 2 homolog



K167
L168
K169
L170
L171
K172
T173
E174
L175

4.2.3 Score per residue for model 3

- Molecule 1: Anterior gradient protein 2 homolog

Chain A: 

I36 D37 F38 F39 T40 P41 Q42 T43 T44 L45 R46 R47 G47 W48 G49 D50 Q51 Q52 L52 L53 I53 S119 P120 W54 T55 Y58 E59 E60 A61 L62 T63 S65 S66 T67 S68 S69 K70 P71 L72 L73 M73 I74 H77 L78 D79 E80 C81 P82 H83 S84 Q85 K88 K89 V90 E93 N94 K95 E96 I97 Q98 K99

L100 A101 E102 Q103 T104 V105 L106 L107 M108 L109 V110 T114 D115 K116 H117 L118 L119 S119 P120 D121 D122 Q123 Y124 E125 P126 R127 T128 M129 F130 V131 D132 P133 S134 L135 T136 V137 R138 A139 D140 I141 T142 G143 A151 Y152 E153 D156 T157 A158 L159 L160 L161 D162 N163 M164 K165 K166 A167 L168

K169
L170
L171
K172
T173
E174
L175

- Molecule 1: Anterior gradient protein 2 homolog

Chain B: 

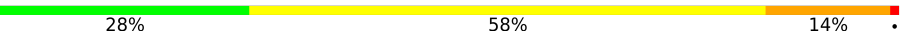
I36 D37 F38 F39 T40 L44 S45 R46 G47 W48 G49 D50 Q51 Q52 L52 L53 I53 S119 P120 W54 T55 Y58 E59 E60 A61 L62 T63 S65 S66 T67 S68 S69 K70 P71 L72 L73 M73 I74 H77 L78 D79 E80 C81 P82 H83 S84 Q85 K88 K89 V90 E93 N94 K95 E96 I97 Q98 K99

L100 A101 E102 Q103 T104 V105 L106 L107 M108 L109 V110 Y111 E112 T113 T114 D115 K116 H117 L118 L119 S119 P120 D121 D122 Q123 Y124 E125 P126 R127 T128 M129 F130 V131 D132 P133 S134 L135 T136 V137 D140 I141 T142 G143 A151 Y152 E153 D156 T157 A158 L159 L160 L161 D162 N163 M164 K165 K166 A167

L168
K169
L170
L171
K172
T173
E174
L175

4.2.4 Score per residue for model 4

- Molecule 1: Anterior gradient protein 2 homolog

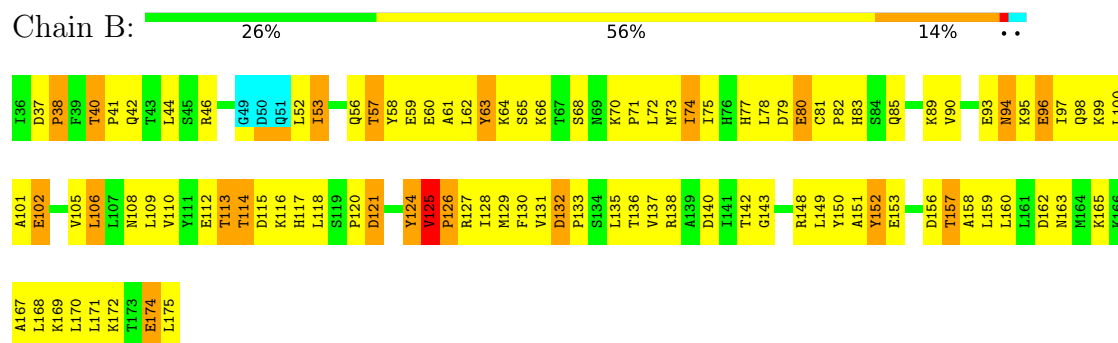
Chain A: 

I36 D37 F38 F39 T40 P41 Q42 T43 T44 L45 R46 R47 G47 W48 G49 D50 Q51 Q52 L52 L53 I53 S119 P120 W54 T55 Y58 E59 E60 A61 L62 T63 S65 S66 T67 S68 S69 K70 P71 L72 L73 M73 I74 H77 L78 D79 E80 C81 P82 H83 S84 Q85 K88 K89 V90 E93 N94 K95 E96 I97 Q98 K99 A101

E102 V105 L106 L107 M108 L109 V110 T114 D115 K116 H117 L118 L119 S119 P120 D121 D122 Q123 Y124 E125 P126 R127 T128 M129 F130 V131 D132 P133 S134 L135 T136 V137 R138 A139 D140 I141 T142 G143 R148 L149 Y150 A151 Y152 E153 D156 T157 A158 L159 L160 L161 D162 N163 M164 K165 K166 A167 L168

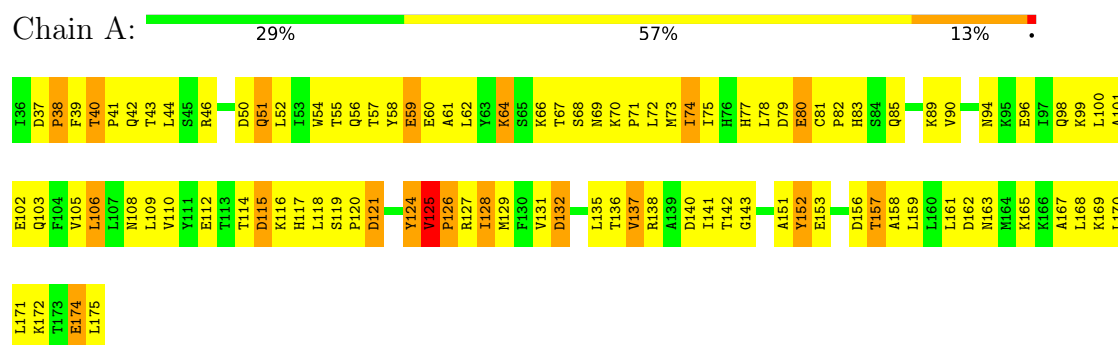
K169
L170
L171
K172
T173
E174
L175

- Molecule 1: Anterior gradient protein 2 homolog

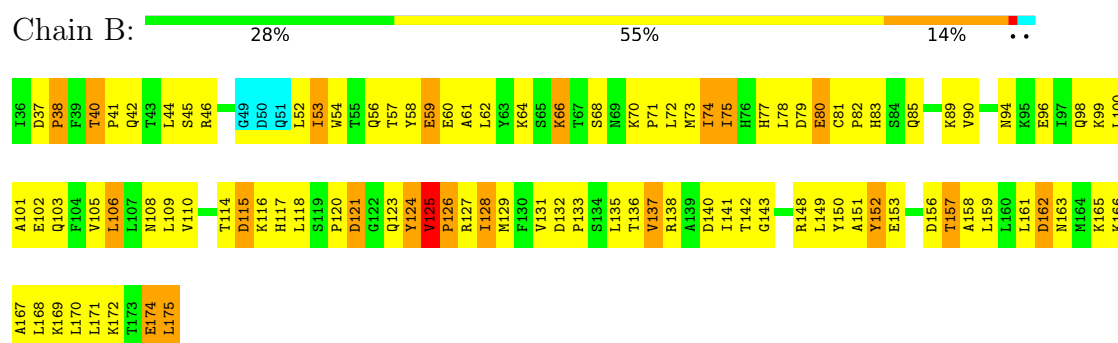


4.2.5 Score per residue for model 5

- Molecule 1: Anterior gradient protein 2 homolog

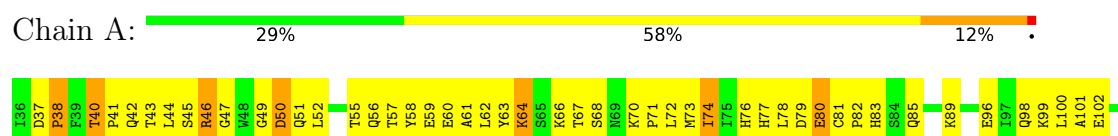


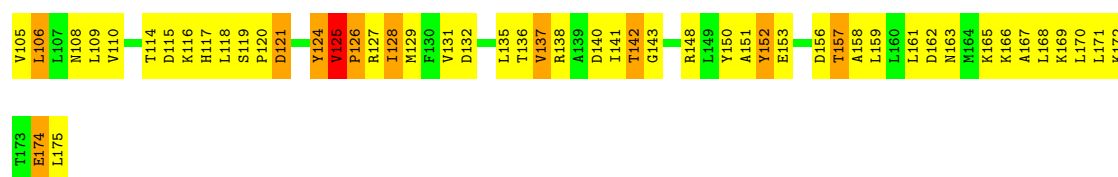
- Molecule 1: Anterior gradient protein 2 homolog



4.2.6 Score per residue for model 6

- Molecule 1: Anterior gradient protein 2 homolog



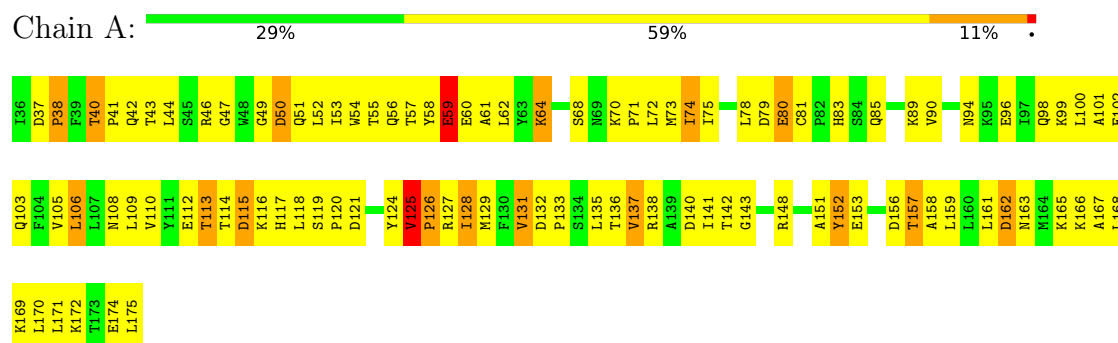


- Molecule 1: Anterior gradient protein 2 homolog

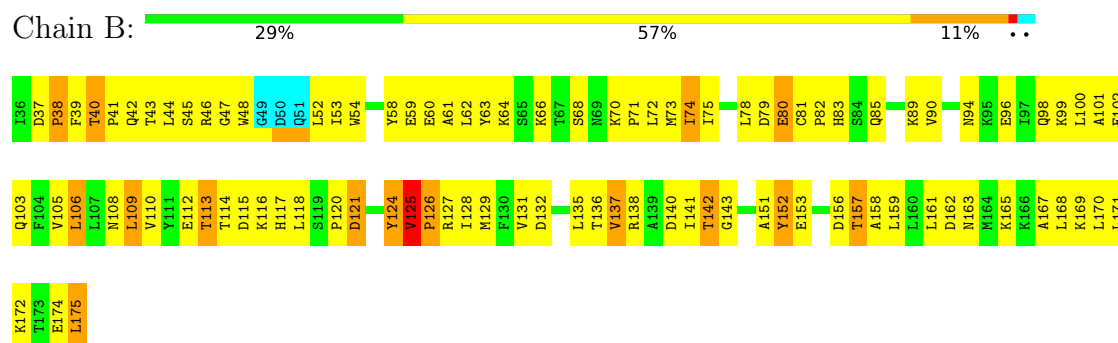


4.2.7 Score per residue for model 7

- Molecule 1: Anterior gradient protein 2 homolog

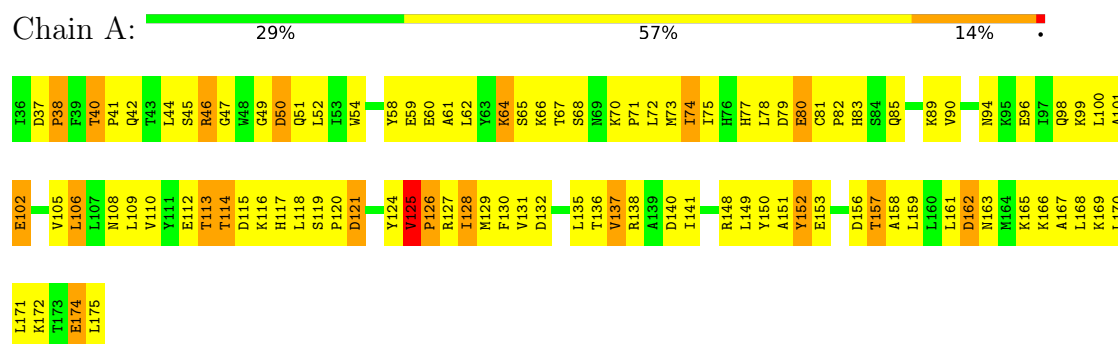


- Molecule 1: Anterior gradient protein 2 homolog

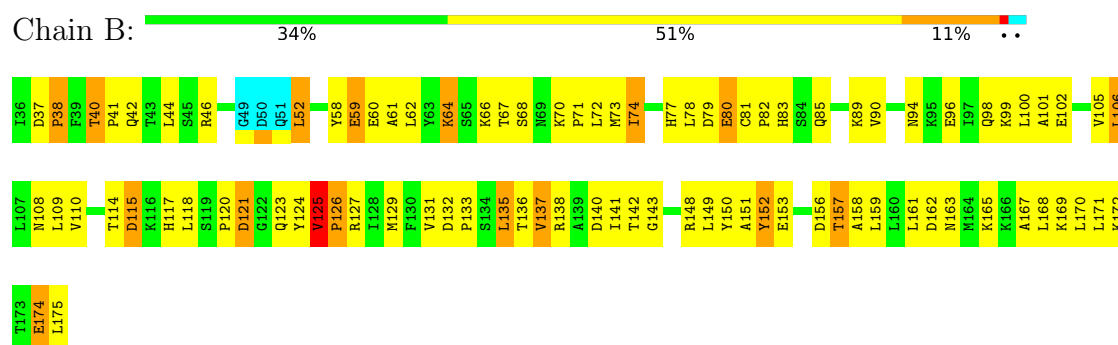


4.2.8 Score per residue for model 8

- Molecule 1: Anterior gradient protein 2 homolog

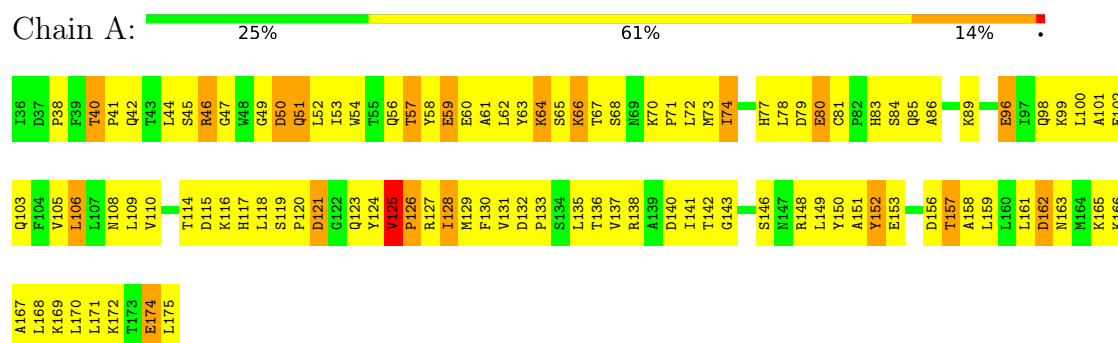


- Molecule 1: Anterior gradient protein 2 homolog

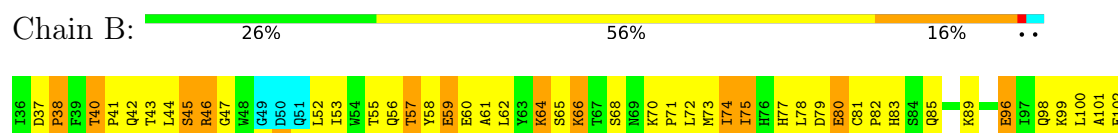


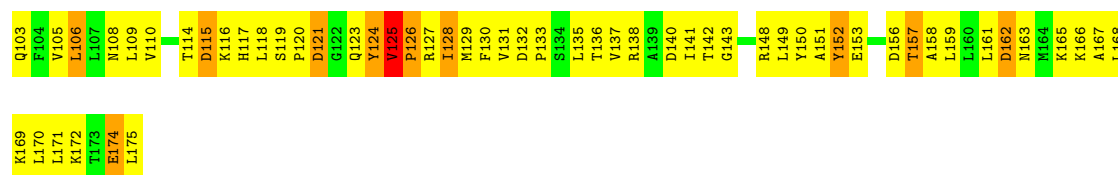
4.2.9 Score per residue for model 9

- Molecule 1: Anterior gradient protein 2 homolog



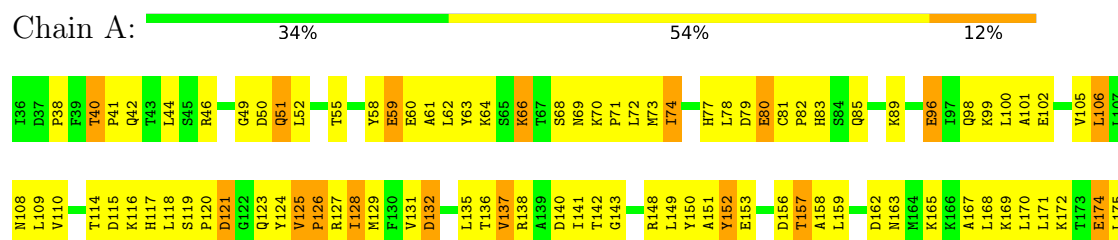
- Molecule 1: Anterior gradient protein 2 homolog



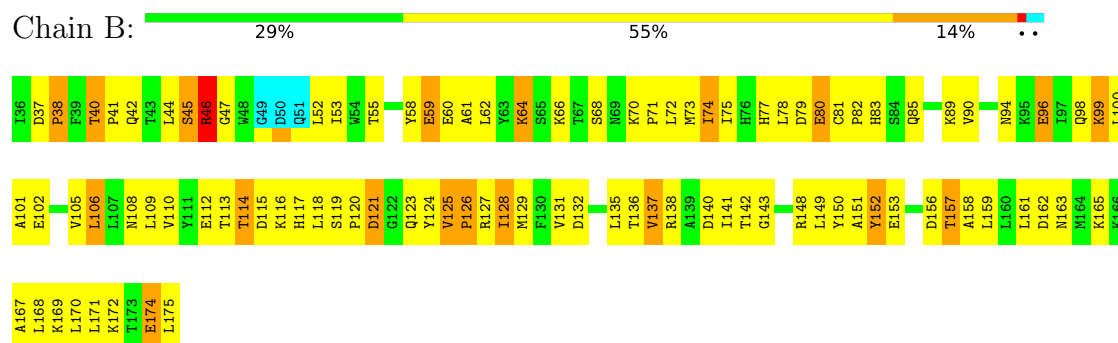


4.2.10 Score per residue for model 10

- Molecule 1: Anterior gradient protein 2 homolog



- Molecule 1: Anterior gradient protein 2 homolog



5 Refinement protocol and experimental data overview

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

Of the 300 calculated structures, 10 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
CNSSOLVE	structure solution	
CNSSOLVE	refinement	

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

Chemical shift file(s)	working_cs.cif
Number of chemical shift lists	1
Total number of shifts	928
Number of shifts mapped to atoms	928
Number of unparsed shifts	0
Number of shifts with mapping errors	0
Number of shifts with mapping warnings	0
Assignment completeness (well-defined parts)	24%

6 Model quality

6.1 Standard geometry

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

There are no bond-length outliers.

There are no bond-angle outliers.

There are no chirality outliers.

There are no planarity outliers.

6.2 Too-close contacts

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	1140	1158	1151	127±7
1	B	1119	1143	1136	125±6
All	All	22590	23010	22870	2454

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 54.

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

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:52:LEU:HD11	1:A:106:LEU:HD11	0.79	1.53	3	10
1:A:64:LYS:NZ	1:B:60:GLU:OE2	0.79	2.16	4	9
1:A:96:GLU:OE2	1:A:165:LYS:NZ	0.78	2.16	8	10
1:A:60:GLU:OE2	1:B:64:LYS:NZ	0.76	2.18	10	10
1:A:64:LYS:NZ	1:B:60:GLU:OE1	0.76	2.18	10	6
1:B:96:GLU:OE2	1:B:165:LYS:NZ	0.75	2.18	8	10
1:B:165:LYS:O	1:B:169:LYS:NZ	0.74	2.21	5	10
1:A:72:LEU:HD23	1:A:73:MET:N	0.73	1.99	6	10
1:A:79:ASP:OD2	1:A:88:LYS:NZ	0.72	2.22	3	1
1:A:60:GLU:OE1	1:B:64:LYS:NZ	0.72	2.23	9	7
1:B:141:ILE:HG23	1:B:141:ILE:O	0.71	1.85	3	9
1:B:72:LEU:HD23	1:B:73:MET:N	0.71	2.00	6	10
1:A:165:LYS:O	1:A:169:LYS:NZ	0.71	2.24	6	10

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:131:VAL:HG13	1:A:136:THR:C	0.70	2.10	9	10
1:A:64:LYS:NZ	1:B:60:GLU:CD	0.70	2.49	1	5
1:A:44:LEU:H	1:A:44:LEU:HD22	0.70	1.47	2	10
1:A:46:ARG:CZ	1:A:50:ASP:OD2	0.70	2.40	9	1
1:A:66:LYS:NZ	1:A:133:PRO:O	0.69	2.25	9	2
1:B:131:VAL:HG13	1:B:136:THR:C	0.69	2.11	9	10
1:B:127:ARG:NH2	1:B:152:TYR:OH	0.69	2.26	6	10
1:A:156:ASP:O	1:A:158:ALA:N	0.69	2.26	6	10
1:B:44:LEU:HD22	1:B:44:LEU:H	0.68	1.48	4	9
1:A:46:ARG:NH2	1:A:50:ASP:OD2	0.68	2.27	9	9
1:A:60:GLU:CD	1:B:64:LYS:NZ	0.68	2.52	9	8
1:B:96:GLU:OE1	1:B:165:LYS:HE2	0.67	1.89	6	9
1:B:128:ILE:HD13	1:B:160:LEU:HD13	0.67	1.66	3	2
1:B:52:LEU:HD11	1:B:106:LEU:HD11	0.67	1.66	3	9
1:A:50:ASP:CG	1:A:51:GLN:NE2	0.67	2.53	5	2
1:A:96:GLU:OE1	1:A:165:LYS:HE2	0.66	1.90	6	8
1:A:174:GLU:C	1:A:175:LEU:HD12	0.66	2.14	6	10
1:A:127:ARG:NH2	1:A:152:TYR:OH	0.66	2.29	7	10
1:B:174:GLU:C	1:B:175:LEU:HD12	0.66	2.15	5	10
1:B:156:ASP:O	1:B:158:ALA:N	0.65	2.29	9	10
1:B:156:ASP:O	1:B:157:THR:C	0.65	2.39	3	10
1:A:98:GLN:C	1:A:102:GLU:OE1	0.65	2.40	6	7
1:B:98:GLN:C	1:B:102:GLU:OE1	0.65	2.40	6	6
1:B:109:LEU:N	1:B:109:LEU:HD12	0.64	2.08	7	9
1:B:53:ILE:HD13	1:B:53:ILE:C	0.64	2.18	3	1
1:A:156:ASP:O	1:A:157:THR:C	0.64	2.40	6	10
1:B:83:HIS:CE1	1:B:124:TYR:OH	0.64	2.50	9	8
1:A:148:ARG:NE	1:A:156:ASP:OD1	0.63	2.30	1	5
1:A:78:LEU:HB2	1:A:80:GLU:OE2	0.63	1.92	8	10
1:A:52:LEU:CD1	1:A:106:LEU:HD11	0.62	2.22	3	1
1:A:83:HIS:CE1	1:A:124:TYR:OH	0.62	2.52	3	7
1:B:115:ASP:C	1:B:117:HIS:H	0.62	2.02	9	10
1:B:78:LEU:HB2	1:B:80:GLU:OE2	0.62	1.94	5	10
1:A:62:LEU:HD23	1:A:72:LEU:HD13	0.62	1.72	10	10
1:A:106:LEU:HD12	1:A:106:LEU:N	0.62	2.09	3	10
1:A:96:GLU:CD	1:A:165:LYS:NZ	0.62	2.58	8	10
1:B:75:ILE:N	1:B:75:ILE:HD12	0.62	2.10	9	7
1:A:46:ARG:NH1	1:A:50:ASP:OD1	0.61	2.33	9	6
1:B:115:ASP:OD1	1:B:117:HIS:HD2	0.61	1.78	6	6
1:B:64:LYS:HE3	1:B:64:LYS:O	0.61	1.94	9	2
1:A:132:ASP:OD1	1:A:138:ARG:HB2	0.61	1.96	6	8

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:172:LYS:NZ	1:A:175:LEU:OXT	0.61	2.32	9	8
1:A:49:GLY:O	1:A:51:GLN:N	0.61	2.34	3	4
1:B:98:GLN:C	1:B:102:GLU:OE2	0.61	2.44	5	1
1:B:132:ASP:OD1	1:B:138:ARG:HB2	0.61	1.96	7	6
1:A:50:ASP:C	1:A:51:GLN:NE2	0.61	2.59	6	3
1:B:62:LEU:HD23	1:B:72:LEU:HD13	0.60	1.73	5	10
1:A:151:ALA:O	1:A:153:GLU:N	0.60	2.34	9	10
1:B:151:ALA:O	1:B:153:GLU:N	0.60	2.34	9	10
1:A:79:ASP:CG	1:A:85:GLN:NE2	0.60	2.59	6	9
1:A:66:LYS:NZ	1:A:69:ASN:OD1	0.60	2.31	5	4
1:A:157:THR:O	1:A:161:LEU:HD23	0.60	1.96	7	7
1:A:50:ASP:CG	1:A:51:GLN:HE22	0.60	2.04	5	2
1:B:131:VAL:CG1	1:B:135:LEU:C	0.60	2.75	7	10
1:B:96:GLU:CD	1:B:165:LYS:NZ	0.60	2.60	10	10
1:B:148:ARG:NE	1:B:156:ASP:OD1	0.60	2.33	10	6
1:B:157:THR:O	1:B:161:LEU:HD23	0.60	1.96	5	7
1:B:66:LYS:O	1:B:66:LYS:NZ	0.60	2.30	3	1
1:A:61:ALA:HB1	1:A:105:VAL:HG11	0.59	1.74	6	10
1:A:99:LYS:O	1:A:103:GLN:NE2	0.59	2.35	3	1
1:B:81:CYS:O	1:B:83:HIS:N	0.59	2.36	9	10
1:B:172:LYS:NZ	1:B:175:LEU:C	0.59	2.60	8	10
1:A:131:VAL:CG1	1:A:135:LEU:C	0.59	2.76	3	10
1:B:106:LEU:HD12	1:B:106:LEU:N	0.59	2.13	9	10
1:A:46:ARG:HH22	1:A:50:ASP:CG	0.59	2.05	3	3
1:A:115:ASP:C	1:A:117:HIS:H	0.59	2.06	5	10
1:A:131:VAL:HG12	1:A:135:LEU:C	0.59	2.23	3	10
1:B:118:LEU:O	1:B:118:LEU:HD23	0.59	1.98	7	10
1:B:78:LEU:C	1:B:78:LEU:HD12	0.59	2.23	4	10
1:B:175:LEU:HD12	1:B:175:LEU:N	0.59	2.13	5	10
1:A:81:CYS:O	1:A:83:HIS:N	0.59	2.36	4	10
1:B:131:VAL:HG12	1:B:136:THR:N	0.59	2.13	3	10
1:A:125:VAL:O	1:A:127:ARG:N	0.59	2.36	7	6
1:A:175:LEU:HD12	1:A:175:LEU:N	0.58	2.13	3	10
1:B:125:VAL:HG23	1:B:126:PRO:HD3	0.58	1.75	6	2
1:B:131:VAL:HG12	1:B:135:LEU:C	0.58	2.24	7	9
1:A:78:LEU:C	1:A:78:LEU:HD12	0.58	2.24	10	9
1:A:78:LEU:HD12	1:A:79:ASP:N	0.58	2.13	10	9
1:A:109:LEU:HD12	1:A:109:LEU:N	0.58	2.14	7	10
1:A:85:GLN:O	1:A:89:LYS:HG3	0.58	1.98	7	10
1:B:61:ALA:HB1	1:B:105:VAL:HG11	0.58	1.76	9	9
1:A:125:VAL:HB	1:A:126:PRO:HD3	0.58	1.74	3	7

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:124:TYR:CD2	1:A:126:PRO:HD2	0.58	2.34	4	7
1:B:127:ARG:NE	1:B:127:ARG:HA	0.58	2.14	6	9
1:A:118:LEU:HD23	1:A:118:LEU:O	0.57	1.99	6	10
1:B:172:LYS:NZ	1:B:175:LEU:OXT	0.57	2.37	5	7
1:A:78:LEU:HG	1:A:125:VAL:CG1	0.57	2.29	7	10
1:B:78:LEU:HG	1:B:125:VAL:CG1	0.57	2.29	10	10
1:A:66:LYS:O	1:A:66:LYS:NZ	0.57	2.33	3	1
1:A:172:LYS:NZ	1:A:175:LEU:C	0.57	2.62	3	10
1:B:79:ASP:CG	1:B:85:GLN:NE2	0.57	2.62	5	9
1:B:115:ASP:OD2	1:B:117:HIS:HD2	0.57	1.81	9	1
1:B:172:LYS:NZ	1:B:175:LEU:O	0.57	2.36	8	8
1:B:134:SER:O	1:B:135:LEU:CB	0.57	2.52	2	1
1:B:85:GLN:O	1:B:89:LYS:HG3	0.57	2.00	1	10
1:A:50:ASP:C	1:A:51:GLN:HE21	0.57	2.07	2	1
1:A:96:GLU:O	1:A:100:LEU:HD23	0.57	2.00	6	9
1:A:131:VAL:HG12	1:A:136:THR:N	0.57	2.14	7	10
1:B:45:SER:O	1:B:46:ARG:NE	0.57	2.38	5	2
1:B:174:GLU:HB3	1:B:175:LEU:HD12	0.56	1.75	5	10
1:B:52:LEU:HD11	1:B:106:LEU:CD1	0.56	2.30	3	1
1:A:58:TYR:O	1:A:59:GLU:C	0.56	2.48	3	10
1:B:96:GLU:O	1:B:100:LEU:HD23	0.56	1.99	6	9
1:A:78:LEU:HD12	1:A:78:LEU:C	0.56	2.26	7	1
1:B:45:SER:C	1:B:46:ARG:HG3	0.56	2.23	10	1
1:A:64:LYS:HE3	1:A:64:LYS:O	0.56	1.99	8	2
1:A:52:LEU:HD13	1:A:102:GLU:HA	0.56	1.75	3	1
1:A:98:GLN:O	1:A:102:GLU:HG3	0.56	2.00	3	1
1:B:52:LEU:O	1:B:53:ILE:HG23	0.56	2.01	4	5
1:A:115:ASP:OD1	1:A:117:HIS:HD2	0.56	1.84	5	5
1:B:58:TYR:O	1:B:59:GLU:C	0.56	2.49	8	10
1:A:128:ILE:N	1:A:128:ILE:HD12	0.56	2.16	9	10
1:B:172:LYS:HZ2	1:B:175:LEU:C	0.55	2.09	3	5
1:A:54:TRP:HE1	1:B:46:ARG:NH2	0.55	1.98	1	2
1:A:78:LEU:CB	1:A:110:VAL:HG12	0.55	2.31	8	10
1:B:78:LEU:HD12	1:B:79:ASP:N	0.55	2.16	6	9
1:A:51:GLN:HE21	1:A:51:GLN:CA	0.55	2.15	2	1
1:B:74:ILE:CD1	1:B:129:MET:HB2	0.55	2.32	7	7
1:B:62:LEU:HA	1:B:72:LEU:CD1	0.55	2.31	1	9
1:A:64:LYS:HZ1	1:B:60:GLU:CD	0.55	2.07	6	2
1:A:127:ARG:HA	1:A:127:ARG:NE	0.55	2.16	5	4
1:B:141:ILE:C	1:B:141:ILE:HD13	0.55	2.26	3	1
1:A:50:ASP:O	1:A:51:GLN:NE2	0.55	2.39	6	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:B:112:GLU:O	1:B:113:THR:HG23	0.55	2.02	7	6
1:A:54:TRP:NE1	1:B:46:ARG:NH2	0.55	2.55	1	2
1:B:125:VAL:HB	1:B:126:PRO:HD3	0.55	1.76	3	8
1:A:46:ARG:HH11	1:A:46:ARG:CG	0.55	2.15	9	1
1:A:46:ARG:HH12	1:A:50:ASP:CG	0.54	2.09	1	2
1:B:72:LEU:HB3	1:B:131:VAL:HB	0.54	1.77	3	10
1:B:78:LEU:CB	1:B:110:VAL:HG12	0.54	2.31	2	10
1:B:64:LYS:NZ	1:B:67:THR:OG1	0.54	2.40	3	1
1:A:174:GLU:HB3	1:A:175:LEU:HD12	0.54	1.78	3	10
1:B:98:GLN:O	1:B:101:ALA:N	0.54	2.40	3	10
1:A:132:ASP:OD1	1:A:138:ARG:HD2	0.54	2.02	10	3
1:A:112:GLU:O	1:A:113:THR:HG23	0.54	2.02	8	3
1:B:96:GLU:OE1	1:B:165:LYS:CE	0.54	2.55	4	9
1:B:157:THR:O	1:B:158:ALA:C	0.54	2.49	3	3
1:A:72:LEU:HB3	1:A:131:VAL:HB	0.54	1.80	10	10
1:B:94:ASN:HB3	1:B:97:ILE:HD12	0.54	1.80	3	1
1:B:58:TYR:HB3	1:B:59:GLU:OE2	0.54	2.02	6	4
1:A:52:LEU:HG	1:A:53:ILE:N	0.54	2.18	7	4
1:B:79:ASP:OD2	1:B:85:GLN:NE2	0.54	2.39	6	6
1:B:99:LYS:HA	1:B:102:GLU:CD	0.54	2.27	3	1
1:A:64:LYS:HE2	1:A:64:LYS:HA	0.54	1.78	6	1
1:A:142:THR:OG1	1:A:143:GLY:N	0.54	2.40	6	7
1:A:74:ILE:CD1	1:A:129:MET:HB2	0.54	2.33	7	10
1:B:128:ILE:HD12	1:B:128:ILE:N	0.54	2.18	7	7
1:B:141:ILE:O	1:B:141:ILE:CG2	0.54	2.55	3	1
1:B:79:ASP:CG	1:B:85:GLN:HE22	0.54	2.11	3	7
1:B:141:ILE:C	1:B:141:ILE:CD1	0.54	2.81	3	1
1:A:60:GLU:CD	1:B:64:LYS:HZ3	0.54	2.11	8	4
1:A:98:GLN:HB3	1:A:102:GLU:OE2	0.53	2.03	8	2
1:A:62:LEU:HA	1:A:72:LEU:CD1	0.53	2.33	6	10
1:A:78:LEU:HD13	1:A:80:GLU:CD	0.53	2.28	9	4
1:A:172:LYS:HZ2	1:A:175:LEU:C	0.53	2.11	9	3
1:B:62:LEU:HD23	1:B:72:LEU:CD1	0.53	2.32	5	8
1:A:46:ARG:NH2	1:B:54:TRP:CD1	0.53	2.77	5	1
1:B:142:THR:OG1	1:B:143:GLY:N	0.53	2.41	6	9
1:A:46:ARG:CZ	1:A:50:ASP:CG	0.53	2.82	9	1
1:B:45:SER:C	1:B:47:GLY:H	0.53	2.12	2	2
1:A:98:GLN:O	1:A:101:ALA:N	0.53	2.41	6	10
1:B:53:ILE:C	1:B:53:ILE:CD1	0.53	2.81	3	1
1:B:66:LYS:NZ	1:B:133:PRO:O	0.53	2.42	5	2
1:A:46:ARG:NH2	1:A:50:ASP:OD1	0.53	2.42	9	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:172:LYS:NZ	1:A:175:LEU:O	0.53	2.41	8	9
1:A:46:ARG:NH2	1:A:50:ASP:CG	0.53	2.67	9	5
1:A:62:LEU:HD23	1:A:72:LEU:CD1	0.52	2.33	10	10
1:A:171:LEU:HD23	1:A:171:LEU:N	0.52	2.19	4	10
1:A:96:GLU:CD	1:A:165:LYS:HZ3	0.52	2.13	5	6
1:B:72:LEU:HD23	1:B:72:LEU:C	0.52	2.28	2	9
1:B:132:ASP:OD1	1:B:138:ARG:HD2	0.52	2.04	1	4
1:B:171:LEU:N	1:B:171:LEU:HD23	0.52	2.19	5	10
1:A:50:ASP:OD1	1:A:51:GLN:NE2	0.52	2.42	5	1
1:A:50:ASP:OD2	1:B:54:TRP:NE1	0.52	2.42	2	1
1:A:46:ARG:NH2	1:B:54:TRP:HE1	0.52	2.03	7	1
1:A:110:VAL:HG23	1:A:110:VAL:O	0.52	2.04	9	5
1:A:125:VAL:CB	1:A:126:PRO:CD	0.52	2.88	3	7
1:A:125:VAL:HG23	1:A:126:PRO:HD3	0.52	1.82	6	3
1:A:72:LEU:HD23	1:A:72:LEU:C	0.52	2.29	10	10
1:B:75:ILE:HG13	1:B:128:ILE:HG13	0.52	1.81	9	7
1:B:96:GLU:CD	1:B:165:LYS:HZ3	0.52	2.13	1	6
1:A:73:MET:N	1:A:73:MET:SD	0.52	2.83	9	10
1:A:96:GLU:OE1	1:A:165:LYS:CE	0.52	2.58	9	8
1:A:99:LYS:N	1:A:102:GLU:OE1	0.52	2.43	6	4
1:A:54:TRP:NE1	1:B:46:ARG:HH21	0.51	2.04	9	2
1:B:134:SER:O	1:B:135:LEU:HB2	0.51	2.05	2	1
1:A:44:LEU:H	1:A:44:LEU:CD2	0.51	2.18	3	8
1:A:51:GLN:OE1	1:B:54:TRP:CZ2	0.51	2.64	1	1
1:A:77:HIS:NE2	1:A:108:ASN:OD1	0.51	2.43	3	9
1:A:156:ASP:C	1:A:158:ALA:N	0.51	2.68	8	7
1:B:78:LEU:HG	1:B:125:VAL:HG12	0.51	1.81	6	1
1:A:68:SER:O	1:A:70:LYS:HG3	0.51	2.06	9	8
1:A:96:GLU:OE1	1:A:165:LYS:NZ	0.51	2.43	3	3
1:B:44:LEU:H	1:B:44:LEU:CD2	0.51	2.19	7	9
1:A:99:LYS:O	1:A:103:GLN:CD	0.51	2.54	3	1
1:B:66:LYS:HA	1:B:66:LYS:HE3	0.51	1.82	9	2
1:A:46:ARG:NH1	1:A:46:ARG:CG	0.51	2.72	9	1
1:A:45:SER:O	1:A:47:GLY:N	0.51	2.43	2	3
1:A:171:LEU:HD23	1:A:171:LEU:H	0.51	1.64	4	10
1:B:73:MET:N	1:B:73:MET:SD	0.51	2.84	8	9
1:B:172:LYS:HG2	1:B:175:LEU:O	0.51	2.05	5	5
1:B:73:MET:SD	1:B:73:MET:N	0.51	2.83	3	1
1:A:54:TRP:CD1	1:B:46:ARG:NH2	0.51	2.79	5	1
1:A:157:THR:O	1:A:158:ALA:C	0.51	2.54	9	3
1:B:66:LYS:HA	1:B:66:LYS:CE	0.51	2.36	9	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:B:124:TYR:CD2	1:B:126:PRO:HD2	0.51	2.40	2	9
1:B:59:GLU:H	1:B:59:GLU:CD	0.51	2.14	8	2
1:B:77:HIS:NE2	1:B:108:ASN:OD1	0.51	2.44	9	9
1:B:99:LYS:N	1:B:102:GLU:OE1	0.51	2.43	6	5
1:B:125:VAL:O	1:B:127:ARG:N	0.51	2.44	3	5
1:A:79:ASP:CG	1:A:85:GLN:HE22	0.51	2.14	6	6
1:B:43:THR:OG1	1:B:46:ARG:HA	0.51	2.06	9	3
1:B:156:ASP:C	1:B:158:ALA:N	0.51	2.69	1	7
1:A:43:THR:OG1	1:A:46:ARG:HA	0.51	2.05	6	3
1:A:148:ARG:C	1:A:150:TYR:H	0.51	2.13	1	7
1:B:53:ILE:HD12	1:B:53:ILE:N	0.51	2.20	3	1
1:A:64:LYS:NZ	1:A:67:THR:OG1	0.50	2.43	3	2
1:B:70:LYS:HB3	1:B:71:PRO:HD2	0.50	1.83	6	4
1:B:44:LEU:H	1:B:44:LEU:HD22	0.50	1.65	7	1
1:B:115:ASP:O	1:B:117:HIS:N	0.50	2.44	9	7
1:B:98:GLN:O	1:B:99:LYS:C	0.50	2.54	3	10
1:B:67:THR:OG1	1:B:68:SER:N	0.50	2.44	3	1
1:A:79:ASP:OD2	1:A:85:GLN:NE2	0.50	2.43	1	4
1:B:171:LEU:HD23	1:B:171:LEU:H	0.50	1.65	1	10
1:B:115:ASP:C	1:B:117:HIS:N	0.50	2.66	9	10
1:A:40:THR:O	1:A:42:GLN:N	0.50	2.45	5	9
1:B:125:VAL:CB	1:B:126:PRO:CD	0.50	2.90	3	6
1:B:64:LYS:CE	1:B:67:THR:OG1	0.50	2.60	2	1
1:B:148:ARG:C	1:B:150:TYR:H	0.50	2.13	10	8
1:B:46:ARG:HH11	1:B:46:ARG:HG2	0.50	1.67	3	1
1:B:78:LEU:HD13	1:B:80:GLU:CD	0.50	2.32	9	3
1:B:64:LYS:HA	1:B:64:LYS:HE3	0.50	1.83	2	2
1:B:40:THR:O	1:B:42:GLN:N	0.50	2.45	5	9
1:B:63:TYR:O	1:B:66:LYS:HB3	0.50	2.07	4	2
1:A:71:PRO:HB2	1:A:73:MET:HE1	0.49	1.84	7	10
1:B:99:LYS:HA	1:B:102:GLU:OE1	0.49	2.07	3	1
1:A:46:ARG:HB2	1:A:46:ARG:CZ	0.49	2.37	4	2
1:A:63:TYR:O	1:A:66:LYS:HB3	0.49	2.07	6	1
1:B:71:PRO:HB2	1:B:73:MET:HE1	0.49	1.84	10	10
1:B:161:LEU:HB3	1:B:165:LYS:HE3	0.49	1.83	3	5
1:B:119:SER:HB3	1:B:129:MET:HE1	0.49	1.83	6	2
1:A:40:THR:C	1:A:42:GLN:H	0.49	2.15	1	10
1:A:64:LYS:HE3	1:A:64:LYS:HA	0.49	1.84	1	2
1:B:40:THR:C	1:B:42:GLN:H	0.49	2.15	5	9
1:A:47:GLY:O	1:A:50:ASP:HB2	0.49	2.07	3	4
1:A:66:LYS:HE3	1:A:66:LYS:HA	0.49	1.84	10	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:119:SER:HB3	1:A:129:MET:CE	0.49	2.37	6	5
1:A:44:LEU:HD22	1:A:44:LEU:N	0.49	2.22	1	6
1:A:52:LEU:HD11	1:A:106:LEU:CD1	0.49	2.37	2	1
1:B:64:LYS:HE3	1:B:67:THR:OG1	0.49	2.08	2	1
1:A:55:THR:HB	1:A:106:LEU:O	0.49	2.08	3	2
1:B:110:VAL:HG23	1:B:110:VAL:O	0.49	2.08	10	4
1:B:59:GLU:CD	1:B:59:GLU:N	0.49	2.69	8	4
1:A:58:TYR:O	1:A:61:ALA:N	0.49	2.46	3	8
1:A:170:LEU:N	1:A:170:LEU:HD12	0.49	2.22	10	10
1:A:58:TYR:HB3	1:A:59:GLU:OE2	0.49	2.07	4	7
1:B:125:VAL:CB	1:B:126:PRO:HD3	0.49	2.38	3	9
1:B:170:LEU:HD12	1:B:170:LEU:N	0.49	2.23	2	10
1:B:52:LEU:HD21	1:B:106:LEU:HD21	0.49	1.84	8	1
1:A:125:VAL:CB	1:A:126:PRO:HD3	0.48	2.38	3	9
1:B:58:TYR:O	1:B:61:ALA:N	0.48	2.46	2	7
1:A:172:LYS:HG2	1:A:175:LEU:O	0.48	2.07	3	4
1:B:75:ILE:N	1:B:75:ILE:CD1	0.48	2.75	9	4
1:B:132:ASP:OD1	1:B:138:ARG:CD	0.48	2.61	4	3
1:A:81:CYS:C	1:A:83:HIS:N	0.48	2.71	1	10
1:B:81:CYS:C	1:B:83:HIS:N	0.48	2.71	9	10
1:A:59:GLU:CD	1:A:59:GLU:H	0.48	2.16	2	2
1:A:59:GLU:CD	1:A:59:GLU:N	0.48	2.71	2	2
1:B:108:ASN:C	1:B:109:LEU:HD12	0.48	2.33	3	6
1:B:55:THR:HG22	1:B:60:GLU:OE1	0.48	2.08	3	1
1:A:98:GLN:O	1:A:99:LYS:C	0.48	2.56	7	9
1:B:125:VAL:CG2	1:B:126:PRO:HD3	0.48	2.38	6	2
1:A:115:ASP:C	1:A:117:HIS:N	0.48	2.70	3	10
1:A:125:VAL:HB	1:A:126:PRO:CD	0.48	2.38	3	2
1:B:163:ASN:O	1:B:167:ALA:N	0.48	2.47	8	10
1:A:100:LEU:HB3	1:A:164:MET:HE2	0.48	1.86	3	1
1:A:51:GLN:CB	1:B:52:LEU:O	0.48	2.62	5	2
1:A:118:LEU:HD23	1:A:118:LEU:C	0.48	2.34	6	10
1:A:49:GLY:O	1:A:50:ASP:C	0.48	2.57	7	5
1:A:64:LYS:O	1:A:67:THR:OG1	0.48	2.32	3	3
1:B:157:THR:O	1:B:160:LEU:N	0.48	2.47	3	1
1:A:78:LEU:HB2	1:A:110:VAL:HG12	0.48	1.86	10	4
1:A:127:ARG:NH2	1:A:152:TYR:HH	0.48	2.07	7	1
1:A:59:GLU:N	1:A:59:GLU:OE2	0.47	2.46	7	2
1:A:148:ARG:O	1:A:150:TYR:N	0.47	2.47	1	3
1:B:44:LEU:HD22	1:B:44:LEU:N	0.47	2.24	7	6
1:B:66:LYS:NZ	1:B:69:ASN:OD1	0.47	2.29	6	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:52:LEU:HG	1:A:53:ILE:H	0.47	1.69	7	1
1:B:114:THR:O	1:B:115:ASP:C	0.47	2.56	9	10
1:A:82:PRO:O	1:A:85:GLN:HB2	0.47	2.10	3	1
1:B:55:THR:CG2	1:B:60:GLU:HG2	0.47	2.39	3	1
1:A:81:CYS:C	1:A:83:HIS:H	0.47	2.16	4	3
1:B:98:GLN:O	1:B:100:LEU:N	0.47	2.48	10	7
1:B:52:LEU:HG	1:B:53:ILE:N	0.47	2.24	5	4
1:A:51:GLN:O	1:A:52:LEU:O	0.47	2.33	3	1
1:A:163:ASN:O	1:A:167:ALA:N	0.47	2.47	9	10
1:B:62:LEU:HB3	1:B:135:LEU:HD21	0.47	1.85	2	1
1:B:68:SER:O	1:B:70:LYS:HG3	0.47	2.09	1	7
1:B:45:SER:C	1:B:47:GLY:N	0.47	2.73	10	2
1:B:131:VAL:CG1	1:B:136:THR:C	0.47	2.88	5	6
1:B:109:LEU:N	1:B:109:LEU:CD1	0.47	2.78	7	1
1:A:46:ARG:NH1	1:A:50:ASP:CG	0.47	2.73	1	2
1:B:59:GLU:O	1:B:60:GLU:C	0.47	2.56	10	10
1:B:148:ARG:O	1:B:150:TYR:N	0.47	2.48	10	4
1:A:49:GLY:C	1:A:51:GLN:N	0.47	2.73	4	2
1:B:98:GLN:O	1:B:102:GLU:HG3	0.47	2.09	3	3
1:B:109:LEU:HD12	1:B:109:LEU:N	0.47	2.24	3	1
1:A:56:GLN:O	1:A:57:THR:HB	0.47	2.09	4	6
1:A:114:THR:O	1:A:115:ASP:C	0.47	2.57	9	10
1:A:49:GLY:C	1:A:51:GLN:H	0.47	2.18	10	2
1:B:131:VAL:HG13	1:B:137:VAL:N	0.47	2.24	6	5
1:B:127:ARG:HG3	1:B:129:MET:HG3	0.47	1.87	4	9
1:B:174:GLU:CB	1:B:175:LEU:HD12	0.47	2.39	9	10
1:A:161:LEU:HB3	1:A:165:LYS:HE3	0.47	1.86	7	4
1:A:52:LEU:HD22	1:A:102:GLU:HA	0.47	1.86	3	1
1:A:53:ILE:HG23	1:B:53:ILE:HG23	0.47	1.86	3	1
1:B:114:THR:HG23	1:B:114:THR:O	0.47	2.10	3	1
1:A:52:LEU:HD11	1:A:106:LEU:HD21	0.46	1.87	3	1
1:B:66:LYS:HE3	1:B:135:LEU:HD22	0.46	1.86	7	1
1:B:81:CYS:C	1:B:83:HIS:H	0.46	2.18	2	3
1:B:65:SER:O	1:B:66:LYS:C	0.46	2.58	3	1
1:B:131:VAL:CG1	1:B:136:THR:N	0.46	2.78	3	8
1:B:78:LEU:HB2	1:B:110:VAL:HG12	0.46	1.87	10	3
1:B:59:GLU:CD	1:B:59:GLU:H	0.46	2.18	9	2
1:A:59:GLU:O	1:A:62:LEU:N	0.46	2.48	10	6
1:B:56:GLN:O	1:B:57:THR:HB	0.46	2.10	5	6
1:B:168:LEU:HD12	1:B:168:LEU:C	0.46	2.34	1	10
1:B:64:LYS:HE3	1:B:64:LYS:HA	0.46	1.86	9	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:110:VAL:O	1:A:110:VAL:HG23	0.46	2.10	8	4
1:B:78:LEU:CD2	1:B:125:VAL:CG1	0.46	2.93	8	9
1:A:59:GLU:O	1:A:60:GLU:C	0.46	2.58	3	9
1:A:141:ILE:O	1:A:141:ILE:HG23	0.46	2.11	8	10
1:A:168:LEU:C	1:A:168:LEU:HD12	0.46	2.35	1	10
1:A:174:GLU:CB	1:A:175:LEU:HD12	0.46	2.40	5	10
1:B:72:LEU:C	1:B:72:LEU:CD2	0.46	2.88	5	9
1:A:51:GLN:O	1:A:52:LEU:HB3	0.46	2.10	9	4
1:A:119:SER:HB3	1:A:129:MET:HE1	0.46	1.87	5	5
1:A:115:ASP:O	1:A:117:HIS:N	0.46	2.48	5	9
1:B:96:GLU:OE1	1:B:165:LYS:NZ	0.46	2.49	3	6
1:B:121:ASP:OD1	1:B:121:ASP:N	0.46	2.49	1	9
1:A:59:GLU:N	1:A:59:GLU:OE1	0.46	2.48	3	1
1:B:125:VAL:HB	1:B:126:PRO:CD	0.46	2.40	3	3
1:A:46:ARG:NH2	1:B:54:TRP:NE1	0.46	2.63	7	2
1:A:72:LEU:HG	1:A:105:VAL:HG21	0.46	1.87	9	4
1:A:121:ASP:C	1:A:123:GLN:H	0.46	2.19	1	5
1:A:51:GLN:HB2	1:B:52:LEU:O	0.46	2.11	3	2
1:B:37:ASP:CG	1:B:38:PRO:CD	0.46	2.89	8	10
1:B:75:ILE:HG13	1:B:128:ILE:HG23	0.46	1.87	4	1
1:B:75:ILE:HG23	1:B:128:ILE:HG13	0.46	1.88	4	1
1:A:121:ASP:OD1	1:A:121:ASP:N	0.45	2.49	4	8
1:A:108:ASN:C	1:A:109:LEU:HD12	0.45	2.36	6	6
1:B:75:ILE:HG12	1:B:128:ILE:HG23	0.45	1.86	3	1
1:A:45:SER:O	1:A:46:ARG:HG2	0.45	2.10	1	2
1:A:99:LYS:HA	1:A:102:GLU:CD	0.45	2.36	3	1
1:A:45:SER:C	1:A:47:GLY:H	0.45	2.19	2	2
1:B:105:VAL:HG12	1:B:106:LEU:N	0.45	2.25	8	2
1:A:72:LEU:C	1:A:72:LEU:CD2	0.45	2.89	10	10
1:A:70:LYS:HB3	1:A:71:PRO:HD2	0.45	1.87	3	4
1:A:45:SER:O	1:A:46:ARG:NE	0.45	2.49	4	1
1:A:46:ARG:NH1	1:A:50:ASP:OD2	0.45	2.46	10	2
1:B:43:THR:O	1:B:44:LEU:C	0.45	2.59	6	1
1:B:59:GLU:O	1:B:62:LEU:N	0.45	2.49	10	7
1:B:72:LEU:HG	1:B:105:VAL:HG21	0.45	1.88	7	6
1:A:124:TYR:CD2	1:A:125:VAL:HG23	0.45	2.47	4	2
1:A:105:VAL:C	1:A:106:LEU:HD12	0.45	2.36	3	1
1:B:131:VAL:HA	1:B:136:THR:O	0.45	2.11	5	4
1:B:59:GLU:OE2	1:B:59:GLU:N	0.45	2.48	6	1
1:A:96:GLU:CD	1:A:165:LYS:HZ1	0.45	2.19	7	1
1:B:37:ASP:CG	1:B:38:PRO:HD2	0.45	2.37	8	6

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:B:110:VAL:O	1:B:110:VAL:HG23	0.45	2.12	6	5
1:B:118:LEU:HD23	1:B:118:LEU:C	0.45	2.36	1	10
1:A:105:VAL:HG12	1:A:106:LEU:N	0.45	2.27	3	1
1:A:131:VAL:HA	1:A:136:THR:O	0.44	2.12	3	6
1:A:99:LYS:HA	1:A:102:GLU:OE1	0.44	2.13	4	1
1:A:50:ASP:OD1	1:A:50:ASP:N	0.44	2.49	5	1
1:B:114:THR:O	1:B:114:THR:HG23	0.44	2.12	8	1
1:B:64:LYS:HE3	1:B:64:LYS:CA	0.44	2.43	9	1
1:B:90:VAL:HB	1:B:94:ASN:ND2	0.44	2.27	6	9
1:B:55:THR:HB	1:B:106:LEU:O	0.44	2.12	9	1
1:A:51:GLN:HE21	1:A:51:GLN:HA	0.44	1.70	2	1
1:A:124:TYR:CE2	1:A:125:VAL:HG23	0.44	2.46	4	2
1:A:46:ARG:CZ	1:A:50:ASP:OD1	0.44	2.66	9	1
1:A:52:LEU:O	1:A:53:ILE:HG23	0.44	2.12	1	1
1:B:119:SER:HB3	1:B:129:MET:CE	0.44	2.42	9	3
1:A:45:SER:O	1:A:46:ARG:CG	0.44	2.66	1	1
1:B:161:LEU:O	1:B:165:LYS:HG3	0.44	2.13	5	8
1:A:73:MET:HG3	1:A:130:PHE:CD2	0.44	2.48	9	4
1:B:78:LEU:O	1:B:84:SER:CB	0.44	2.66	3	1
1:B:94:ASN:CB	1:B:97:ILE:HD12	0.44	2.42	4	1
1:A:125:VAL:CG2	1:A:126:PRO:HD3	0.44	2.43	6	2
1:A:131:VAL:HG13	1:A:137:VAL:N	0.44	2.28	8	7
1:A:161:LEU:O	1:A:165:LYS:HG3	0.44	2.13	5	9
1:B:121:ASP:C	1:B:123:GLN:H	0.44	2.20	2	8
1:B:93:GLU:O	1:B:95:LYS:N	0.44	2.50	3	2
1:A:131:VAL:CG1	1:A:136:THR:C	0.44	2.87	9	5
1:A:45:SER:C	1:A:47:GLY:N	0.44	2.76	1	3
1:A:98:GLN:O	1:A:100:LEU:N	0.43	2.51	7	5
1:B:59:GLU:N	1:B:59:GLU:CD	0.43	2.75	6	1
1:B:132:ASP:HB3	1:B:133:PRO:HD2	0.43	1.89	8	1
1:B:74:ILE:HD12	1:B:129:MET:O	0.43	2.12	4	3
1:B:79:ASP:OD2	1:B:88:LYS:NZ	0.43	2.49	3	1
1:A:84:SER:C	1:A:86:ALA:N	0.43	2.76	9	1
1:A:90:VAL:HB	1:A:94:ASN:ND2	0.43	2.29	5	7
1:A:148:ARG:C	1:A:150:TYR:N	0.43	2.76	1	3
1:B:74:ILE:HD12	1:B:74:ILE:O	0.43	2.13	6	1
1:B:72:LEU:HD21	1:B:74:ILE:HG23	0.43	1.91	10	1
1:A:114:THR:O	1:A:114:THR:HG23	0.43	2.14	3	1
1:A:132:ASP:OD1	1:A:138:ARG:CD	0.43	2.66	5	2
1:A:64:LYS:HE3	1:A:67:THR:OG1	0.43	2.13	1	2
1:A:132:ASP:HB3	1:A:133:PRO:HD2	0.43	1.90	4	4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:127:ARG:HG3	1:A:129:MET:HG3	0.43	1.88	4	7
1:B:133:PRO:C	1:B:135:LEU:H	0.43	2.22	3	2
1:B:94:ASN:HB2	1:B:97:ILE:HD12	0.43	1.89	4	1
1:A:75:ILE:HG23	1:A:128:ILE:HG13	0.43	1.89	7	3
1:A:37:ASP:CG	1:A:38:PRO:CD	0.43	2.92	6	7
1:B:97:ILE:CD1	1:B:161:LEU:HD21	0.43	2.44	3	1
1:A:51:GLN:O	1:A:52:LEU:CB	0.43	2.67	4	1
1:A:73:MET:HE2	1:A:168:LEU:HB3	0.43	1.90	3	9
1:B:47:GLY:O	1:B:48:TRP:C	0.43	2.61	7	1
1:B:53:ILE:HD12	1:B:53:ILE:O	0.43	2.14	7	1
1:A:45:SER:O	1:A:46:ARG:HB3	0.43	2.14	9	1
1:B:78:LEU:CG	1:B:125:VAL:CG1	0.43	2.96	6	4
1:A:100:LEU:N	1:A:100:LEU:HD22	0.43	2.27	3	1
1:B:78:LEU:HD21	1:B:125:VAL:HG13	0.43	1.91	6	1
1:A:46:ARG:HH11	1:A:46:ARG:HG3	0.43	1.73	9	1
1:A:63:TYR:O	1:A:67:THR:HG23	0.43	2.14	9	1
1:B:74:ILE:HD12	1:B:129:MET:HB2	0.43	1.90	10	1
1:A:131:VAL:CG1	1:A:136:THR:N	0.43	2.82	1	8
1:A:64:LYS:HE3	1:A:64:LYS:CA	0.43	2.44	8	1
1:B:100:LEU:O	1:B:104:PHE:HB2	0.42	2.13	3	1
1:B:53:ILE:CD1	1:B:53:ILE:N	0.42	2.82	3	1
1:A:78:LEU:CD2	1:A:125:VAL:CG1	0.42	2.97	2	6
1:B:73:MET:HG3	1:B:130:PHE:CD2	0.42	2.50	9	5
1:A:106:LEU:N	1:A:106:LEU:CD1	0.42	2.80	3	1
1:A:55:THR:HG22	1:A:56:GLN:N	0.42	2.29	5	1
1:B:52:LEU:C	1:B:53:ILE:CG2	0.42	2.93	5	1
1:B:148:ARG:HG2	1:B:156:ASP:OD1	0.42	2.14	5	1
1:B:73:MET:HE2	1:B:168:LEU:HB3	0.42	1.91	1	8
1:B:124:TYR:CD2	1:B:125:VAL:HG23	0.42	2.49	2	1
1:B:52:LEU:HG	1:B:53:ILE:H	0.42	1.73	3	2
1:A:60:GLU:CD	1:B:64:LYS:HZ1	0.42	2.21	6	1
1:A:78:LEU:HG	1:A:125:VAL:HG11	0.42	1.91	7	1
1:B:73:MET:O	1:B:105:VAL:HB	0.42	2.15	2	3
1:A:78:LEU:HG	1:A:125:VAL:HG12	0.42	1.90	6	1
1:A:43:THR:OG1	1:A:46:ARG:CA	0.42	2.68	7	1
1:B:99:LYS:N	1:B:102:GLU:OE2	0.42	2.52	3	1
1:B:43:THR:O	1:B:46:ARG:N	0.42	2.51	6	1
1:A:119:SER:OG	1:A:122:GLY:HA3	0.42	2.14	3	1
1:B:40:THR:C	1:B:42:GLN:N	0.42	2.77	6	5
1:A:59:GLU:N	1:A:59:GLU:CD	0.42	2.77	10	2
1:B:45:SER:O	1:B:47:GLY:N	0.42	2.52	9	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:64:LYS:CE	1:A:67:THR:OG1	0.42	2.67	8	2
1:A:148:ARG:HG2	1:A:156:ASP:OD1	0.42	2.15	8	4
1:B:95:LYS:HA	1:B:98:GLN:NE2	0.42	2.30	3	1
1:A:78:LEU:CD1	1:A:80:GLU:N	0.42	2.83	7	2
1:B:133:PRO:C	1:B:135:LEU:N	0.42	2.78	2	1
1:A:162:ASP:O	1:A:166:LYS:N	0.42	2.53	3	6
1:B:65:SER:HB3	1:B:72:LEU:HD12	0.42	1.91	3	1
1:B:45:SER:O	1:B:46:ARG:HB3	0.42	2.15	6	1
1:B:78:LEU:C	1:B:78:LEU:CD1	0.42	2.93	4	4
1:B:124:TYR:CE2	1:B:125:VAL:HG23	0.42	2.49	2	1
1:B:78:LEU:CD1	1:B:80:GLU:N	0.42	2.83	7	2
1:B:56:GLN:O	1:B:57:THR:CB	0.41	2.68	3	1
1:A:37:ASP:OD1	1:A:38:PRO:CD	0.41	2.68	7	1
1:A:109:LEU:N	1:A:109:LEU:CD1	0.41	2.83	7	1
1:A:128:ILE:N	1:A:128:ILE:CD1	0.41	2.82	9	2
1:B:128:ILE:N	1:B:128:ILE:CD1	0.41	2.83	5	2
1:B:105:VAL:C	1:B:106:LEU:HD12	0.41	2.40	5	2
1:A:78:LEU:HD13	1:A:80:GLU:OE2	0.41	2.15	9	1
1:A:93:GLU:O	1:A:95:LYS:N	0.41	2.52	3	1
1:B:56:GLN:OE1	1:B:57:THR:N	0.41	2.53	3	1
1:B:38:PRO:O	1:B:39:PHE:CG	0.41	2.73	7	1
1:A:66:LYS:HE2	1:A:135:LEU:HD22	0.41	1.93	8	1
1:A:78:LEU:CG	1:A:125:VAL:CG1	0.41	2.99	10	1
1:A:40:THR:C	1:A:42:GLN:N	0.41	2.78	6	6
1:A:78:LEU:C	1:A:78:LEU:CD1	0.41	2.94	10	2
1:A:74:ILE:HD12	1:A:129:MET:O	0.41	2.16	3	1
1:B:157:THR:HB	1:B:161:LEU:HD23	0.41	1.93	6	1
1:A:51:GLN:CA	1:A:51:GLN:NE2	0.41	2.84	2	1
1:A:99:LYS:O	1:A:103:GLN:HG2	0.41	2.15	9	3
1:B:162:ASP:O	1:B:166:LYS:N	0.41	2.54	9	3
1:B:157:THR:O	1:B:161:LEU:CD2	0.41	2.68	5	2
1:B:66:LYS:NZ	1:B:135:LEU:HB2	0.41	2.31	2	1
1:B:53:ILE:HD13	1:B:53:ILE:O	0.41	2.15	3	1
1:A:157:THR:O	1:A:161:LEU:CD2	0.41	2.69	5	3
1:B:72:LEU:HD22	1:B:74:ILE:HG13	0.41	1.91	4	1
1:B:175:LEU:N	1:B:175:LEU:CD1	0.41	2.84	5	1
1:B:76:HIS:O	1:B:76:HIS:ND1	0.41	2.54	6	1
1:B:74:ILE:CD1	1:B:129:MET:CB	0.41	2.98	9	1
1:B:148:ARG:C	1:B:150:TYR:N	0.41	2.78	10	1
1:A:78:LEU:CD1	1:A:81:CYS:H	0.41	2.28	3	1
1:A:62:LEU:O	1:A:66:LYS:HB2	0.41	2.15	6	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:76:HIS:ND1	1:A:76:HIS:O	0.41	2.54	6	1
1:A:55:THR:HG23	1:A:60:GLU:HG2	0.41	1.92	5	1
1:A:75:ILE:HG12	1:A:128:ILE:HG13	0.41	1.92	5	1
1:A:66:LYS:O	1:A:67:THR:C	0.40	2.65	3	1
1:A:39:PHE:O	1:A:40:THR:C	0.40	2.63	5	1
1:A:63:TYR:O	1:A:66:LYS:CB	0.40	2.69	6	1
1:B:99:LYS:O	1:B:103:GLN:HG2	0.40	2.15	5	4
1:A:73:MET:O	1:A:105:VAL:HB	0.40	2.17	2	2
1:A:175:LEU:N	1:A:175:LEU:CD1	0.40	2.84	3	1
1:A:65:SER:HB2	1:A:72:LEU:HG	0.40	1.93	1	1
1:A:69:ASN:ND2	1:A:69:ASN:O	0.40	2.55	1	1
1:B:58:TYR:O	1:B:61:ALA:HB3	0.40	2.16	3	1
1:B:75:ILE:HD12	1:B:75:ILE:N	0.40	2.31	4	1
1:B:171:LEU:N	1:B:171:LEU:CD2	0.40	2.84	4	1
1:B:78:LEU:HG	1:B:125:VAL:HG11	0.40	1.94	7	1
1:A:84:SER:O	1:A:86:ALA:N	0.40	2.55	9	1

6.3 Torsion angles ⓘ

6.3.1 Protein backbone ⓘ

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	138/140 (99%)	90±2 (65±1%)	35±2 (25±2%)	13±1 (10±1%)	1	10
1	B	135/140 (96%)	86±3 (64±2%)	35±3 (26±2%)	13±2 (10±2%)	1	10
All	All	2730/2800 (98%)	1763 (65%)	702 (26%)	265 (10%)	1	10

All 44 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	38	PRO	10
1	A	40	THR	10
1	A	41	PRO	10
1	A	120	PRO	10
1	A	126	PRO	10

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	137	VAL	10
1	A	152	TYR	10
1	A	157	THR	10
1	B	38	PRO	10
1	B	40	THR	10
1	B	120	PRO	10
1	B	137	VAL	10
1	B	152	TYR	10
1	B	157	THR	10
1	A	116	LYS	9
1	B	41	PRO	9
1	B	82	PRO	9
1	B	126	PRO	9
1	B	149	LEU	8
1	A	125	VAL	8
1	A	82	PRO	7
1	B	116	LYS	7
1	B	125	VAL	7
1	A	149	LEU	6
1	A	50	ASP	6
1	B	124	TYR	5
1	A	46	ARG	4
1	B	113	THR	4
1	A	113	THR	3
1	A	124	TYR	3
1	B	57	THR	3
1	A	57	THR	2
1	A	59	GLU	2
1	B	94	ASN	2
1	B	99	LYS	2
1	B	46	ARG	2
1	B	135	LEU	1
1	A	44	LEU	1
1	A	52	LEU	1
1	A	58	TYR	1
1	B	114	THR	1
1	A	112	GLU	1
1	B	54	TRP	1
1	B	52	LEU	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	127/127 (100%)	111±2 (87±2%)	16±2 (13±2%)	6	47
1	B	125/127 (98%)	109±2 (87±2%)	16±2 (13±2%)	6	47
All	All	2520/2540 (99%)	2197 (87%)	323 (13%)	6	47

All 70 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	74	ILE	10
1	A	80	GLU	10
1	A	106	LEU	10
1	A	121	ASP	10
1	A	125	VAL	10
1	A	128	ILE	10
1	A	140	ASP	10
1	A	159	LEU	10
1	B	74	ILE	10
1	B	80	GLU	10
1	B	106	LEU	10
1	B	121	ASP	10
1	B	125	VAL	10
1	B	140	ASP	10
1	B	159	LEU	10
1	B	162	ASP	10
1	A	162	ASP	9
1	A	59	GLU	8
1	A	64	LYS	8
1	A	174	GLU	8
1	B	174	GLU	8
1	B	64	LYS	7
1	A	51	GLN	6
1	B	59	GLU	6
1	A	55	THR	5
1	B	55	THR	5
1	B	128	ILE	5
1	B	66	LYS	5

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	B	115	ASP	5
1	B	96	GLU	5
1	A	45	SER	4
1	A	65	SER	4
1	B	65	SER	4
1	A	115	ASP	4
1	B	53	ILE	4
1	A	114	THR	3
1	A	102	GLU	3
1	A	66	LYS	3
1	B	45	SER	3
1	A	135	LEU	2
1	B	46	ARG	2
1	A	119	SER	2
1	B	132	ASP	2
1	A	46	ARG	2
1	A	132	ASP	2
1	B	75	ILE	2
1	B	175	LEU	2
1	B	114	THR	2
1	A	96	GLU	2
1	A	50	ASP	1
1	A	69	ASN	1
1	A	79	ASP	1
1	A	175	LEU	1
1	B	69	ASN	1
1	B	97	ILE	1
1	B	103	GLN	1
1	B	141	ILE	1
1	B	63	TYR	1
1	B	102	GLU	1
1	A	142	THR	1
1	A	108	ASN	1
1	A	131	VAL	1
1	B	108	ASN	1
1	B	109	LEU	1
1	B	142	THR	1
1	B	67	THR	1
1	B	135	LEU	1
1	A	146	SER	1
1	B	68	SER	1
1	A	63	TYR	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 24% for the well-defined parts and 23% 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	928
Number of shifts mapped to atoms	928
Number of unparsed shifts	0
Number of shifts with mapping errors	0
Number of shifts with mapping warnings	0
Number of shift outliers (ShiftChecker)	1

7.1.2 Chemical shift referencing

The following table shows the suggested chemical shift referencing corrections.

Nucleus	# values	Correction $\pm$ precision, ppm	Suggested action
$^{13}\text{C}_\alpha$	135	0.08 ± 0.19	None needed (< 0.5 ppm)
$^{13}\text{C}_\beta$	130	1.13 ± 0.12	Should be checked
$^{13}\text{C}'$	135	-0.42 ± 0.11	None needed (< 0.5 ppm)
^{15}N	128	0.52 ± 0.49	None needed (imprecise)

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 24%, i.e. 928 atoms were assigned a chemical shift out of a possible 3944. 0 out of 52 assigned methyl groups (LEU and VAL) were assigned stereospecifically.

	Total	^1H	^{13}C	^{15}N
Backbone	526/1360 (39%)	128/545 (23%)	270/554 (49%)	128/261 (49%)
Sidechain	402/2266 (18%)	185/1476 (13%)	210/713 (29%)	7/77 (9%)

Continued on next page...

Continued from previous page...

	Total	¹H	¹³C	¹⁵N
Aromatic	0/318 (0%)	0/152 (0%)	0/146 (0%)	0/20 (0%)
Overall	928/3944 (24%)	313/2173 (14%)	480/1413 (34%)	135/358 (38%)

The following table shows the completeness of the chemical shift assignments for the full structure. The overall completeness is 23%, i.e. 928 atoms were assigned a chemical shift out of a possible 3974. 0 out of 52 assigned methyl groups (LEU and VAL) were assigned stereospecifically.

	Total	¹H	¹³C	¹⁵N
Backbone	526/1376 (38%)	128/552 (23%)	270/560 (48%)	128/264 (48%)
Sidechain	402/2280 (18%)	185/1484 (12%)	210/718 (29%)	7/78 (9%)
Aromatic	0/318 (0%)	0/152 (0%)	0/146 (0%)	0/20 (0%)
Overall	928/3974 (23%)	313/2188 (14%)	480/1424 (34%)	135/362 (37%)

7.1.4 Statistically unusual chemical shifts ⓘ

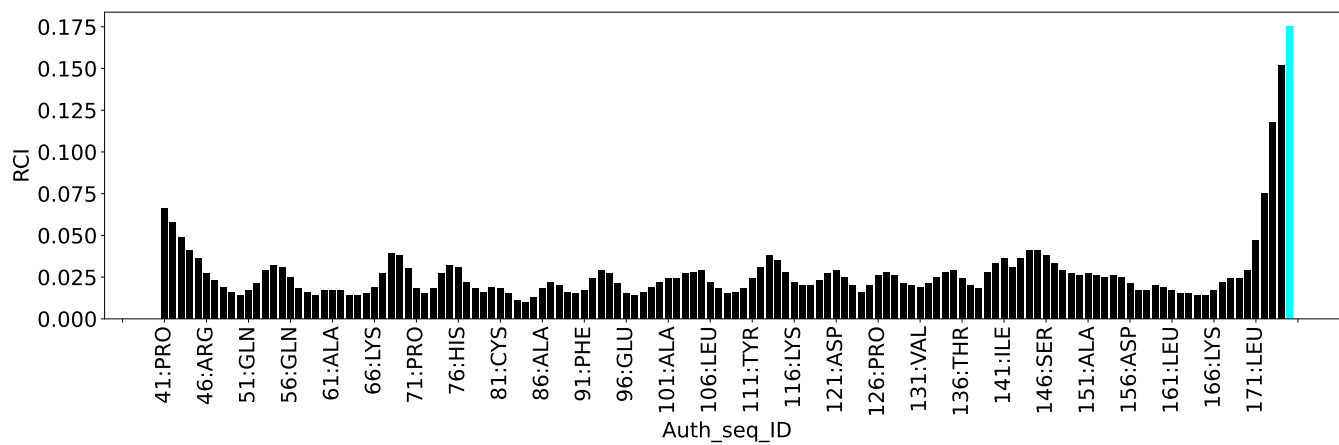
The following table lists the statistically unusual chemical shifts. These are statistical measures, and large deviations from the mean do not necessarily imply incorrect assignments. Molecules containing paramagnetic centres or hemes are expected to give rise to anomalous chemical shifts.

List Id	Chain	Res	Type	Atom	Shift, ppm	Expected range, ppm	Z-score
1	A	84	SER	H	11.46	5.45 – 11.10	5.7

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	632
Intra-residue ($ i-j =0$)	76
Sequential ($ i-j =1$)	220
Medium range ($ i-j >1$ and $ i-j <5$)	145
Long range ($ i-j \geq 5$)	154
Inter-chain	0
Hydrogen bond restraints	37
Disulfide bond restraints	0
Total dihedral-angle restraints	358
Number of unmapped restraints	0
Number of restraints per residue	3.5
Number of long range restraints per residue ¹	0.6

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)	18.1	0.2
0.2-0.5 (Medium)	31.1	0.5
>0.5 (Large)	44.9	24.64

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)	46.7	9.96
10.0-20.0 (Medium)	30.3	19.99
>20.0 (Large)	24.7	112.42

9 Distance violation analysis ⓘ

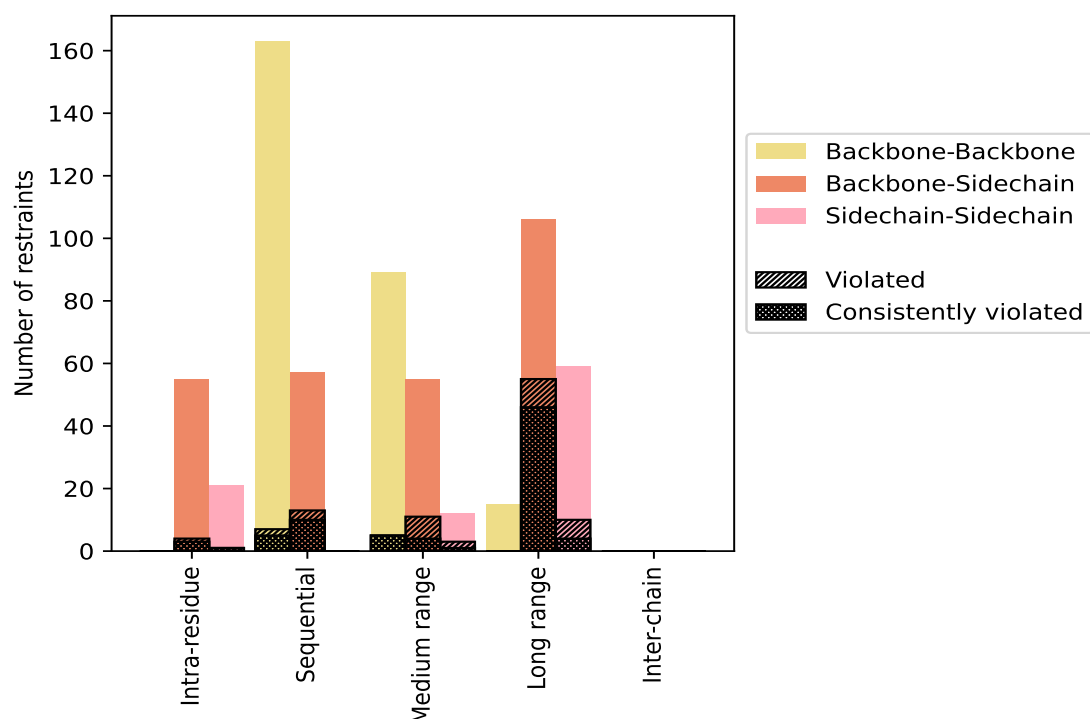
9.1 Summary of distance violations ⓘ

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)	76	12.0	5	6.6	0.8	4	5.3	0.6
Backbone-Backbone	0	0.0	0	0.0	0.0	0	0.0	0.0
Backbone-Sidechain	55	8.7	4	7.3	0.6	3	5.5	0.5
Sidechain-Sidechain	21	3.3	1	4.8	0.2	1	4.8	0.2
Sequential (i-j =1)	220	34.8	20	9.1	3.2	15	6.8	2.4
Backbone-Backbone	163	25.8	7	4.3	1.1	5	3.1	0.8
Backbone-Sidechain	57	9.0	13	22.8	2.1	10	17.5	1.6
Sidechain-Sidechain	0	0.0	0	0.0	0.0	0	0.0	0.0
Medium range (i-j >1 & i-j <5)	145	22.9	17	11.7	2.7	10	6.9	1.6
Backbone-Backbone	89	14.1	5	5.6	0.8	5	5.6	0.8
Backbone-Sidechain	44	7.0	9	20.5	1.4	4	9.1	0.6
Sidechain-Sidechain	12	1.9	3	25.0	0.5	1	8.3	0.2
Long range (i-j ≥5)	154	24.4	42	27.3	6.6	27	17.5	4.3
Backbone-Backbone	15	2.4	0	0.0	0.0	0	0.0	0.0
Backbone-Sidechain	80	12.7	32	40.0	5.1	23	28.7	3.6
Sidechain-Sidechain	59	9.3	10	16.9	1.6	4	6.8	0.6
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	37	5.9	25	67.6	4.0	23	62.2	3.6
Disulfide bond	0	0.0	0	0.0	0.0	0	0.0	0.0
Total	632	100.0	109	17.2	17.2	79	12.5	12.5
Backbone-Backbone	267	42.2	12	4.5	1.9	10	3.7	1.6
Backbone-Sidechain	273	43.2	83	30.4	13.1	63	23.1	10.0
Sidechain-Sidechain	92	14.6	14	15.2	2.2	6	6.5	0.9

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

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



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

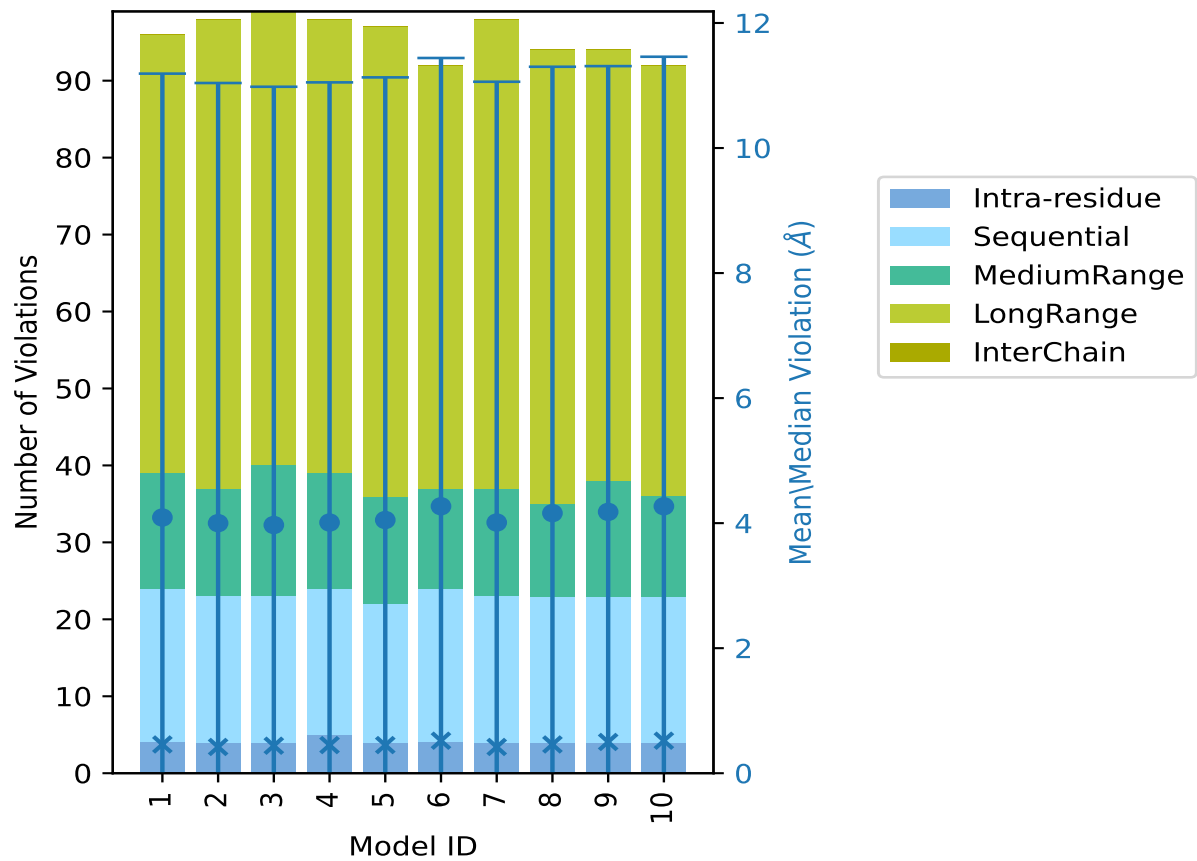
9.2 Distance violation statistics for each model [i](#)

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

Model ID	Number of violations						Mean (Å)	Max (Å)	SD ⁶ (Å)	Median (Å)
	IR ¹	SQ ²	MR ³	LR ⁴	IC ⁵	Total				
1	4	20	15	57	0	96	4.09	24.61	7.1	0.46
2	4	19	14	61	0	98	4.0	24.62	7.04	0.42
3	4	19	17	59	0	99	3.97	24.48	7.01	0.44
4	5	19	15	59	0	98	4.01	24.58	7.04	0.45
5	4	18	14	61	0	97	4.05	24.64	7.08	0.45
6	4	20	13	55	0	92	4.27	24.51	7.17	0.52
7	4	19	14	61	0	98	4.01	24.57	7.05	0.42
8	4	19	12	59	0	94	4.16	24.62	7.14	0.46
9	4	19	15	56	0	94	4.18	24.52	7.13	0.5
10	4	19	13	56	0	92	4.27	24.56	7.19	0.52

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, 511(IR:71, SQ:200, MR:128, LR:112, 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	%
1	0	3	2	0	6	1	10.0
0	0	0	1	0	1	2	20.0
0	0	0	1	0	1	3	30.0

Continued on next page...

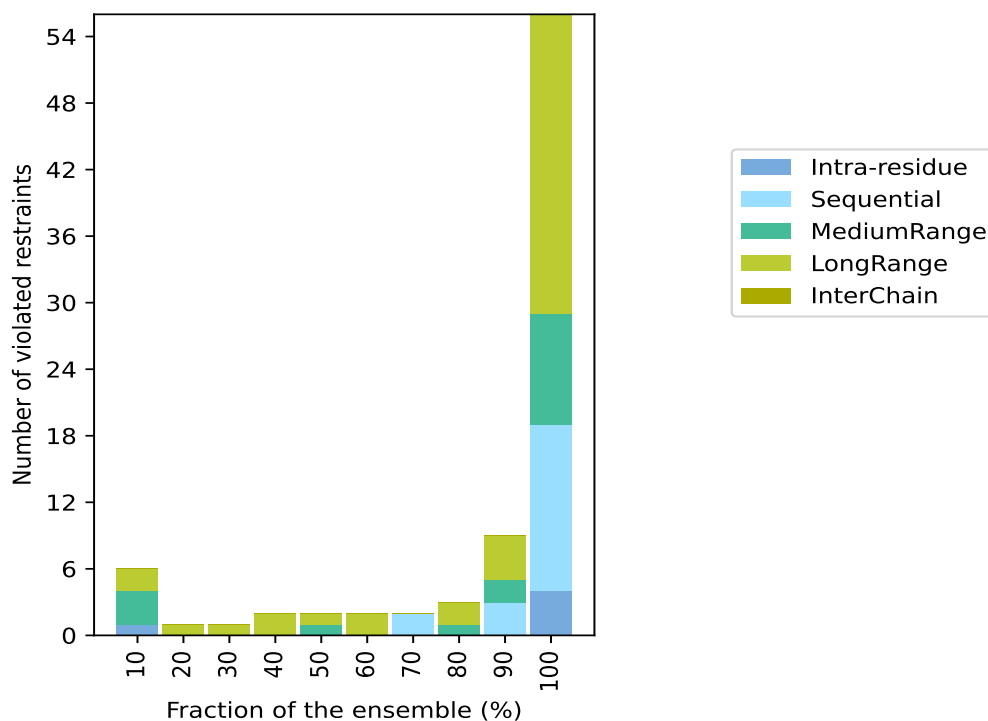
Continued from previous page...

Number of violated restraints						Fraction of the ensemble	
IR ¹	SQ ²	MR ³	LR ⁴	IC ⁵	Total	Count ⁶	%
0	0	0	2	0	2	4	40.0
0	0	1	1	0	2	5	50.0
0	0	0	2	0	2	6	60.0
0	2	0	0	0	2	7	70.0
0	0	1	2	0	3	8	80.0
0	3	2	4	0	9	9	90.0
4	15	10	27	0	56	10	100.0

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

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

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

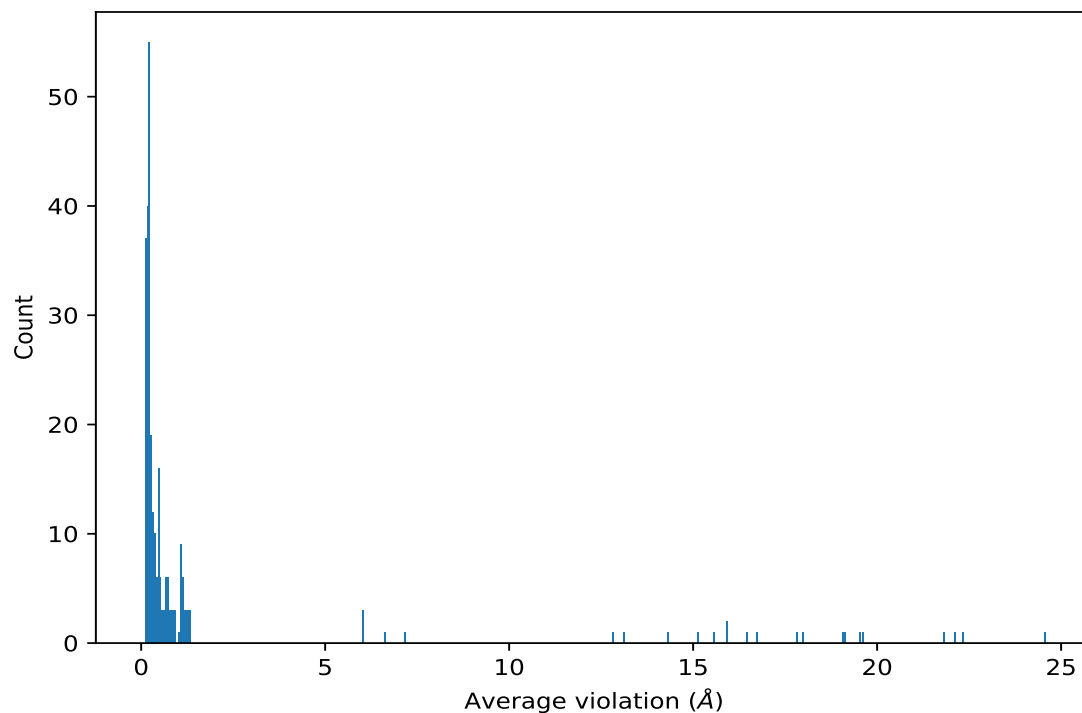


9.4 Most violated distance restraints in the ensemble [i](#)

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

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

in the ensemble



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

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

Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)	Median (Å)
(2,2)	1:62:A:LEU:H	1:93:A:GLU:O	10	24.57	0.05	24.58
(2,1)	1:61:A:ALA:H	1:92:A:ALA:O	10	22.34	0.07	22.34
(2,3)	1:63:A:TYR:H	1:94:A:ASN:O	10	22.11	0.1	22.11
(2,12)	1:89:A:LYS:H	1:120:A:PRO:O	10	21.8	0.07	21.79
(2,4)	1:64:A:LYS:H	1:95:A:LYS:O	10	19.62	0.13	19.66
(2,13)	1:90:A:VAL:H	1:121:A:ASP:O	10	19.54	0.06	19.52
(2,10)	1:87:A:LEU:H	1:118:A:LEU:O	10	19.13	0.06	19.12
(2,11)	1:88:A:LYS:H	1:119:A:SER:O	10	19.05	0.09	19.06
(2,14)	1:91:A:PHE:H	1:122:A:GLY:O	10	17.98	0.05	17.98
(2,20)	1:103:A:GLN:H	1:134:A:SER:O	10	17.84	0.08	17.84
(2,19)	1:102:A:GLU:H	1:133:A:PRO:O	10	16.71	0.17	16.72
(2,16)	1:99:A:LYS:H	1:130:A:PHE:O	10	16.49	0.06	16.5
(2,5)	1:65:A:SER:H	1:96:A:GLU:O	10	15.92	0.12	15.91
(2,6)	1:66:A:LYS:H	1:97:A:ILE:O	10	15.92	0.1	15.9
(2,15)	1:94:A:ASN:H	1:125:A:VAL:O	10	15.57	0.05	15.58

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)	Median (Å)
(2,18)	1:101:A:ALA:H	1:132:A:ASP:O	10	15.13	0.06	15.11
(2,21)	1:104:A:PHE:H	1:135:A:LEU:O	10	14.3	0.06	14.3
(2,17)	1:100:A:LEU:H	1:131:A:VAL:O	10	13.14	0.05	13.13
(2,9)	1:76:A:HIS:H	1:162:A:ASP:O	10	12.81	0.04	12.81
(2,7)	1:72:A:LEU:H	1:166:A:LYS:O	10	7.19	0.08	7.15
(2,8)	1:74:A:ILE:H	1:164:A:MET:O	10	6.63	0.02	6.62
(1,595)	1:170:A:LEU:HD21	1:105:A:VAL:CG2	10	6.02	0.03	6.02
(1,595)	1:170:A:LEU:HD22	1:105:A:VAL:CG2	10	6.02	0.03	6.02
(1,595)	1:170:A:LEU:HD23	1:105:A:VAL:CG2	10	6.02	0.03	6.02
(1,519)	1:56:A:GLN:H	1:53:A:ILE:HD11	10	1.3	0.26	1.39
(1,519)	1:56:A:GLN:H	1:53:A:ILE:HD12	10	1.3	0.26	1.39
(1,519)	1:56:A:GLN:H	1:53:A:ILE:HD13	10	1.3	0.26	1.39
(1,337)	1:62:A:LEU:HD21	1:132:A:ASP:H	10	1.28	0.04	1.28
(1,337)	1:62:A:LEU:HD22	1:132:A:ASP:H	10	1.28	0.04	1.28
(1,337)	1:62:A:LEU:HD23	1:132:A:ASP:H	10	1.28	0.04	1.28
(1,426)	1:77:A:HIS:H	1:125:A:VAL:HG11	10	1.23	0.08	1.23
(1,426)	1:77:A:HIS:H	1:125:A:VAL:HG12	10	1.23	0.08	1.23
(1,426)	1:77:A:HIS:H	1:125:A:VAL:HG13	10	1.23	0.08	1.23
(1,201)	1:78:A:LEU:H	1:125:A:VAL:HG21	10	1.19	0.08	1.19
(1,201)	1:78:A:LEU:H	1:125:A:VAL:HG22	10	1.19	0.08	1.19
(1,201)	1:78:A:LEU:H	1:125:A:VAL:HG23	10	1.19	0.08	1.19
(1,27)	1:78:A:LEU:H	1:125:A:VAL:HG21	10	1.13	0.08	1.13
(1,27)	1:78:A:LEU:H	1:125:A:VAL:HG22	10	1.13	0.08	1.13
(1,27)	1:78:A:LEU:H	1:125:A:VAL:HG23	10	1.13	0.08	1.13
(1,143)	1:134:A:SER:H	1:135:A:LEU:HD11	10	1.1	0.09	1.1
(1,143)	1:134:A:SER:H	1:135:A:LEU:HD12	10	1.1	0.09	1.1
(1,143)	1:134:A:SER:H	1:135:A:LEU:HD13	10	1.1	0.09	1.1
(1,108)	1:87:A:LEU:HD11	1:153:A:GLU:H	10	1.08	0.04	1.09
(1,108)	1:87:A:LEU:HD12	1:153:A:GLU:H	10	1.08	0.04	1.09
(1,108)	1:87:A:LEU:HD13	1:153:A:GLU:H	10	1.08	0.04	1.09
(1,378)	1:161:A:LEU:HD21	1:95:A:LYS:H	10	1.06	0.03	1.07
(1,378)	1:161:A:LEU:HD22	1:95:A:LYS:H	10	1.06	0.03	1.07
(1,378)	1:161:A:LEU:HD23	1:95:A:LYS:H	10	1.06	0.03	1.07
(1,378)	1:161:A:LEU:HD11	1:95:A:LYS:H	10	1.06	0.03	1.07
(1,378)	1:161:A:LEU:HD12	1:95:A:LYS:H	10	1.06	0.03	1.07
(1,378)	1:161:A:LEU:HD13	1:95:A:LYS:H	10	1.06	0.03	1.07
(2,22)	1:107:A:LEU:H	1:75:A:ILE:O	10	1.0	0.05	0.99
(1,525)	1:149:A:LEU:HD11	1:143:A:GLY:H	10	0.9	0.11	0.95
(1,525)	1:149:A:LEU:HD12	1:143:A:GLY:H	10	0.9	0.11	0.95
(1,525)	1:149:A:LEU:HD13	1:143:A:GLY:H	10	0.9	0.11	0.95
(1,181)	1:141:A:ILE:HD11	1:140:A:ASP:H	10	0.89	0.02	0.88
(1,181)	1:141:A:ILE:HD12	1:140:A:ASP:H	10	0.89	0.02	0.88

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)	Median (Å)
(1,181)	1:141:A:ILE:HD13	1:140:A:ASP:H	10	0.89	0.02	0.88
(1,189)	1:124:A:TYR:H	1:125:A:VAL:HG11	10	0.8	0.02	0.81
(1,189)	1:124:A:TYR:H	1:125:A:VAL:HG12	10	0.8	0.02	0.81
(1,189)	1:124:A:TYR:H	1:125:A:VAL:HG13	10	0.8	0.02	0.81
(1,370)	1:148:A:ARG:H	1:149:A:LEU:HD11	10	0.79	0.03	0.8
(1,370)	1:148:A:ARG:H	1:149:A:LEU:HD12	10	0.79	0.03	0.8
(1,370)	1:148:A:ARG:H	1:149:A:LEU:HD13	10	0.79	0.03	0.8
(1,298)	1:161:A:LEU:HD21	1:94:A:ASN:H	10	0.7	0.05	0.68
(1,298)	1:161:A:LEU:HD22	1:94:A:ASN:H	10	0.7	0.05	0.68
(1,298)	1:161:A:LEU:HD23	1:94:A:ASN:H	10	0.7	0.05	0.68
(1,542)	1:106:A:LEU:HD21	1:52:A:LEU:H	10	0.7	0.19	0.7
(1,542)	1:106:A:LEU:HD22	1:52:A:LEU:H	10	0.7	0.19	0.7
(1,542)	1:106:A:LEU:HD23	1:52:A:LEU:H	10	0.7	0.19	0.7
(1,250)	1:64:A:LYS:H	1:105:A:VAL:HG21	10	0.69	0.09	0.69
(1,250)	1:64:A:LYS:H	1:105:A:VAL:HG22	10	0.69	0.09	0.69
(1,250)	1:64:A:LYS:H	1:105:A:VAL:HG23	10	0.69	0.09	0.69
(1,347)	1:85:A:GLN:H	1:125:A:VAL:HG21	10	0.67	0.09	0.7
(1,347)	1:85:A:GLN:H	1:125:A:VAL:HG22	10	0.67	0.09	0.7
(1,347)	1:85:A:GLN:H	1:125:A:VAL:HG23	10	0.67	0.09	0.7
(1,422)	1:161:A:LEU:HD11	1:99:A:LYS:H	10	0.64	0.09	0.67
(1,422)	1:161:A:LEU:HD12	1:99:A:LYS:H	10	0.64	0.09	0.67
(1,422)	1:161:A:LEU:HD13	1:99:A:LYS:H	10	0.64	0.09	0.67
(1,269)	1:140:A:ASP:H	1:137:A:VAL:HG11	10	0.56	0.05	0.55
(1,269)	1:140:A:ASP:H	1:137:A:VAL:HG12	10	0.56	0.05	0.55
(1,269)	1:140:A:ASP:H	1:137:A:VAL:HG13	10	0.56	0.05	0.55
(1,526)	1:162:A:ASP:H	1:149:A:LEU:HD11	10	0.53	0.02	0.54
(1,526)	1:162:A:ASP:H	1:149:A:LEU:HD12	10	0.53	0.02	0.54
(1,526)	1:162:A:ASP:H	1:149:A:LEU:HD13	10	0.53	0.02	0.54
(1,226)	1:165:A:LYS:H	1:100:A:LEU:HD11	10	0.51	0.02	0.52
(1,226)	1:165:A:LYS:H	1:100:A:LEU:HD12	10	0.51	0.02	0.52
(1,226)	1:165:A:LYS:H	1:100:A:LEU:HD13	10	0.51	0.02	0.52
(1,474)	1:141:A:ILE:H	1:139:A:ALA:H	10	0.48	0.03	0.48
(1,297)	1:139:A:ALA:H	1:137:A:VAL:HG21	10	0.47	0.04	0.48
(1,297)	1:139:A:ALA:H	1:137:A:VAL:HG22	10	0.47	0.04	0.48
(1,297)	1:139:A:ALA:H	1:137:A:VAL:HG23	10	0.47	0.04	0.48
(1,265)	1:161:A:LEU:HD11	1:101:A:ALA:H	10	0.47	0.07	0.46
(1,265)	1:161:A:LEU:HD12	1:101:A:ALA:H	10	0.47	0.07	0.46
(1,265)	1:161:A:LEU:HD13	1:101:A:ALA:H	10	0.47	0.07	0.46
(1,210)	1:77:A:HIS:H	1:110:A:VAL:HG11	10	0.46	0.06	0.44
(1,210)	1:77:A:HIS:H	1:110:A:VAL:HG12	10	0.46	0.06	0.44
(1,210)	1:77:A:HIS:H	1:110:A:VAL:HG13	10	0.46	0.06	0.44
(1,57)	1:148:A:ARG:H	1:149:A:LEU:HD11	10	0.45	0.03	0.46

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)	Median (Å)
(1,57)	1:148:A:ARG:H	1:149:A:LEU:HD12	10	0.45	0.03	0.46
(1,57)	1:148:A:ARG:H	1:149:A:LEU:HD13	10	0.45	0.03	0.46
(1,404)	1:158:A:ALA:H	1:149:A:LEU:HD11	10	0.42	0.15	0.33
(1,404)	1:158:A:ALA:H	1:149:A:LEU:HD12	10	0.42	0.15	0.33
(1,404)	1:158:A:ALA:H	1:149:A:LEU:HD13	10	0.42	0.15	0.33
(2,23)	1:109:A:LEU:H	1:77:A:HIS:O	10	0.38	0.09	0.4
(1,126)	1:105:A:VAL:HG11	1:66:A:LYS:H	10	0.37	0.09	0.38
(1,126)	1:105:A:VAL:HG12	1:66:A:LYS:H	10	0.37	0.09	0.38
(1,126)	1:105:A:VAL:HG13	1:66:A:LYS:H	10	0.37	0.09	0.38
(1,506)	1:97:A:ILE:H	1:99:A:LYS:H	10	0.37	0.06	0.39
(1,566)	1:106:A:LEU:HD11	1:75:A:ILE:CD1	10	0.36	0.16	0.34
(1,566)	1:106:A:LEU:HD12	1:75:A:ILE:CD1	10	0.36	0.16	0.34
(1,566)	1:106:A:LEU:HD13	1:75:A:ILE:CD1	10	0.36	0.16	0.34
(1,243)	1:56:A:GLN:H	1:57:A:THR:H	10	0.33	0.01	0.34
(1,432)	1:97:A:ILE:HD11	1:96:A:GLU:H	10	0.33	0.02	0.33
(1,432)	1:97:A:ILE:HD12	1:96:A:GLU:H	10	0.33	0.02	0.33
(1,432)	1:97:A:ILE:HD13	1:96:A:GLU:H	10	0.33	0.02	0.33
(1,377)	1:112:A:GLU:H	1:113:A:THR:H	10	0.32	0.09	0.36
(1,389)	1:138:A:ARG:H	1:137:A:VAL:HG11	10	0.31	0.05	0.34
(1,389)	1:138:A:ARG:H	1:137:A:VAL:HG12	10	0.31	0.05	0.34
(1,389)	1:138:A:ARG:H	1:137:A:VAL:HG13	10	0.31	0.05	0.34
(1,68)	1:44:A:LEU:HD21	1:44:A:LEU:H	10	0.31	0.03	0.33
(1,68)	1:44:A:LEU:HD22	1:44:A:LEU:H	10	0.31	0.03	0.33
(1,68)	1:44:A:LEU:HD23	1:44:A:LEU:H	10	0.31	0.03	0.33
(1,479)	1:56:A:GLN:H	1:57:A:THR:H	10	0.3	0.02	0.3
(1,136)	1:62:A:LEU:HD21	1:131:A:VAL:H	10	0.29	0.07	0.3
(1,136)	1:62:A:LEU:HD22	1:131:A:VAL:H	10	0.29	0.07	0.3
(1,136)	1:62:A:LEU:HD23	1:131:A:VAL:H	10	0.29	0.07	0.3
(1,196)	1:87:A:LEU:HD11	1:92:A:ALA:H	10	0.28	0.01	0.28
(1,196)	1:87:A:LEU:HD12	1:92:A:ALA:H	10	0.28	0.01	0.28
(1,196)	1:87:A:LEU:HD13	1:92:A:ALA:H	10	0.28	0.01	0.28
(1,186)	1:44:A:LEU:HD21	1:44:A:LEU:H	10	0.28	0.03	0.29
(1,186)	1:44:A:LEU:HD22	1:44:A:LEU:H	10	0.28	0.03	0.29
(1,186)	1:44:A:LEU:HD23	1:44:A:LEU:H	10	0.28	0.03	0.29
(1,514)	1:106:A:LEU:HD21	1:103:A:GLN:H	10	0.26	0.19	0.18
(1,514)	1:106:A:LEU:HD22	1:103:A:GLN:H	10	0.26	0.19	0.18
(1,514)	1:106:A:LEU:HD23	1:103:A:GLN:H	10	0.26	0.19	0.18
(1,185)	1:97:A:ILE:H	1:95:A:LYS:H	10	0.25	0.02	0.26
(1,256)	1:141:A:ILE:H	1:139:A:ALA:H	10	0.24	0.03	0.22
(1,436)	1:161:A:LEU:HD11	1:98:A:GLN:H	10	0.23	0.02	0.24
(1,436)	1:161:A:LEU:HD12	1:98:A:GLN:H	10	0.23	0.02	0.24
(1,436)	1:161:A:LEU:HD13	1:98:A:GLN:H	10	0.23	0.02	0.24

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)	Median (Å)
(1,488)	1:171:A:LEU:H	1:172:A:LYS:H	10	0.22	0.02	0.23
(1,529)	1:171:A:LEU:H	1:170:A:LEU:HD11	10	0.21	0.01	0.2
(1,529)	1:171:A:LEU:H	1:170:A:LEU:HD12	10	0.21	0.01	0.2
(1,529)	1:171:A:LEU:H	1:170:A:LEU:HD13	10	0.21	0.01	0.2
(1,62)	1:138:A:ARG:H	1:137:A:VAL:HG11	10	0.21	0.05	0.24
(1,62)	1:138:A:ARG:H	1:137:A:VAL:HG12	10	0.21	0.05	0.24
(1,62)	1:138:A:ARG:H	1:137:A:VAL:HG13	10	0.21	0.05	0.24
(1,169)	1:85:A:GLN:H	1:87:A:LEU:H	10	0.2	0.07	0.18
(1,86)	1:109:A:LEU:HD21	1:107:A:LEU:HD11	10	0.2	0.03	0.2
(1,86)	1:109:A:LEU:HD21	1:107:A:LEU:HD12	10	0.2	0.03	0.2
(1,86)	1:109:A:LEU:HD21	1:107:A:LEU:HD13	10	0.2	0.03	0.2
(1,86)	1:109:A:LEU:HD22	1:107:A:LEU:HD11	10	0.2	0.03	0.2
(1,86)	1:109:A:LEU:HD22	1:107:A:LEU:HD12	10	0.2	0.03	0.2
(1,86)	1:109:A:LEU:HD22	1:107:A:LEU:HD13	10	0.2	0.03	0.2
(1,86)	1:109:A:LEU:HD23	1:107:A:LEU:HD11	10	0.2	0.03	0.2
(1,86)	1:109:A:LEU:HD23	1:107:A:LEU:HD12	10	0.2	0.03	0.2
(1,86)	1:109:A:LEU:HD23	1:107:A:LEU:HD13	10	0.2	0.03	0.2
(1,79)	1:135:A:LEU:HD11	1:62:A:LEU:HD11	10	0.2	0.05	0.18
(1,79)	1:135:A:LEU:HD11	1:62:A:LEU:HD12	10	0.2	0.05	0.18
(1,79)	1:135:A:LEU:HD11	1:62:A:LEU:HD13	10	0.2	0.05	0.18
(1,79)	1:135:A:LEU:HD12	1:62:A:LEU:HD11	10	0.2	0.05	0.18
(1,79)	1:135:A:LEU:HD12	1:62:A:LEU:HD12	10	0.2	0.05	0.18
(1,79)	1:135:A:LEU:HD12	1:62:A:LEU:HD13	10	0.2	0.05	0.18
(1,79)	1:135:A:LEU:HD13	1:62:A:LEU:HD11	10	0.2	0.05	0.18
(1,79)	1:135:A:LEU:HD13	1:62:A:LEU:HD12	10	0.2	0.05	0.18
(1,79)	1:135:A:LEU:HD13	1:62:A:LEU:HD13	10	0.2	0.05	0.18
(1,477)	1:62:A:LEU:H	1:72:A:LEU:HD21	10	0.19	0.03	0.18
(1,477)	1:62:A:LEU:H	1:72:A:LEU:HD22	10	0.19	0.03	0.18
(1,477)	1:62:A:LEU:H	1:72:A:LEU:HD23	10	0.19	0.03	0.18
(1,41)	1:87:A:LEU:HD11	1:160:A:LEU:HD11	10	0.17	0.01	0.17
(1,41)	1:87:A:LEU:HD11	1:160:A:LEU:HD12	10	0.17	0.01	0.17
(1,41)	1:87:A:LEU:HD11	1:160:A:LEU:HD13	10	0.17	0.01	0.17
(1,41)	1:87:A:LEU:HD12	1:160:A:LEU:HD11	10	0.17	0.01	0.17
(1,41)	1:87:A:LEU:HD12	1:160:A:LEU:HD12	10	0.17	0.01	0.17
(1,41)	1:87:A:LEU:HD12	1:160:A:LEU:HD13	10	0.17	0.01	0.17
(1,41)	1:87:A:LEU:HD13	1:160:A:LEU:HD11	10	0.17	0.01	0.17
(1,41)	1:87:A:LEU:HD13	1:160:A:LEU:HD12	10	0.17	0.01	0.17
(1,41)	1:87:A:LEU:HD13	1:160:A:LEU:HD13	10	0.17	0.01	0.17
(1,47)	1:171:A:LEU:HD21	1:171:A:LEU:H	10	0.16	0.01	0.16
(1,47)	1:171:A:LEU:HD22	1:171:A:LEU:H	10	0.16	0.01	0.16
(1,47)	1:171:A:LEU:HD23	1:171:A:LEU:H	10	0.16	0.01	0.16
(1,110)	1:160:A:LEU:HD11	1:159:A:LEU:H	10	0.16	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)
(1,110)	1:160:A:LEU:HD12	1:159:A:LEU:H	10	0.16	0.03	0.15
(1,110)	1:160:A:LEU:HD13	1:159:A:LEU:H	10	0.16	0.03	0.15
(1,238)	1:171:A:LEU:H	1:172:A:LYS:H	10	0.16	0.02	0.16
(1,455)	1:160:A:LEU:HD11	1:165:A:LYS:H	10	0.13	0.01	0.13
(1,455)	1:160:A:LEU:HD12	1:165:A:LYS:H	10	0.13	0.01	0.13
(1,455)	1:160:A:LEU:HD13	1:165:A:LYS:H	10	0.13	0.01	0.13
(1,592)	1:170:A:LEU:HD11	1:170:A:LEU:CD1	10	0.1	0.0	0.1
(1,592)	1:170:A:LEU:HD12	1:170:A:LEU:CD1	10	0.1	0.0	0.1
(1,592)	1:170:A:LEU:HD13	1:170:A:LEU:CD1	10	0.1	0.0	0.1
(1,592)	1:105:A:VAL:HG21	1:105:A:VAL:CG2	10	0.1	0.0	0.1
(1,592)	1:105:A:VAL:HG22	1:105:A:VAL:CG2	10	0.1	0.0	0.1
(1,592)	1:105:A:VAL:HG23	1:105:A:VAL:CG2	10	0.1	0.0	0.1
(1,249)	1:102:A:GLU:H	1:52:A:LEU:HD11	9	0.46	0.08	0.5
(1,249)	1:102:A:GLU:H	1:52:A:LEU:HD12	9	0.46	0.08	0.5
(1,249)	1:102:A:GLU:H	1:52:A:LEU:HD13	9	0.46	0.08	0.5
(1,203)	1:52:A:LEU:HD11	1:103:A:GLN:H	9	0.28	0.06	0.25
(1,203)	1:52:A:LEU:HD12	1:103:A:GLN:H	9	0.28	0.06	0.25
(1,203)	1:52:A:LEU:HD13	1:103:A:GLN:H	9	0.28	0.06	0.25
(1,355)	1:112:A:GLU:H	1:113:A:THR:H	9	0.24	0.06	0.25
(1,120)	1:80:A:GLU:H	1:78:A:LEU:HD11	9	0.24	0.03	0.22
(1,120)	1:80:A:GLU:H	1:78:A:LEU:HD12	9	0.24	0.03	0.22
(1,120)	1:80:A:GLU:H	1:78:A:LEU:HD13	9	0.24	0.03	0.22
(1,56)	1:160:A:LEU:HD11	1:87:A:LEU:HD21	9	0.22	0.01	0.22
(1,56)	1:160:A:LEU:HD11	1:87:A:LEU:HD22	9	0.22	0.01	0.22
(1,56)	1:160:A:LEU:HD11	1:87:A:LEU:HD23	9	0.22	0.01	0.22
(1,56)	1:160:A:LEU:HD12	1:87:A:LEU:HD21	9	0.22	0.01	0.22
(1,56)	1:160:A:LEU:HD12	1:87:A:LEU:HD22	9	0.22	0.01	0.22
(1,56)	1:160:A:LEU:HD12	1:87:A:LEU:HD23	9	0.22	0.01	0.22
(1,56)	1:160:A:LEU:HD13	1:87:A:LEU:HD21	9	0.22	0.01	0.22
(1,56)	1:160:A:LEU:HD13	1:87:A:LEU:HD22	9	0.22	0.01	0.22
(1,56)	1:160:A:LEU:HD13	1:87:A:LEU:HD23	9	0.22	0.01	0.22
(1,24)	1:141:A:ILE:HD11	1:142:A:THR:H	9	0.22	0.05	0.22
(1,24)	1:141:A:ILE:HD12	1:142:A:THR:H	9	0.22	0.05	0.22
(1,24)	1:141:A:ILE:HD13	1:142:A:THR:H	9	0.22	0.05	0.22
(1,235)	1:81:A:CYS:H	1:78:A:LEU:HD11	9	0.21	0.08	0.18
(1,235)	1:81:A:CYS:H	1:78:A:LEU:HD12	9	0.21	0.08	0.18
(1,235)	1:81:A:CYS:H	1:78:A:LEU:HD13	9	0.21	0.08	0.18
(1,23)	1:131:A:VAL:HG11	1:62:A:LEU:HD11	9	0.18	0.03	0.18
(1,23)	1:131:A:VAL:HG11	1:62:A:LEU:HD12	9	0.18	0.03	0.18
(1,23)	1:131:A:VAL:HG11	1:62:A:LEU:HD13	9	0.18	0.03	0.18
(1,23)	1:131:A:VAL:HG12	1:62:A:LEU:HD11	9	0.18	0.03	0.18
(1,23)	1:131:A:VAL:HG12	1:62:A:LEU:HD12	9	0.18	0.03	0.18

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)	Median (Å)
(1,23)	1:131:A:VAL:HG12	1:62:A:LEU:HD13	9	0.18	0.03	0.18
(1,23)	1:131:A:VAL:HG13	1:62:A:LEU:HD11	9	0.18	0.03	0.18
(1,23)	1:131:A:VAL:HG13	1:62:A:LEU:HD12	9	0.18	0.03	0.18
(1,23)	1:131:A:VAL:HG13	1:62:A:LEU:HD13	9	0.18	0.03	0.18
(1,17)	1:136:A:THR:H	1:135:A:LEU:HD11	9	0.14	0.03	0.15
(1,17)	1:136:A:THR:H	1:135:A:LEU:HD12	9	0.14	0.03	0.15
(1,17)	1:136:A:THR:H	1:135:A:LEU:HD13	9	0.14	0.03	0.15
(1,20)	1:102:A:GLU:H	1:52:A:LEU:HD11	8	0.21	0.08	0.24
(1,20)	1:102:A:GLU:H	1:52:A:LEU:HD12	8	0.21	0.08	0.24
(1,20)	1:102:A:GLU:H	1:52:A:LEU:HD13	8	0.21	0.08	0.24
(1,50)	1:105:A:VAL:HG11	1:72:A:LEU:HD11	8	0.18	0.04	0.18
(1,50)	1:105:A:VAL:HG11	1:72:A:LEU:HD12	8	0.18	0.04	0.18
(1,50)	1:105:A:VAL:HG11	1:72:A:LEU:HD13	8	0.18	0.04	0.18
(1,50)	1:105:A:VAL:HG12	1:72:A:LEU:HD11	8	0.18	0.04	0.18
(1,50)	1:105:A:VAL:HG12	1:72:A:LEU:HD12	8	0.18	0.04	0.18
(1,50)	1:105:A:VAL:HG12	1:72:A:LEU:HD13	8	0.18	0.04	0.18
(1,50)	1:105:A:VAL:HG13	1:72:A:LEU:HD11	8	0.18	0.04	0.18
(1,50)	1:105:A:VAL:HG13	1:72:A:LEU:HD12	8	0.18	0.04	0.18
(1,50)	1:105:A:VAL:HG13	1:72:A:LEU:HD13	8	0.18	0.04	0.18
(1,177)	1:102:A:GLU:H	1:100:A:LEU:HD21	8	0.14	0.02	0.15
(1,177)	1:102:A:GLU:H	1:100:A:LEU:HD22	8	0.14	0.02	0.15
(1,177)	1:102:A:GLU:H	1:100:A:LEU:HD23	8	0.14	0.02	0.15
(1,144)	1:51:A:GLN:H	1:52:A:LEU:HD11	7	0.42	0.11	0.45
(1,144)	1:51:A:GLN:H	1:52:A:LEU:HD12	7	0.42	0.11	0.45
(1,144)	1:51:A:GLN:H	1:52:A:LEU:HD13	7	0.42	0.11	0.45
(1,206)	1:48:A:TRP:H	1:47:A:GLY:H	7	0.38	0.17	0.47
(1,112)	1:64:A:LYS:H	1:135:A:LEU:HD11	6	0.18	0.07	0.16
(1,112)	1:64:A:LYS:H	1:135:A:LEU:HD12	6	0.18	0.07	0.16
(1,112)	1:64:A:LYS:H	1:135:A:LEU:HD13	6	0.18	0.07	0.16
(1,456)	1:161:A:LEU:HD11	1:96:A:GLU:H	6	0.11	0.01	0.11
(1,456)	1:161:A:LEU:HD12	1:96:A:GLU:H	6	0.11	0.01	0.11
(1,456)	1:161:A:LEU:HD13	1:96:A:GLU:H	6	0.11	0.01	0.11
(1,350)	1:106:A:LEU:HD11	1:103:A:GLN:H	5	0.23	0.07	0.22
(1,350)	1:106:A:LEU:HD12	1:103:A:GLN:H	5	0.23	0.07	0.22
(1,350)	1:106:A:LEU:HD13	1:103:A:GLN:H	5	0.23	0.07	0.22
(2,28)	1:136:A:THR:H	1:132:A:ASP:O	5	0.14	0.02	0.15
(1,402)	1:166:A:LYS:H	1:141:A:ILE:HD11	5	0.11	0.01	0.11
(1,402)	1:166:A:LYS:H	1:141:A:ILE:HD12	5	0.11	0.01	0.11
(1,402)	1:166:A:LYS:H	1:141:A:ILE:HD13	5	0.11	0.01	0.11
(1,481)	1:106:A:LEU:HD21	1:53:A:ILE:H	4	0.29	0.26	0.16
(1,481)	1:106:A:LEU:HD22	1:53:A:ILE:H	4	0.29	0.26	0.16
(1,481)	1:106:A:LEU:HD23	1:53:A:ILE:H	4	0.29	0.26	0.16

Continued on next page...

Continued from previous page...

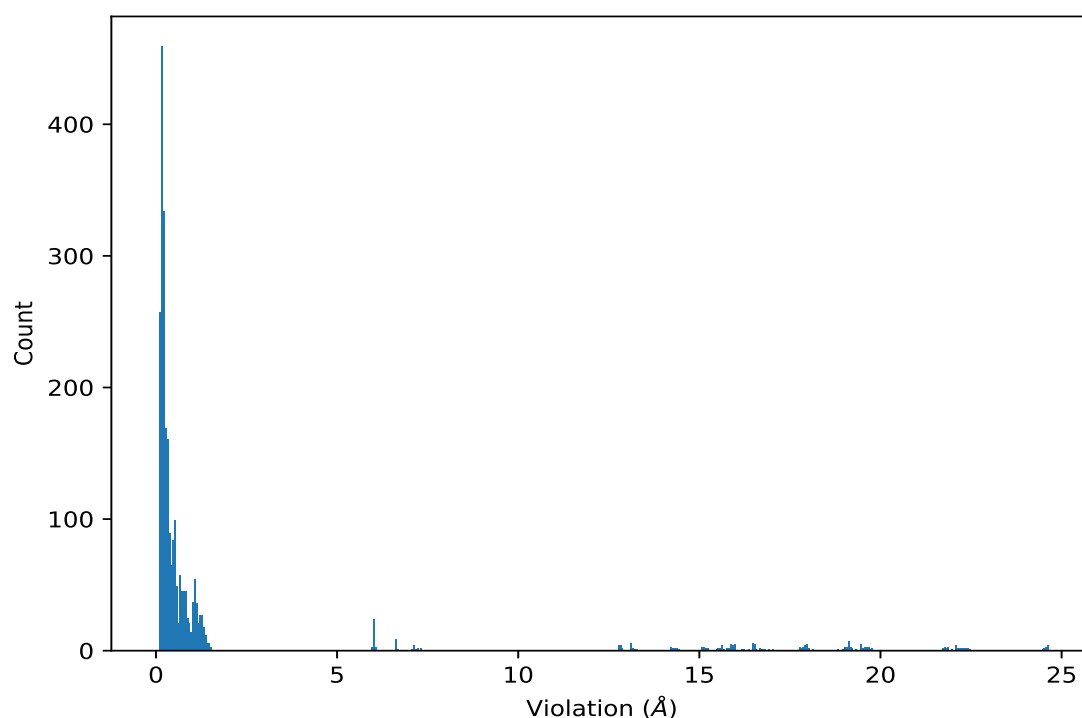
Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)	Median (Å)
(1,12)	1:100:A:LEU:HD11	1:168:A:LEU:HD11	4	0.11	0.0	0.11
(1,12)	1:100:A:LEU:HD11	1:168:A:LEU:HD12	4	0.11	0.0	0.11
(1,12)	1:100:A:LEU:HD11	1:168:A:LEU:HD13	4	0.11	0.0	0.11
(1,12)	1:100:A:LEU:HD12	1:168:A:LEU:HD11	4	0.11	0.0	0.11
(1,12)	1:100:A:LEU:HD12	1:168:A:LEU:HD12	4	0.11	0.0	0.11
(1,12)	1:100:A:LEU:HD12	1:168:A:LEU:HD13	4	0.11	0.0	0.11
(1,12)	1:100:A:LEU:HD13	1:168:A:LEU:HD11	4	0.11	0.0	0.11
(1,12)	1:100:A:LEU:HD13	1:168:A:LEU:HD12	4	0.11	0.0	0.11
(1,12)	1:100:A:LEU:HD13	1:168:A:LEU:HD13	4	0.11	0.0	0.11
(2,29)	1:160:A:LEU:H	1:156:A:ASP:O	3	0.38	0.07	0.41
(1,570)	1:118:A:LEU:HD21	1:62:A:LEU:CD2	3	0.13	0.02	0.12
(1,570)	1:118:A:LEU:HD22	1:62:A:LEU:CD2	3	0.13	0.02	0.12
(1,570)	1:118:A:LEU:HD23	1:62:A:LEU:CD2	3	0.13	0.02	0.12
(1,559)	1:75:A:ILE:HD11	1:106:A:LEU:CD1	2	0.14	0.01	0.14
(1,559)	1:75:A:ILE:HD12	1:106:A:LEU:CD1	2	0.14	0.01	0.14
(1,559)	1:75:A:ILE:HD13	1:106:A:LEU:CD1	2	0.14	0.01	0.14

¹Number of violated models, ²Standard deviation

9.5 All violated distance restraints [i](#)

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

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



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

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

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,2)	1:62:A:LEU:H	1:93:A:GLU:O	5	24.64
(2,2)	1:62:A:LEU:H	1:93:A:GLU:O	2	24.62
(2,2)	1:62:A:LEU:H	1:93:A:GLU:O	8	24.62
(2,2)	1:62:A:LEU:H	1:93:A:GLU:O	1	24.61
(2,2)	1:62:A:LEU:H	1:93:A:GLU:O	4	24.58
(2,2)	1:62:A:LEU:H	1:93:A:GLU:O	7	24.57
(2,2)	1:62:A:LEU:H	1:93:A:GLU:O	10	24.56
(2,2)	1:62:A:LEU:H	1:93:A:GLU:O	9	24.52
(2,2)	1:62:A:LEU:H	1:93:A:GLU:O	6	24.51
(2,2)	1:62:A:LEU:H	1:93:A:GLU:O	3	24.48
(2,1)	1:61:A:ALA:H	1:92:A:ALA:O	8	22.47
(2,1)	1:61:A:ALA:H	1:92:A:ALA:O	5	22.43
(2,1)	1:61:A:ALA:H	1:92:A:ALA:O	7	22.4
(2,1)	1:61:A:ALA:H	1:92:A:ALA:O	1	22.36
(2,1)	1:61:A:ALA:H	1:92:A:ALA:O	2	22.35
(2,1)	1:61:A:ALA:H	1:92:A:ALA:O	4	22.33

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,1)	1:61:A:ALA:H	1:92:A:ALA:O	6	22.31
(2,3)	1:63:A:TYR:H	1:94:A:ASN:O	9	22.28
(2,1)	1:61:A:ALA:H	1:92:A:ALA:O	10	22.28
(2,1)	1:61:A:ALA:H	1:92:A:ALA:O	3	22.24
(2,1)	1:61:A:ALA:H	1:92:A:ALA:O	9	22.24
(2,3)	1:63:A:TYR:H	1:94:A:ASN:O	1	22.18
(2,3)	1:63:A:TYR:H	1:94:A:ASN:O	4	22.17
(2,3)	1:63:A:TYR:H	1:94:A:ASN:O	7	22.14
(2,3)	1:63:A:TYR:H	1:94:A:ASN:O	2	22.13
(2,3)	1:63:A:TYR:H	1:94:A:ASN:O	3	22.09
(2,3)	1:63:A:TYR:H	1:94:A:ASN:O	5	22.07
(2,3)	1:63:A:TYR:H	1:94:A:ASN:O	6	22.07
(2,3)	1:63:A:TYR:H	1:94:A:ASN:O	10	22.05
(2,12)	1:89:A:LYS:H	1:120:A:PRO:O	7	21.95
(2,3)	1:63:A:TYR:H	1:94:A:ASN:O	8	21.87
(2,12)	1:89:A:LYS:H	1:120:A:PRO:O	8	21.86
(2,12)	1:89:A:LYS:H	1:120:A:PRO:O	5	21.85
(2,12)	1:89:A:LYS:H	1:120:A:PRO:O	1	21.83
(2,12)	1:89:A:LYS:H	1:120:A:PRO:O	10	21.8
(2,12)	1:89:A:LYS:H	1:120:A:PRO:O	3	21.78
(2,12)	1:89:A:LYS:H	1:120:A:PRO:O	4	21.78
(2,12)	1:89:A:LYS:H	1:120:A:PRO:O	2	21.77
(2,12)	1:89:A:LYS:H	1:120:A:PRO:O	6	21.72
(2,12)	1:89:A:LYS:H	1:120:A:PRO:O	9	21.71
(2,4)	1:64:A:LYS:H	1:95:A:LYS:O	9	19.76
(2,4)	1:64:A:LYS:H	1:95:A:LYS:O	4	19.75
(2,4)	1:64:A:LYS:H	1:95:A:LYS:O	5	19.7
(2,4)	1:64:A:LYS:H	1:95:A:LYS:O	6	19.69
(2,4)	1:64:A:LYS:H	1:95:A:LYS:O	10	19.67
(2,4)	1:64:A:LYS:H	1:95:A:LYS:O	7	19.65
(2,13)	1:90:A:VAL:H	1:121:A:ASP:O	3	19.63
(2,13)	1:90:A:VAL:H	1:121:A:ASP:O	6	19.63
(2,4)	1:64:A:LYS:H	1:95:A:LYS:O	2	19.6
(2,4)	1:64:A:LYS:H	1:95:A:LYS:O	1	19.59
(2,13)	1:90:A:VAL:H	1:121:A:ASP:O	9	19.57
(2,13)	1:90:A:VAL:H	1:121:A:ASP:O	10	19.55
(2,13)	1:90:A:VAL:H	1:121:A:ASP:O	5	19.53
(2,13)	1:90:A:VAL:H	1:121:A:ASP:O	4	19.52
(2,13)	1:90:A:VAL:H	1:121:A:ASP:O	1	19.49
(2,13)	1:90:A:VAL:H	1:121:A:ASP:O	2	19.49
(2,13)	1:90:A:VAL:H	1:121:A:ASP:O	8	19.48
(2,4)	1:64:A:LYS:H	1:95:A:LYS:O	8	19.48

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,13)	1:90:A:VAL:H	1:121:A:ASP:O	7	19.47
(2,4)	1:64:A:LYS:H	1:95:A:LYS:O	3	19.32
(2,10)	1:87:A:LEU:H	1:118:A:LEU:O	9	19.24
(2,10)	1:87:A:LEU:H	1:118:A:LEU:O	2	19.21
(2,10)	1:87:A:LEU:H	1:118:A:LEU:O	8	19.18
(2,11)	1:88:A:LYS:H	1:119:A:SER:O	1	19.17
(2,11)	1:88:A:LYS:H	1:119:A:SER:O	2	19.16
(2,10)	1:87:A:LEU:H	1:118:A:LEU:O	5	19.14
(2,10)	1:87:A:LEU:H	1:118:A:LEU:O	10	19.13
(2,10)	1:87:A:LEU:H	1:118:A:LEU:O	1	19.12
(2,10)	1:87:A:LEU:H	1:118:A:LEU:O	3	19.12
(2,11)	1:88:A:LYS:H	1:119:A:SER:O	7	19.11
(2,10)	1:87:A:LEU:H	1:118:A:LEU:O	4	19.11
(2,11)	1:88:A:LYS:H	1:119:A:SER:O	5	19.1
(2,11)	1:88:A:LYS:H	1:119:A:SER:O	4	19.06
(2,11)	1:88:A:LYS:H	1:119:A:SER:O	8	19.06
(2,10)	1:87:A:LEU:H	1:118:A:LEU:O	7	19.06
(2,11)	1:88:A:LYS:H	1:119:A:SER:O	3	19.04
(2,10)	1:87:A:LEU:H	1:118:A:LEU:O	6	19.02
(2,11)	1:88:A:LYS:H	1:119:A:SER:O	10	19.0
(2,11)	1:88:A:LYS:H	1:119:A:SER:O	9	18.98
(2,11)	1:88:A:LYS:H	1:119:A:SER:O	6	18.84
(2,14)	1:91:A:PHE:H	1:122:A:GLY:O	8	18.11
(2,20)	1:103:A:GLN:H	1:134:A:SER:O	3	18.03
(2,14)	1:91:A:PHE:H	1:122:A:GLY:O	7	18.01
(2,14)	1:91:A:PHE:H	1:122:A:GLY:O	3	17.99
(2,14)	1:91:A:PHE:H	1:122:A:GLY:O	4	17.99
(2,14)	1:91:A:PHE:H	1:122:A:GLY:O	5	17.98
(2,14)	1:91:A:PHE:H	1:122:A:GLY:O	6	17.98
(2,14)	1:91:A:PHE:H	1:122:A:GLY:O	2	17.96
(2,14)	1:91:A:PHE:H	1:122:A:GLY:O	9	17.94
(2,14)	1:91:A:PHE:H	1:122:A:GLY:O	1	17.92
(2,20)	1:103:A:GLN:H	1:134:A:SER:O	1	17.91
(2,14)	1:91:A:PHE:H	1:122:A:GLY:O	10	17.9
(2,20)	1:103:A:GLN:H	1:134:A:SER:O	5	17.87
(2,20)	1:103:A:GLN:H	1:134:A:SER:O	10	17.86
(2,20)	1:103:A:GLN:H	1:134:A:SER:O	8	17.85
(2,20)	1:103:A:GLN:H	1:134:A:SER:O	4	17.82
(2,20)	1:103:A:GLN:H	1:134:A:SER:O	7	17.82
(2,20)	1:103:A:GLN:H	1:134:A:SER:O	2	17.76
(2,20)	1:103:A:GLN:H	1:134:A:SER:O	9	17.76
(2,20)	1:103:A:GLN:H	1:134:A:SER:O	6	17.75

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,19)	1:102:A:GLU:H	1:133:A:PRO:O	1	17.0
(2,19)	1:102:A:GLU:H	1:133:A:PRO:O	7	16.91
(2,19)	1:102:A:GLU:H	1:133:A:PRO:O	2	16.81
(2,19)	1:102:A:GLU:H	1:133:A:PRO:O	10	16.78
(2,19)	1:102:A:GLU:H	1:133:A:PRO:O	9	16.74
(2,19)	1:102:A:GLU:H	1:133:A:PRO:O	5	16.69
(2,19)	1:102:A:GLU:H	1:133:A:PRO:O	4	16.68
(2,16)	1:99:A:LYS:H	1:130:A:PHE:O	7	16.56
(2,16)	1:99:A:LYS:H	1:130:A:PHE:O	1	16.54
(2,16)	1:99:A:LYS:H	1:130:A:PHE:O	5	16.53
(2,19)	1:102:A:GLU:H	1:133:A:PRO:O	6	16.52
(2,16)	1:99:A:LYS:H	1:130:A:PHE:O	6	16.52
(2,16)	1:99:A:LYS:H	1:130:A:PHE:O	10	16.52
(2,16)	1:99:A:LYS:H	1:130:A:PHE:O	2	16.49
(2,16)	1:99:A:LYS:H	1:130:A:PHE:O	4	16.49
(2,16)	1:99:A:LYS:H	1:130:A:PHE:O	9	16.49
(2,19)	1:102:A:GLU:H	1:133:A:PRO:O	3	16.47
(2,19)	1:102:A:GLU:H	1:133:A:PRO:O	8	16.47
(2,16)	1:99:A:LYS:H	1:130:A:PHE:O	8	16.45
(2,16)	1:99:A:LYS:H	1:130:A:PHE:O	3	16.35
(2,5)	1:65:A:SER:H	1:96:A:GLU:O	3	16.2
(2,6)	1:66:A:LYS:H	1:97:A:ILE:O	3	16.17
(2,5)	1:65:A:SER:H	1:96:A:GLU:O	1	15.99
(2,6)	1:66:A:LYS:H	1:97:A:ILE:O	10	15.98
(2,5)	1:65:A:SER:H	1:96:A:GLU:O	7	15.97
(2,6)	1:66:A:LYS:H	1:97:A:ILE:O	2	15.95
(2,5)	1:65:A:SER:H	1:96:A:GLU:O	5	15.95
(2,6)	1:66:A:LYS:H	1:97:A:ILE:O	5	15.94
(2,5)	1:65:A:SER:H	1:96:A:GLU:O	2	15.92
(2,6)	1:66:A:LYS:H	1:97:A:ILE:O	4	15.91
(2,5)	1:65:A:SER:H	1:96:A:GLU:O	8	15.9
(2,5)	1:65:A:SER:H	1:96:A:GLU:O	10	15.89
(2,6)	1:66:A:LYS:H	1:97:A:ILE:O	7	15.88
(2,5)	1:65:A:SER:H	1:96:A:GLU:O	9	15.87
(2,6)	1:66:A:LYS:H	1:97:A:ILE:O	1	15.86
(2,6)	1:66:A:LYS:H	1:97:A:ILE:O	8	15.86
(2,6)	1:66:A:LYS:H	1:97:A:ILE:O	6	15.8
(2,6)	1:66:A:LYS:H	1:97:A:ILE:O	9	15.8
(2,5)	1:65:A:SER:H	1:96:A:GLU:O	6	15.78
(2,5)	1:65:A:SER:H	1:96:A:GLU:O	4	15.75
(2,15)	1:94:A:ASN:H	1:125:A:VAL:O	4	15.66
(2,15)	1:94:A:ASN:H	1:125:A:VAL:O	9	15.62

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,15)	1:94:A:ASN:H	1:125:A:VAL:O	7	15.61
(2,15)	1:94:A:ASN:H	1:125:A:VAL:O	2	15.6
(2,15)	1:94:A:ASN:H	1:125:A:VAL:O	3	15.6
(2,15)	1:94:A:ASN:H	1:125:A:VAL:O	5	15.56
(2,15)	1:94:A:ASN:H	1:125:A:VAL:O	1	15.55
(2,15)	1:94:A:ASN:H	1:125:A:VAL:O	10	15.54
(2,15)	1:94:A:ASN:H	1:125:A:VAL:O	8	15.53
(2,15)	1:94:A:ASN:H	1:125:A:VAL:O	6	15.46
(2,18)	1:101:A:ALA:H	1:132:A:ASP:O	3	15.24
(2,18)	1:101:A:ALA:H	1:132:A:ASP:O	5	15.2
(2,18)	1:101:A:ALA:H	1:132:A:ASP:O	8	15.18
(2,18)	1:101:A:ALA:H	1:132:A:ASP:O	10	15.16
(2,18)	1:101:A:ALA:H	1:132:A:ASP:O	6	15.12
(2,18)	1:101:A:ALA:H	1:132:A:ASP:O	1	15.11
(2,18)	1:101:A:ALA:H	1:132:A:ASP:O	4	15.1
(2,18)	1:101:A:ALA:H	1:132:A:ASP:O	2	15.09
(2,18)	1:101:A:ALA:H	1:132:A:ASP:O	7	15.08
(2,18)	1:101:A:ALA:H	1:132:A:ASP:O	9	15.05
(2,21)	1:104:A:PHE:H	1:135:A:LEU:O	1	14.4
(2,21)	1:104:A:PHE:H	1:135:A:LEU:O	7	14.38
(2,21)	1:104:A:PHE:H	1:135:A:LEU:O	6	14.35
(2,21)	1:104:A:PHE:H	1:135:A:LEU:O	4	14.34
(2,21)	1:104:A:PHE:H	1:135:A:LEU:O	5	14.33
(2,21)	1:104:A:PHE:H	1:135:A:LEU:O	10	14.28
(2,21)	1:104:A:PHE:H	1:135:A:LEU:O	9	14.25
(2,21)	1:104:A:PHE:H	1:135:A:LEU:O	3	14.24
(2,21)	1:104:A:PHE:H	1:135:A:LEU:O	8	14.24
(2,21)	1:104:A:PHE:H	1:135:A:LEU:O	2	14.2
(2,17)	1:100:A:LEU:H	1:131:A:VAL:O	5	13.25
(2,17)	1:100:A:LEU:H	1:131:A:VAL:O	10	13.2
(2,17)	1:100:A:LEU:H	1:131:A:VAL:O	6	13.16
(2,17)	1:100:A:LEU:H	1:131:A:VAL:O	8	13.15
(2,17)	1:100:A:LEU:H	1:131:A:VAL:O	1	13.13
(2,17)	1:100:A:LEU:H	1:131:A:VAL:O	4	13.13
(2,17)	1:100:A:LEU:H	1:131:A:VAL:O	7	13.12
(2,17)	1:100:A:LEU:H	1:131:A:VAL:O	9	13.11
(2,17)	1:100:A:LEU:H	1:131:A:VAL:O	2	13.1
(2,17)	1:100:A:LEU:H	1:131:A:VAL:O	3	13.1
(2,9)	1:76:A:HIS:H	1:162:A:ASP:O	9	12.89
(2,9)	1:76:A:HIS:H	1:162:A:ASP:O	6	12.85
(2,9)	1:76:A:HIS:H	1:162:A:ASP:O	4	12.83
(2,9)	1:76:A:HIS:H	1:162:A:ASP:O	10	12.83

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,9)	1:76:A:HIS:H	1:162:A:ASP:O	2	12.81
(2,9)	1:76:A:HIS:H	1:162:A:ASP:O	5	12.81
(2,9)	1:76:A:HIS:H	1:162:A:ASP:O	1	12.79
(2,9)	1:76:A:HIS:H	1:162:A:ASP:O	8	12.79
(2,9)	1:76:A:HIS:H	1:162:A:ASP:O	3	12.77
(2,9)	1:76:A:HIS:H	1:162:A:ASP:O	7	12.76
(2,7)	1:72:A:LEU:H	1:166:A:LYS:O	6	7.31
(2,7)	1:72:A:LEU:H	1:166:A:LYS:O	3	7.3
(2,7)	1:72:A:LEU:H	1:166:A:LYS:O	5	7.24
(2,7)	1:72:A:LEU:H	1:166:A:LYS:O	8	7.24
(2,7)	1:72:A:LEU:H	1:166:A:LYS:O	2	7.16
(2,7)	1:72:A:LEU:H	1:166:A:LYS:O	1	7.14
(2,7)	1:72:A:LEU:H	1:166:A:LYS:O	10	7.14
(2,7)	1:72:A:LEU:H	1:166:A:LYS:O	9	7.13
(2,7)	1:72:A:LEU:H	1:166:A:LYS:O	7	7.11
(2,7)	1:72:A:LEU:H	1:166:A:LYS:O	4	7.09
(2,8)	1:74:A:ILE:H	1:164:A:MET:O	7	6.67
(2,8)	1:74:A:ILE:H	1:164:A:MET:O	1	6.64
(2,8)	1:74:A:ILE:H	1:164:A:MET:O	5	6.64
(2,8)	1:74:A:ILE:H	1:164:A:MET:O	3	6.63
(2,8)	1:74:A:ILE:H	1:164:A:MET:O	6	6.63
(2,8)	1:74:A:ILE:H	1:164:A:MET:O	2	6.62
(2,8)	1:74:A:ILE:H	1:164:A:MET:O	4	6.62
(2,8)	1:74:A:ILE:H	1:164:A:MET:O	8	6.62
(2,8)	1:74:A:ILE:H	1:164:A:MET:O	9	6.62
(2,8)	1:74:A:ILE:H	1:164:A:MET:O	10	6.61
(1,595)	1:170:A:LEU:HD21	1:105:A:VAL:CG2	7	6.07
(1,595)	1:170:A:LEU:HD22	1:105:A:VAL:CG2	7	6.07
(1,595)	1:170:A:LEU:HD23	1:105:A:VAL:CG2	7	6.07
(1,595)	1:170:A:LEU:HD21	1:105:A:VAL:CG2	2	6.04
(1,595)	1:170:A:LEU:HD22	1:105:A:VAL:CG2	2	6.04
(1,595)	1:170:A:LEU:HD23	1:105:A:VAL:CG2	2	6.04
(1,595)	1:170:A:LEU:HD21	1:105:A:VAL:CG2	10	6.04
(1,595)	1:170:A:LEU:HD22	1:105:A:VAL:CG2	10	6.04
(1,595)	1:170:A:LEU:HD23	1:105:A:VAL:CG2	10	6.04
(1,595)	1:170:A:LEU:HD21	1:105:A:VAL:CG2	3	6.02
(1,595)	1:170:A:LEU:HD22	1:105:A:VAL:CG2	3	6.02
(1,595)	1:170:A:LEU:HD23	1:105:A:VAL:CG2	3	6.02
(1,595)	1:170:A:LEU:HD21	1:105:A:VAL:CG2	6	6.02
(1,595)	1:170:A:LEU:HD22	1:105:A:VAL:CG2	6	6.02
(1,595)	1:170:A:LEU:HD23	1:105:A:VAL:CG2	6	6.02
(1,595)	1:170:A:LEU:HD21	1:105:A:VAL:CG2	4	6.01

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,595)	1:170:A:LEU:HD22	1:105:A:VAL:CG2	4	6.01
(1,595)	1:170:A:LEU:HD23	1:105:A:VAL:CG2	4	6.01
(1,595)	1:170:A:LEU:HD21	1:105:A:VAL:CG2	5	6.01
(1,595)	1:170:A:LEU:HD22	1:105:A:VAL:CG2	5	6.01
(1,595)	1:170:A:LEU:HD23	1:105:A:VAL:CG2	5	6.01
(1,595)	1:170:A:LEU:HD21	1:105:A:VAL:CG2	8	6.01
(1,595)	1:170:A:LEU:HD22	1:105:A:VAL:CG2	8	6.01
(1,595)	1:170:A:LEU:HD23	1:105:A:VAL:CG2	8	6.01
(1,595)	1:170:A:LEU:HD21	1:105:A:VAL:CG2	1	6.0
(1,595)	1:170:A:LEU:HD22	1:105:A:VAL:CG2	1	6.0
(1,595)	1:170:A:LEU:HD23	1:105:A:VAL:CG2	1	6.0
(1,595)	1:170:A:LEU:HD21	1:105:A:VAL:CG2	9	5.95
(1,595)	1:170:A:LEU:HD22	1:105:A:VAL:CG2	9	5.95
(1,595)	1:170:A:LEU:HD23	1:105:A:VAL:CG2	9	5.95
(1,519)	1:56:A:GLN:H	1:53:A:ILE:HD11	7	1.51
(1,519)	1:56:A:GLN:H	1:53:A:ILE:HD12	7	1.51
(1,519)	1:56:A:GLN:H	1:53:A:ILE:HD13	7	1.51
(1,519)	1:56:A:GLN:H	1:53:A:ILE:HD11	1	1.47
(1,519)	1:56:A:GLN:H	1:53:A:ILE:HD12	1	1.47
(1,519)	1:56:A:GLN:H	1:53:A:ILE:HD13	1	1.47
(1,519)	1:56:A:GLN:H	1:53:A:ILE:HD11	9	1.47
(1,519)	1:56:A:GLN:H	1:53:A:ILE:HD12	9	1.47
(1,519)	1:56:A:GLN:H	1:53:A:ILE:HD13	9	1.47
(1,519)	1:56:A:GLN:H	1:53:A:ILE:HD11	10	1.44
(1,519)	1:56:A:GLN:H	1:53:A:ILE:HD12	10	1.44
(1,519)	1:56:A:GLN:H	1:53:A:ILE:HD13	10	1.44
(1,519)	1:56:A:GLN:H	1:53:A:ILE:HD11	2	1.4
(1,519)	1:56:A:GLN:H	1:53:A:ILE:HD12	2	1.4
(1,519)	1:56:A:GLN:H	1:53:A:ILE:HD13	2	1.4
(1,519)	1:56:A:GLN:H	1:53:A:ILE:HD11	5	1.38
(1,519)	1:56:A:GLN:H	1:53:A:ILE:HD12	5	1.38
(1,519)	1:56:A:GLN:H	1:53:A:ILE:HD13	5	1.38
(1,426)	1:77:A:HIS:H	1:125:A:VAL:HG11	6	1.37
(1,426)	1:77:A:HIS:H	1:125:A:VAL:HG12	6	1.37
(1,426)	1:77:A:HIS:H	1:125:A:VAL:HG13	6	1.37
(1,201)	1:78:A:LEU:H	1:125:A:VAL:HG21	6	1.36
(1,201)	1:78:A:LEU:H	1:125:A:VAL:HG22	6	1.36
(1,201)	1:78:A:LEU:H	1:125:A:VAL:HG23	6	1.36
(1,337)	1:62:A:LEU:HD21	1:132:A:ASP:H	5	1.35
(1,337)	1:62:A:LEU:HD22	1:132:A:ASP:H	5	1.35
(1,337)	1:62:A:LEU:HD23	1:132:A:ASP:H	5	1.35
(1,519)	1:56:A:GLN:H	1:53:A:ILE:HD11	4	1.33

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,519)	1:56:A:GLN:H	1:53:A:ILE:HD12	4	1.33
(1,519)	1:56:A:GLN:H	1:53:A:ILE:HD13	4	1.33
(1,337)	1:62:A:LEU:HD21	1:132:A:ASP:H	8	1.33
(1,337)	1:62:A:LEU:HD22	1:132:A:ASP:H	8	1.33
(1,337)	1:62:A:LEU:HD23	1:132:A:ASP:H	8	1.33
(1,519)	1:56:A:GLN:H	1:53:A:ILE:HD11	6	1.32
(1,519)	1:56:A:GLN:H	1:53:A:ILE:HD12	6	1.32
(1,519)	1:56:A:GLN:H	1:53:A:ILE:HD13	6	1.32
(1,426)	1:77:A:HIS:H	1:125:A:VAL:HG11	10	1.31
(1,426)	1:77:A:HIS:H	1:125:A:VAL:HG12	10	1.31
(1,426)	1:77:A:HIS:H	1:125:A:VAL:HG13	10	1.31
(1,337)	1:62:A:LEU:HD21	1:132:A:ASP:H	2	1.3
(1,337)	1:62:A:LEU:HD22	1:132:A:ASP:H	2	1.3
(1,337)	1:62:A:LEU:HD23	1:132:A:ASP:H	2	1.3
(1,27)	1:78:A:LEU:H	1:125:A:VAL:HG21	6	1.3
(1,27)	1:78:A:LEU:H	1:125:A:VAL:HG22	6	1.3
(1,27)	1:78:A:LEU:H	1:125:A:VAL:HG23	6	1.3
(1,337)	1:62:A:LEU:HD21	1:132:A:ASP:H	3	1.29
(1,337)	1:62:A:LEU:HD22	1:132:A:ASP:H	3	1.29
(1,337)	1:62:A:LEU:HD23	1:132:A:ASP:H	3	1.29
(1,337)	1:62:A:LEU:HD21	1:132:A:ASP:H	6	1.29
(1,337)	1:62:A:LEU:HD22	1:132:A:ASP:H	6	1.29
(1,337)	1:62:A:LEU:HD23	1:132:A:ASP:H	6	1.29
(1,426)	1:77:A:HIS:H	1:125:A:VAL:HG11	2	1.28
(1,426)	1:77:A:HIS:H	1:125:A:VAL:HG12	2	1.28
(1,426)	1:77:A:HIS:H	1:125:A:VAL:HG13	2	1.28
(1,337)	1:62:A:LEU:HD21	1:132:A:ASP:H	9	1.28
(1,337)	1:62:A:LEU:HD22	1:132:A:ASP:H	9	1.28
(1,337)	1:62:A:LEU:HD23	1:132:A:ASP:H	9	1.28
(1,426)	1:77:A:HIS:H	1:125:A:VAL:HG11	5	1.27
(1,426)	1:77:A:HIS:H	1:125:A:VAL:HG12	5	1.27
(1,426)	1:77:A:HIS:H	1:125:A:VAL:HG13	5	1.27
(1,201)	1:78:A:LEU:H	1:125:A:VAL:HG21	2	1.27
(1,201)	1:78:A:LEU:H	1:125:A:VAL:HG22	2	1.27
(1,201)	1:78:A:LEU:H	1:125:A:VAL:HG23	2	1.27
(1,426)	1:77:A:HIS:H	1:125:A:VAL:HG11	4	1.26
(1,426)	1:77:A:HIS:H	1:125:A:VAL:HG12	4	1.26
(1,426)	1:77:A:HIS:H	1:125:A:VAL:HG13	4	1.26
(1,337)	1:62:A:LEU:HD21	1:132:A:ASP:H	1	1.26
(1,337)	1:62:A:LEU:HD22	1:132:A:ASP:H	1	1.26
(1,337)	1:62:A:LEU:HD23	1:132:A:ASP:H	1	1.26
(1,143)	1:134:A:SER:H	1:135:A:LEU:HD11	8	1.26

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,143)	1:134:A:SER:H	1:135:A:LEU:HD12	8	1.26
(1,143)	1:134:A:SER:H	1:135:A:LEU:HD13	8	1.26
(1,337)	1:62:A:LEU:HD21	1:132:A:ASP:H	10	1.24
(1,337)	1:62:A:LEU:HD22	1:132:A:ASP:H	10	1.24
(1,337)	1:62:A:LEU:HD23	1:132:A:ASP:H	10	1.24
(1,201)	1:78:A:LEU:H	1:125:A:VAL:HG21	10	1.24
(1,201)	1:78:A:LEU:H	1:125:A:VAL:HG22	10	1.24
(1,201)	1:78:A:LEU:H	1:125:A:VAL:HG23	10	1.24
(1,337)	1:62:A:LEU:HD21	1:132:A:ASP:H	4	1.23
(1,337)	1:62:A:LEU:HD22	1:132:A:ASP:H	4	1.23
(1,337)	1:62:A:LEU:HD23	1:132:A:ASP:H	4	1.23
(1,337)	1:62:A:LEU:HD21	1:132:A:ASP:H	7	1.23
(1,337)	1:62:A:LEU:HD22	1:132:A:ASP:H	7	1.23
(1,337)	1:62:A:LEU:HD23	1:132:A:ASP:H	7	1.23
(1,143)	1:134:A:SER:H	1:135:A:LEU:HD11	5	1.21
(1,143)	1:134:A:SER:H	1:135:A:LEU:HD12	5	1.21
(1,143)	1:134:A:SER:H	1:135:A:LEU:HD13	5	1.21
(1,27)	1:78:A:LEU:H	1:125:A:VAL:HG21	2	1.21
(1,27)	1:78:A:LEU:H	1:125:A:VAL:HG22	2	1.21
(1,27)	1:78:A:LEU:H	1:125:A:VAL:HG23	2	1.21
(1,426)	1:77:A:HIS:H	1:125:A:VAL:HG11	3	1.2
(1,426)	1:77:A:HIS:H	1:125:A:VAL:HG12	3	1.2
(1,426)	1:77:A:HIS:H	1:125:A:VAL:HG13	3	1.2
(1,201)	1:78:A:LEU:H	1:125:A:VAL:HG21	3	1.2
(1,201)	1:78:A:LEU:H	1:125:A:VAL:HG22	3	1.2
(1,201)	1:78:A:LEU:H	1:125:A:VAL:HG23	3	1.2
(1,201)	1:78:A:LEU:H	1:125:A:VAL:HG21	4	1.2
(1,201)	1:78:A:LEU:H	1:125:A:VAL:HG22	4	1.2
(1,201)	1:78:A:LEU:H	1:125:A:VAL:HG23	4	1.2
(1,201)	1:78:A:LEU:H	1:125:A:VAL:HG21	1	1.19
(1,201)	1:78:A:LEU:H	1:125:A:VAL:HG22	1	1.19
(1,201)	1:78:A:LEU:H	1:125:A:VAL:HG23	1	1.19
(1,27)	1:78:A:LEU:H	1:125:A:VAL:HG21	10	1.18
(1,27)	1:78:A:LEU:H	1:125:A:VAL:HG22	10	1.18
(1,27)	1:78:A:LEU:H	1:125:A:VAL:HG23	10	1.18
(1,426)	1:77:A:HIS:H	1:125:A:VAL:HG11	1	1.17
(1,426)	1:77:A:HIS:H	1:125:A:VAL:HG12	1	1.17
(1,426)	1:77:A:HIS:H	1:125:A:VAL:HG13	1	1.17
(1,426)	1:77:A:HIS:H	1:125:A:VAL:HG11	8	1.17
(1,426)	1:77:A:HIS:H	1:125:A:VAL:HG12	8	1.17
(1,426)	1:77:A:HIS:H	1:125:A:VAL:HG13	8	1.17
(1,201)	1:78:A:LEU:H	1:125:A:VAL:HG21	5	1.17

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,201)	1:78:A:LEU:H	1:125:A:VAL:HG22	5	1.17
(1,201)	1:78:A:LEU:H	1:125:A:VAL:HG23	5	1.17
(1,201)	1:78:A:LEU:H	1:125:A:VAL:HG21	8	1.16
(1,201)	1:78:A:LEU:H	1:125:A:VAL:HG22	8	1.16
(1,201)	1:78:A:LEU:H	1:125:A:VAL:HG23	8	1.16
(1,143)	1:134:A:SER:H	1:135:A:LEU:HD11	6	1.16
(1,143)	1:134:A:SER:H	1:135:A:LEU:HD12	6	1.16
(1,143)	1:134:A:SER:H	1:135:A:LEU:HD13	6	1.16
(1,426)	1:77:A:HIS:H	1:125:A:VAL:HG11	9	1.14
(1,426)	1:77:A:HIS:H	1:125:A:VAL:HG12	9	1.14
(1,426)	1:77:A:HIS:H	1:125:A:VAL:HG13	9	1.14
(1,108)	1:87:A:LEU:HD11	1:153:A:GLU:H	9	1.14
(1,108)	1:87:A:LEU:HD12	1:153:A:GLU:H	9	1.14
(1,108)	1:87:A:LEU:HD13	1:153:A:GLU:H	9	1.14
(1,27)	1:78:A:LEU:H	1:125:A:VAL:HG21	3	1.14
(1,27)	1:78:A:LEU:H	1:125:A:VAL:HG22	3	1.14
(1,27)	1:78:A:LEU:H	1:125:A:VAL:HG23	3	1.14
(1,27)	1:78:A:LEU:H	1:125:A:VAL:HG21	4	1.14
(1,27)	1:78:A:LEU:H	1:125:A:VAL:HG22	4	1.14
(1,27)	1:78:A:LEU:H	1:125:A:VAL:HG23	4	1.14
(1,143)	1:134:A:SER:H	1:135:A:LEU:HD11	10	1.13
(1,143)	1:134:A:SER:H	1:135:A:LEU:HD12	10	1.13
(1,143)	1:134:A:SER:H	1:135:A:LEU:HD13	10	1.13
(1,27)	1:78:A:LEU:H	1:125:A:VAL:HG21	1	1.13
(1,27)	1:78:A:LEU:H	1:125:A:VAL:HG22	1	1.13
(1,27)	1:78:A:LEU:H	1:125:A:VAL:HG23	1	1.13
(1,143)	1:134:A:SER:H	1:135:A:LEU:HD11	3	1.12
(1,143)	1:134:A:SER:H	1:135:A:LEU:HD12	3	1.12
(1,143)	1:134:A:SER:H	1:135:A:LEU:HD13	3	1.12
(1,108)	1:87:A:LEU:HD11	1:153:A:GLU:H	4	1.11
(1,108)	1:87:A:LEU:HD12	1:153:A:GLU:H	4	1.11
(1,108)	1:87:A:LEU:HD13	1:153:A:GLU:H	4	1.11
(1,108)	1:87:A:LEU:HD11	1:153:A:GLU:H	6	1.11
(1,108)	1:87:A:LEU:HD12	1:153:A:GLU:H	6	1.11
(1,108)	1:87:A:LEU:HD13	1:153:A:GLU:H	6	1.11
(1,108)	1:87:A:LEU:HD11	1:153:A:GLU:H	10	1.11
(1,108)	1:87:A:LEU:HD12	1:153:A:GLU:H	10	1.11
(1,108)	1:87:A:LEU:HD13	1:153:A:GLU:H	10	1.11
(1,27)	1:78:A:LEU:H	1:125:A:VAL:HG21	5	1.11
(1,27)	1:78:A:LEU:H	1:125:A:VAL:HG22	5	1.11
(1,27)	1:78:A:LEU:H	1:125:A:VAL:HG23	5	1.11
(1,27)	1:78:A:LEU:H	1:125:A:VAL:HG21	8	1.1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,27)	1:78:A:LEU:H	1:125:A:VAL:HG22	8	1.1
(1,27)	1:78:A:LEU:H	1:125:A:VAL:HG23	8	1.1
(1,426)	1:77:A:HIS:H	1:125:A:VAL:HG11	7	1.09
(1,426)	1:77:A:HIS:H	1:125:A:VAL:HG12	7	1.09
(1,426)	1:77:A:HIS:H	1:125:A:VAL:HG13	7	1.09
(1,378)	1:161:A:LEU:HD11	1:95:A:LYS:H	2	1.09
(1,378)	1:161:A:LEU:HD12	1:95:A:LYS:H	2	1.09
(1,378)	1:161:A:LEU:HD13	1:95:A:LYS:H	2	1.09
(1,108)	1:87:A:LEU:HD11	1:153:A:GLU:H	1	1.09
(1,108)	1:87:A:LEU:HD12	1:153:A:GLU:H	1	1.09
(1,108)	1:87:A:LEU:HD13	1:153:A:GLU:H	1	1.09
(1,108)	1:87:A:LEU:HD11	1:153:A:GLU:H	2	1.09
(1,108)	1:87:A:LEU:HD12	1:153:A:GLU:H	2	1.09
(1,108)	1:87:A:LEU:HD13	1:153:A:GLU:H	2	1.09
(2,22)	1:107:A:LEU:H	1:75:A:ILE:O	4	1.08
(1,378)	1:161:A:LEU:HD21	1:95:A:LYS:H	4	1.08
(1,378)	1:161:A:LEU:HD22	1:95:A:LYS:H	4	1.08
(1,378)	1:161:A:LEU:HD23	1:95:A:LYS:H	4	1.08
(1,378)	1:161:A:LEU:HD11	1:95:A:LYS:H	5	1.08
(1,378)	1:161:A:LEU:HD12	1:95:A:LYS:H	5	1.08
(1,378)	1:161:A:LEU:HD13	1:95:A:LYS:H	5	1.08
(1,378)	1:161:A:LEU:HD21	1:95:A:LYS:H	8	1.08
(1,378)	1:161:A:LEU:HD22	1:95:A:LYS:H	8	1.08
(1,378)	1:161:A:LEU:HD23	1:95:A:LYS:H	8	1.08
(1,201)	1:78:A:LEU:H	1:125:A:VAL:HG21	9	1.08
(1,201)	1:78:A:LEU:H	1:125:A:VAL:HG22	9	1.08
(1,201)	1:78:A:LEU:H	1:125:A:VAL:HG23	9	1.08
(1,378)	1:161:A:LEU:HD21	1:95:A:LYS:H	1	1.07
(1,378)	1:161:A:LEU:HD22	1:95:A:LYS:H	1	1.07
(1,378)	1:161:A:LEU:HD23	1:95:A:LYS:H	1	1.07
(1,378)	1:161:A:LEU:HD11	1:95:A:LYS:H	3	1.07
(1,378)	1:161:A:LEU:HD12	1:95:A:LYS:H	3	1.07
(1,378)	1:161:A:LEU:HD13	1:95:A:LYS:H	3	1.07
(1,378)	1:161:A:LEU:HD11	1:95:A:LYS:H	7	1.07
(1,378)	1:161:A:LEU:HD12	1:95:A:LYS:H	7	1.07
(1,378)	1:161:A:LEU:HD13	1:95:A:LYS:H	7	1.07
(1,143)	1:134:A:SER:H	1:135:A:LEU:HD11	9	1.07
(1,143)	1:134:A:SER:H	1:135:A:LEU:HD12	9	1.07
(1,143)	1:134:A:SER:H	1:135:A:LEU:HD13	9	1.07
(1,108)	1:87:A:LEU:HD11	1:153:A:GLU:H	8	1.07
(1,108)	1:87:A:LEU:HD12	1:153:A:GLU:H	8	1.07
(1,108)	1:87:A:LEU:HD13	1:153:A:GLU:H	8	1.07

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,22)	1:107:A:LEU:H	1:75:A:ILE:O	9	1.06
(1,519)	1:56:A:GLN:H	1:53:A:ILE:HD11	8	1.06
(1,519)	1:56:A:GLN:H	1:53:A:ILE:HD12	8	1.06
(1,519)	1:56:A:GLN:H	1:53:A:ILE:HD13	8	1.06
(1,201)	1:78:A:LEU:H	1:125:A:VAL:HG21	7	1.06
(1,201)	1:78:A:LEU:H	1:125:A:VAL:HG22	7	1.06
(1,201)	1:78:A:LEU:H	1:125:A:VAL:HG23	7	1.06
(1,143)	1:134:A:SER:H	1:135:A:LEU:HD11	4	1.06
(1,143)	1:134:A:SER:H	1:135:A:LEU:HD12	4	1.06
(1,143)	1:134:A:SER:H	1:135:A:LEU:HD13	4	1.06
(1,108)	1:87:A:LEU:HD11	1:153:A:GLU:H	5	1.06
(1,108)	1:87:A:LEU:HD12	1:153:A:GLU:H	5	1.06
(1,108)	1:87:A:LEU:HD13	1:153:A:GLU:H	5	1.06
(2,22)	1:107:A:LEU:H	1:75:A:ILE:O	6	1.05
(1,108)	1:87:A:LEU:HD11	1:153:A:GLU:H	7	1.03
(1,108)	1:87:A:LEU:HD12	1:153:A:GLU:H	7	1.03
(1,108)	1:87:A:LEU:HD13	1:153:A:GLU:H	7	1.03
(1,525)	1:149:A:LEU:HD11	1:143:A:GLY:H	8	1.02
(1,525)	1:149:A:LEU:HD12	1:143:A:GLY:H	8	1.02
(1,525)	1:149:A:LEU:HD13	1:143:A:GLY:H	8	1.02
(1,378)	1:161:A:LEU:HD11	1:95:A:LYS:H	9	1.02
(1,378)	1:161:A:LEU:HD12	1:95:A:LYS:H	9	1.02
(1,378)	1:161:A:LEU:HD13	1:95:A:LYS:H	9	1.02
(1,378)	1:161:A:LEU:HD11	1:95:A:LYS:H	10	1.02
(1,378)	1:161:A:LEU:HD12	1:95:A:LYS:H	10	1.02
(1,378)	1:161:A:LEU:HD13	1:95:A:LYS:H	10	1.02
(1,143)	1:134:A:SER:H	1:135:A:LEU:HD11	7	1.02
(1,143)	1:134:A:SER:H	1:135:A:LEU:HD12	7	1.02
(1,143)	1:134:A:SER:H	1:135:A:LEU:HD13	7	1.02
(1,27)	1:78:A:LEU:H	1:125:A:VAL:HG21	9	1.02
(1,27)	1:78:A:LEU:H	1:125:A:VAL:HG22	9	1.02
(1,27)	1:78:A:LEU:H	1:125:A:VAL:HG23	9	1.02
(1,525)	1:149:A:LEU:HD11	1:143:A:GLY:H	1	1.01
(1,525)	1:149:A:LEU:HD12	1:143:A:GLY:H	1	1.01
(1,525)	1:149:A:LEU:HD13	1:143:A:GLY:H	1	1.01
(1,108)	1:87:A:LEU:HD11	1:153:A:GLU:H	3	1.01
(1,108)	1:87:A:LEU:HD12	1:153:A:GLU:H	3	1.01
(1,108)	1:87:A:LEU:HD13	1:153:A:GLU:H	3	1.01
(2,22)	1:107:A:LEU:H	1:75:A:ILE:O	1	1.0
(1,525)	1:149:A:LEU:HD11	1:143:A:GLY:H	10	1.0
(1,525)	1:149:A:LEU:HD12	1:143:A:GLY:H	10	1.0
(1,525)	1:149:A:LEU:HD13	1:143:A:GLY:H	10	1.0

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,378)	1:161:A:LEU:HD11	1:95:A:LYS:H	6	1.0
(1,378)	1:161:A:LEU:HD12	1:95:A:LYS:H	6	1.0
(1,378)	1:161:A:LEU:HD13	1:95:A:LYS:H	6	1.0
(1,143)	1:134:A:SER:H	1:135:A:LEU:HD11	2	1.0
(1,143)	1:134:A:SER:H	1:135:A:LEU:HD12	2	1.0
(1,143)	1:134:A:SER:H	1:135:A:LEU:HD13	2	1.0
(1,27)	1:78:A:LEU:H	1:125:A:VAL:HG21	7	1.0
(1,27)	1:78:A:LEU:H	1:125:A:VAL:HG22	7	1.0
(1,27)	1:78:A:LEU:H	1:125:A:VAL:HG23	7	1.0
(2,22)	1:107:A:LEU:H	1:75:A:ILE:O	5	0.99
(2,22)	1:107:A:LEU:H	1:75:A:ILE:O	8	0.99
(2,22)	1:107:A:LEU:H	1:75:A:ILE:O	3	0.98
(1,542)	1:106:A:LEU:HD21	1:52:A:LEU:H	7	0.98
(1,542)	1:106:A:LEU:HD22	1:52:A:LEU:H	7	0.98
(1,542)	1:106:A:LEU:HD23	1:52:A:LEU:H	7	0.98
(1,525)	1:149:A:LEU:HD11	1:143:A:GLY:H	9	0.98
(1,525)	1:149:A:LEU:HD12	1:143:A:GLY:H	9	0.98
(1,525)	1:149:A:LEU:HD13	1:143:A:GLY:H	9	0.98
(2,22)	1:107:A:LEU:H	1:75:A:ILE:O	2	0.97
(2,22)	1:107:A:LEU:H	1:75:A:ILE:O	10	0.96
(1,525)	1:149:A:LEU:HD11	1:143:A:GLY:H	7	0.96
(1,525)	1:149:A:LEU:HD12	1:143:A:GLY:H	7	0.96
(1,525)	1:149:A:LEU:HD13	1:143:A:GLY:H	7	0.96
(1,525)	1:149:A:LEU:HD11	1:143:A:GLY:H	2	0.94
(1,525)	1:149:A:LEU:HD12	1:143:A:GLY:H	2	0.94
(1,525)	1:149:A:LEU:HD13	1:143:A:GLY:H	2	0.94
(1,143)	1:134:A:SER:H	1:135:A:LEU:HD11	1	0.94
(1,143)	1:134:A:SER:H	1:135:A:LEU:HD12	1	0.94
(1,143)	1:134:A:SER:H	1:135:A:LEU:HD13	1	0.94
(1,542)	1:106:A:LEU:HD21	1:52:A:LEU:H	8	0.93
(1,542)	1:106:A:LEU:HD22	1:52:A:LEU:H	8	0.93
(1,542)	1:106:A:LEU:HD23	1:52:A:LEU:H	8	0.93
(1,181)	1:141:A:ILE:HD11	1:140:A:ASP:H	5	0.91
(1,181)	1:141:A:ILE:HD12	1:140:A:ASP:H	5	0.91
(1,181)	1:141:A:ILE:HD13	1:140:A:ASP:H	5	0.91
(1,181)	1:141:A:ILE:HD11	1:140:A:ASP:H	10	0.91
(1,181)	1:141:A:ILE:HD12	1:140:A:ASP:H	10	0.91
(1,181)	1:141:A:ILE:HD13	1:140:A:ASP:H	10	0.91
(1,181)	1:141:A:ILE:HD11	1:140:A:ASP:H	3	0.9
(1,181)	1:141:A:ILE:HD12	1:140:A:ASP:H	3	0.9
(1,181)	1:141:A:ILE:HD13	1:140:A:ASP:H	3	0.9
(1,181)	1:141:A:ILE:HD11	1:140:A:ASP:H	7	0.9

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,181)	1:141:A:ILE:HD12	1:140:A:ASP:H	7	0.9
(1,181)	1:141:A:ILE:HD13	1:140:A:ASP:H	7	0.9
(2,22)	1:107:A:LEU:H	1:75:A:ILE:O	7	0.89
(1,181)	1:141:A:ILE:HD11	1:140:A:ASP:H	1	0.89
(1,181)	1:141:A:ILE:HD12	1:140:A:ASP:H	1	0.89
(1,181)	1:141:A:ILE:HD13	1:140:A:ASP:H	1	0.89
(1,181)	1:141:A:ILE:HD11	1:140:A:ASP:H	2	0.88
(1,181)	1:141:A:ILE:HD12	1:140:A:ASP:H	2	0.88
(1,181)	1:141:A:ILE:HD13	1:140:A:ASP:H	2	0.88
(1,181)	1:141:A:ILE:HD11	1:140:A:ASP:H	4	0.88
(1,181)	1:141:A:ILE:HD12	1:140:A:ASP:H	4	0.88
(1,181)	1:141:A:ILE:HD13	1:140:A:ASP:H	4	0.88
(1,181)	1:141:A:ILE:HD11	1:140:A:ASP:H	8	0.88
(1,181)	1:141:A:ILE:HD12	1:140:A:ASP:H	8	0.88
(1,181)	1:141:A:ILE:HD13	1:140:A:ASP:H	8	0.88
(1,542)	1:106:A:LEU:HD21	1:52:A:LEU:H	10	0.86
(1,542)	1:106:A:LEU:HD22	1:52:A:LEU:H	10	0.86
(1,542)	1:106:A:LEU:HD23	1:52:A:LEU:H	10	0.86
(1,181)	1:141:A:ILE:HD11	1:140:A:ASP:H	6	0.86
(1,181)	1:141:A:ILE:HD12	1:140:A:ASP:H	6	0.86
(1,181)	1:141:A:ILE:HD13	1:140:A:ASP:H	6	0.86
(1,525)	1:149:A:LEU:HD11	1:143:A:GLY:H	4	0.85
(1,525)	1:149:A:LEU:HD12	1:143:A:GLY:H	4	0.85
(1,525)	1:149:A:LEU:HD13	1:143:A:GLY:H	4	0.85
(1,181)	1:141:A:ILE:HD11	1:140:A:ASP:H	9	0.85
(1,181)	1:141:A:ILE:HD12	1:140:A:ASP:H	9	0.85
(1,181)	1:141:A:ILE:HD13	1:140:A:ASP:H	9	0.85
(1,189)	1:124:A:TYR:H	1:125:A:VAL:HG11	3	0.83
(1,189)	1:124:A:TYR:H	1:125:A:VAL:HG12	3	0.83
(1,189)	1:124:A:TYR:H	1:125:A:VAL:HG13	3	0.83
(1,370)	1:148:A:ARG:H	1:149:A:LEU:HD11	4	0.82
(1,370)	1:148:A:ARG:H	1:149:A:LEU:HD12	4	0.82
(1,370)	1:148:A:ARG:H	1:149:A:LEU:HD13	4	0.82
(1,370)	1:148:A:ARG:H	1:149:A:LEU:HD11	10	0.82
(1,370)	1:148:A:ARG:H	1:149:A:LEU:HD12	10	0.82
(1,370)	1:148:A:ARG:H	1:149:A:LEU:HD13	10	0.82
(1,250)	1:64:A:LYS:H	1:105:A:VAL:HG21	4	0.82
(1,250)	1:64:A:LYS:H	1:105:A:VAL:HG22	4	0.82
(1,250)	1:64:A:LYS:H	1:105:A:VAL:HG23	4	0.82
(1,189)	1:124:A:TYR:H	1:125:A:VAL:HG11	1	0.82
(1,189)	1:124:A:TYR:H	1:125:A:VAL:HG12	1	0.82
(1,189)	1:124:A:TYR:H	1:125:A:VAL:HG13	1	0.82

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,189)	1:124:A:TYR:H	1:125:A:VAL:HG11	7	0.82
(1,189)	1:124:A:TYR:H	1:125:A:VAL:HG12	7	0.82
(1,189)	1:124:A:TYR:H	1:125:A:VAL:HG13	7	0.82
(1,189)	1:124:A:TYR:H	1:125:A:VAL:HG11	9	0.82
(1,189)	1:124:A:TYR:H	1:125:A:VAL:HG12	9	0.82
(1,189)	1:124:A:TYR:H	1:125:A:VAL:HG13	9	0.82
(1,15)	1:100:A:LEU:HD11	1:103:A:GLN:HE21	3	0.82
(1,15)	1:100:A:LEU:HD12	1:103:A:GLN:HE21	3	0.82
(1,15)	1:100:A:LEU:HD13	1:103:A:GLN:HE21	3	0.82
(1,370)	1:148:A:ARG:H	1:149:A:LEU:HD11	1	0.81
(1,370)	1:148:A:ARG:H	1:149:A:LEU:HD12	1	0.81
(1,370)	1:148:A:ARG:H	1:149:A:LEU:HD13	1	0.81
(1,370)	1:148:A:ARG:H	1:149:A:LEU:HD11	2	0.81
(1,370)	1:148:A:ARG:H	1:149:A:LEU:HD12	2	0.81
(1,370)	1:148:A:ARG:H	1:149:A:LEU:HD13	2	0.81
(1,370)	1:148:A:ARG:H	1:149:A:LEU:HD11	8	0.81
(1,370)	1:148:A:ARG:H	1:149:A:LEU:HD12	8	0.81
(1,370)	1:148:A:ARG:H	1:149:A:LEU:HD13	8	0.81
(1,189)	1:124:A:TYR:H	1:125:A:VAL:HG11	4	0.81
(1,189)	1:124:A:TYR:H	1:125:A:VAL:HG12	4	0.81
(1,189)	1:124:A:TYR:H	1:125:A:VAL:HG13	4	0.81
(1,189)	1:124:A:TYR:H	1:125:A:VAL:HG11	8	0.81
(1,189)	1:124:A:TYR:H	1:125:A:VAL:HG12	8	0.81
(1,189)	1:124:A:TYR:H	1:125:A:VAL:HG13	8	0.81
(1,250)	1:64:A:LYS:H	1:105:A:VAL:HG21	5	0.8
(1,250)	1:64:A:LYS:H	1:105:A:VAL:HG22	5	0.8
(1,250)	1:64:A:LYS:H	1:105:A:VAL:HG23	5	0.8
(1,189)	1:124:A:TYR:H	1:125:A:VAL:HG11	5	0.8
(1,189)	1:124:A:TYR:H	1:125:A:VAL:HG12	5	0.8
(1,189)	1:124:A:TYR:H	1:125:A:VAL:HG13	5	0.8
(1,542)	1:106:A:LEU:HD21	1:52:A:LEU:H	9	0.79
(1,542)	1:106:A:LEU:HD22	1:52:A:LEU:H	9	0.79
(1,542)	1:106:A:LEU:HD23	1:52:A:LEU:H	9	0.79
(1,370)	1:148:A:ARG:H	1:149:A:LEU:HD11	5	0.79
(1,370)	1:148:A:ARG:H	1:149:A:LEU:HD12	5	0.79
(1,370)	1:148:A:ARG:H	1:149:A:LEU:HD13	5	0.79
(1,298)	1:161:A:LEU:HD21	1:94:A:ASN:H	9	0.79
(1,298)	1:161:A:LEU:HD22	1:94:A:ASN:H	9	0.79
(1,298)	1:161:A:LEU:HD23	1:94:A:ASN:H	9	0.79
(1,189)	1:124:A:TYR:H	1:125:A:VAL:HG11	6	0.79
(1,189)	1:124:A:TYR:H	1:125:A:VAL:HG12	6	0.79
(1,189)	1:124:A:TYR:H	1:125:A:VAL:HG13	6	0.79

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,189)	1:124:A:TYR:H	1:125:A:VAL:HG11	10	0.79
(1,189)	1:124:A:TYR:H	1:125:A:VAL:HG12	10	0.79
(1,189)	1:124:A:TYR:H	1:125:A:VAL:HG13	10	0.79
(1,525)	1:149:A:LEU:HD11	1:143:A:GLY:H	3	0.78
(1,525)	1:149:A:LEU:HD12	1:143:A:GLY:H	3	0.78
(1,525)	1:149:A:LEU:HD13	1:143:A:GLY:H	3	0.78
(1,525)	1:149:A:LEU:HD11	1:143:A:GLY:H	6	0.78
(1,525)	1:149:A:LEU:HD12	1:143:A:GLY:H	6	0.78
(1,525)	1:149:A:LEU:HD13	1:143:A:GLY:H	6	0.78
(1,514)	1:106:A:LEU:HD21	1:103:A:GLN:H	3	0.78
(1,514)	1:106:A:LEU:HD22	1:103:A:GLN:H	3	0.78
(1,514)	1:106:A:LEU:HD23	1:103:A:GLN:H	3	0.78
(1,370)	1:148:A:ARG:H	1:149:A:LEU:HD11	9	0.78
(1,370)	1:148:A:ARG:H	1:149:A:LEU:HD12	9	0.78
(1,370)	1:148:A:ARG:H	1:149:A:LEU:HD13	9	0.78
(1,298)	1:161:A:LEU:HD21	1:94:A:ASN:H	6	0.78
(1,298)	1:161:A:LEU:HD22	1:94:A:ASN:H	6	0.78
(1,298)	1:161:A:LEU:HD23	1:94:A:ASN:H	6	0.78
(1,370)	1:148:A:ARG:H	1:149:A:LEU:HD11	6	0.77
(1,370)	1:148:A:ARG:H	1:149:A:LEU:HD12	6	0.77
(1,370)	1:148:A:ARG:H	1:149:A:LEU:HD13	6	0.77
(1,298)	1:161:A:LEU:HD21	1:94:A:ASN:H	10	0.77
(1,298)	1:161:A:LEU:HD22	1:94:A:ASN:H	10	0.77
(1,298)	1:161:A:LEU:HD23	1:94:A:ASN:H	10	0.77
(1,370)	1:148:A:ARG:H	1:149:A:LEU:HD11	3	0.76
(1,370)	1:148:A:ARG:H	1:149:A:LEU:HD12	3	0.76
(1,370)	1:148:A:ARG:H	1:149:A:LEU:HD13	3	0.76
(1,347)	1:85:A:GLN:H	1:125:A:VAL:HG21	6	0.76
(1,347)	1:85:A:GLN:H	1:125:A:VAL:HG22	6	0.76
(1,347)	1:85:A:GLN:H	1:125:A:VAL:HG23	6	0.76
(1,189)	1:124:A:TYR:H	1:125:A:VAL:HG11	2	0.76
(1,189)	1:124:A:TYR:H	1:125:A:VAL:HG12	2	0.76
(1,189)	1:124:A:TYR:H	1:125:A:VAL:HG13	2	0.76
(1,370)	1:148:A:ARG:H	1:149:A:LEU:HD11	7	0.74
(1,370)	1:148:A:ARG:H	1:149:A:LEU:HD12	7	0.74
(1,370)	1:148:A:ARG:H	1:149:A:LEU:HD13	7	0.74
(1,250)	1:64:A:LYS:H	1:105:A:VAL:HG21	7	0.74
(1,250)	1:64:A:LYS:H	1:105:A:VAL:HG22	7	0.74
(1,250)	1:64:A:LYS:H	1:105:A:VAL:HG23	7	0.74
(1,481)	1:106:A:LEU:HD21	1:53:A:ILE:H	3	0.73
(1,481)	1:106:A:LEU:HD22	1:53:A:ILE:H	3	0.73
(1,481)	1:106:A:LEU:HD23	1:53:A:ILE:H	3	0.73

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,422)	1:161:A:LEU:HD11	1:99:A:LYS:H	6	0.73
(1,422)	1:161:A:LEU:HD12	1:99:A:LYS:H	6	0.73
(1,422)	1:161:A:LEU:HD13	1:99:A:LYS:H	6	0.73
(1,542)	1:106:A:LEU:HD21	1:52:A:LEU:H	2	0.72
(1,542)	1:106:A:LEU:HD22	1:52:A:LEU:H	2	0.72
(1,542)	1:106:A:LEU:HD23	1:52:A:LEU:H	2	0.72
(1,422)	1:161:A:LEU:HD11	1:99:A:LYS:H	9	0.72
(1,422)	1:161:A:LEU:HD12	1:99:A:LYS:H	9	0.72
(1,422)	1:161:A:LEU:HD13	1:99:A:LYS:H	9	0.72
(1,347)	1:85:A:GLN:H	1:125:A:VAL:HG21	4	0.72
(1,347)	1:85:A:GLN:H	1:125:A:VAL:HG22	4	0.72
(1,347)	1:85:A:GLN:H	1:125:A:VAL:HG23	4	0.72
(1,525)	1:149:A:LEU:HD11	1:143:A:GLY:H	5	0.71
(1,525)	1:149:A:LEU:HD12	1:143:A:GLY:H	5	0.71
(1,525)	1:149:A:LEU:HD13	1:143:A:GLY:H	5	0.71
(1,347)	1:85:A:GLN:H	1:125:A:VAL:HG21	5	0.71
(1,347)	1:85:A:GLN:H	1:125:A:VAL:HG22	5	0.71
(1,347)	1:85:A:GLN:H	1:125:A:VAL:HG23	5	0.71
(1,347)	1:85:A:GLN:H	1:125:A:VAL:HG21	7	0.71
(1,347)	1:85:A:GLN:H	1:125:A:VAL:HG22	7	0.71
(1,347)	1:85:A:GLN:H	1:125:A:VAL:HG23	7	0.71
(1,347)	1:85:A:GLN:H	1:125:A:VAL:HG21	10	0.71
(1,347)	1:85:A:GLN:H	1:125:A:VAL:HG22	10	0.71
(1,347)	1:85:A:GLN:H	1:125:A:VAL:HG23	10	0.71
(1,298)	1:161:A:LEU:HD21	1:94:A:ASN:H	3	0.71
(1,298)	1:161:A:LEU:HD22	1:94:A:ASN:H	3	0.71
(1,298)	1:161:A:LEU:HD23	1:94:A:ASN:H	3	0.71
(1,250)	1:64:A:LYS:H	1:105:A:VAL:HG21	9	0.71
(1,250)	1:64:A:LYS:H	1:105:A:VAL:HG22	9	0.71
(1,250)	1:64:A:LYS:H	1:105:A:VAL:HG23	9	0.71
(1,422)	1:161:A:LEU:HD11	1:99:A:LYS:H	10	0.7
(1,422)	1:161:A:LEU:HD12	1:99:A:LYS:H	10	0.7
(1,422)	1:161:A:LEU:HD13	1:99:A:LYS:H	10	0.7
(1,347)	1:85:A:GLN:H	1:125:A:VAL:HG21	2	0.7
(1,347)	1:85:A:GLN:H	1:125:A:VAL:HG22	2	0.7
(1,347)	1:85:A:GLN:H	1:125:A:VAL:HG23	2	0.7
(1,250)	1:64:A:LYS:H	1:105:A:VAL:HG21	6	0.69
(1,250)	1:64:A:LYS:H	1:105:A:VAL:HG22	6	0.69
(1,250)	1:64:A:LYS:H	1:105:A:VAL:HG23	6	0.69
(1,250)	1:64:A:LYS:H	1:105:A:VAL:HG21	10	0.69
(1,250)	1:64:A:LYS:H	1:105:A:VAL:HG22	10	0.69
(1,250)	1:64:A:LYS:H	1:105:A:VAL:HG23	10	0.69

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,542)	1:106:A:LEU:HD21	1:52:A:LEU:H	6	0.68
(1,542)	1:106:A:LEU:HD22	1:52:A:LEU:H	6	0.68
(1,542)	1:106:A:LEU:HD23	1:52:A:LEU:H	6	0.68
(1,347)	1:85:A:GLN:H	1:125:A:VAL:HG21	1	0.68
(1,347)	1:85:A:GLN:H	1:125:A:VAL:HG22	1	0.68
(1,347)	1:85:A:GLN:H	1:125:A:VAL:HG23	1	0.68
(1,298)	1:161:A:LEU:HD21	1:94:A:ASN:H	2	0.68
(1,298)	1:161:A:LEU:HD22	1:94:A:ASN:H	2	0.68
(1,298)	1:161:A:LEU:HD23	1:94:A:ASN:H	2	0.68
(1,298)	1:161:A:LEU:HD21	1:94:A:ASN:H	5	0.68
(1,298)	1:161:A:LEU:HD22	1:94:A:ASN:H	5	0.68
(1,298)	1:161:A:LEU:HD23	1:94:A:ASN:H	5	0.68
(1,250)	1:64:A:LYS:H	1:105:A:VAL:HG21	2	0.68
(1,250)	1:64:A:LYS:H	1:105:A:VAL:HG22	2	0.68
(1,250)	1:64:A:LYS:H	1:105:A:VAL:HG23	2	0.68
(1,422)	1:161:A:LEU:HD11	1:99:A:LYS:H	1	0.67
(1,422)	1:161:A:LEU:HD12	1:99:A:LYS:H	1	0.67
(1,422)	1:161:A:LEU:HD13	1:99:A:LYS:H	1	0.67
(1,422)	1:161:A:LEU:HD11	1:99:A:LYS:H	2	0.67
(1,422)	1:161:A:LEU:HD12	1:99:A:LYS:H	2	0.67
(1,422)	1:161:A:LEU:HD13	1:99:A:LYS:H	2	0.67
(1,422)	1:161:A:LEU:HD11	1:99:A:LYS:H	7	0.67
(1,422)	1:161:A:LEU:HD12	1:99:A:LYS:H	7	0.67
(1,422)	1:161:A:LEU:HD13	1:99:A:LYS:H	7	0.67
(1,404)	1:158:A:ALA:H	1:149:A:LEU:HD11	6	0.67
(1,404)	1:158:A:ALA:H	1:149:A:LEU:HD12	6	0.67
(1,404)	1:158:A:ALA:H	1:149:A:LEU:HD13	6	0.67
(1,404)	1:158:A:ALA:H	1:149:A:LEU:HD11	9	0.67
(1,404)	1:158:A:ALA:H	1:149:A:LEU:HD12	9	0.67
(1,404)	1:158:A:ALA:H	1:149:A:LEU:HD13	9	0.67
(1,298)	1:161:A:LEU:HD21	1:94:A:ASN:H	7	0.67
(1,298)	1:161:A:LEU:HD22	1:94:A:ASN:H	7	0.67
(1,298)	1:161:A:LEU:HD23	1:94:A:ASN:H	7	0.67
(1,250)	1:64:A:LYS:H	1:105:A:VAL:HG21	1	0.67
(1,250)	1:64:A:LYS:H	1:105:A:VAL:HG22	1	0.67
(1,250)	1:64:A:LYS:H	1:105:A:VAL:HG23	1	0.67
(1,422)	1:161:A:LEU:HD11	1:99:A:LYS:H	5	0.66
(1,422)	1:161:A:LEU:HD12	1:99:A:LYS:H	5	0.66
(1,422)	1:161:A:LEU:HD13	1:99:A:LYS:H	5	0.66
(1,298)	1:161:A:LEU:HD21	1:94:A:ASN:H	4	0.66
(1,298)	1:161:A:LEU:HD22	1:94:A:ASN:H	4	0.66
(1,298)	1:161:A:LEU:HD23	1:94:A:ASN:H	4	0.66

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,298)	1:161:A:LEU:HD21	1:94:A:ASN:H	8	0.66
(1,298)	1:161:A:LEU:HD22	1:94:A:ASN:H	8	0.66
(1,298)	1:161:A:LEU:HD23	1:94:A:ASN:H	8	0.66
(1,298)	1:161:A:LEU:HD21	1:94:A:ASN:H	1	0.65
(1,298)	1:161:A:LEU:HD22	1:94:A:ASN:H	1	0.65
(1,298)	1:161:A:LEU:HD23	1:94:A:ASN:H	1	0.65
(1,269)	1:140:A:ASP:H	1:137:A:VAL:HG11	6	0.65
(1,269)	1:140:A:ASP:H	1:137:A:VAL:HG12	6	0.65
(1,269)	1:140:A:ASP:H	1:137:A:VAL:HG13	6	0.65
(1,347)	1:85:A:GLN:H	1:125:A:VAL:HG21	9	0.64
(1,347)	1:85:A:GLN:H	1:125:A:VAL:HG22	9	0.64
(1,347)	1:85:A:GLN:H	1:125:A:VAL:HG23	9	0.64
(1,269)	1:140:A:ASP:H	1:137:A:VAL:HG11	9	0.64
(1,269)	1:140:A:ASP:H	1:137:A:VAL:HG12	9	0.64
(1,269)	1:140:A:ASP:H	1:137:A:VAL:HG13	9	0.64
(1,265)	1:161:A:LEU:HD11	1:101:A:ALA:H	3	0.64
(1,265)	1:161:A:LEU:HD12	1:101:A:ALA:H	3	0.64
(1,265)	1:161:A:LEU:HD13	1:101:A:ALA:H	3	0.64
(1,542)	1:106:A:LEU:HD21	1:52:A:LEU:H	5	0.63
(1,542)	1:106:A:LEU:HD22	1:52:A:LEU:H	5	0.63
(1,542)	1:106:A:LEU:HD23	1:52:A:LEU:H	5	0.63
(1,347)	1:85:A:GLN:H	1:125:A:VAL:HG21	8	0.62
(1,347)	1:85:A:GLN:H	1:125:A:VAL:HG22	8	0.62
(1,347)	1:85:A:GLN:H	1:125:A:VAL:HG23	8	0.62
(1,519)	1:56:A:GLN:H	1:53:A:ILE:HD11	3	0.6
(1,519)	1:56:A:GLN:H	1:53:A:ILE:HD12	3	0.6
(1,519)	1:56:A:GLN:H	1:53:A:ILE:HD13	3	0.6
(1,404)	1:158:A:ALA:H	1:149:A:LEU:HD11	10	0.6
(1,404)	1:158:A:ALA:H	1:149:A:LEU:HD12	10	0.6
(1,404)	1:158:A:ALA:H	1:149:A:LEU:HD13	10	0.6
(1,566)	1:106:A:LEU:HD11	1:75:A:ILE:CD1	5	0.59
(1,566)	1:106:A:LEU:HD12	1:75:A:ILE:CD1	5	0.59
(1,566)	1:106:A:LEU:HD13	1:75:A:ILE:CD1	5	0.59
(1,269)	1:140:A:ASP:H	1:137:A:VAL:HG11	2	0.59
(1,269)	1:140:A:ASP:H	1:137:A:VAL:HG12	2	0.59
(1,269)	1:140:A:ASP:H	1:137:A:VAL:HG13	2	0.59
(1,250)	1:64:A:LYS:H	1:105:A:VAL:HG21	8	0.59
(1,250)	1:64:A:LYS:H	1:105:A:VAL:HG22	8	0.59
(1,250)	1:64:A:LYS:H	1:105:A:VAL:HG23	8	0.59
(1,422)	1:161:A:LEU:HD11	1:99:A:LYS:H	4	0.58
(1,422)	1:161:A:LEU:HD12	1:99:A:LYS:H	4	0.58
(1,422)	1:161:A:LEU:HD13	1:99:A:LYS:H	4	0.58

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,269)	1:140:A:ASP:H	1:137:A:VAL:HG11	4	0.58
(1,269)	1:140:A:ASP:H	1:137:A:VAL:HG12	4	0.58
(1,269)	1:140:A:ASP:H	1:137:A:VAL:HG13	4	0.58
(1,566)	1:106:A:LEU:HD11	1:75:A:ILE:CD1	4	0.57
(1,566)	1:106:A:LEU:HD12	1:75:A:ILE:CD1	4	0.57
(1,566)	1:106:A:LEU:HD13	1:75:A:ILE:CD1	4	0.57
(1,422)	1:161:A:LEU:HD11	1:99:A:LYS:H	8	0.57
(1,422)	1:161:A:LEU:HD12	1:99:A:LYS:H	8	0.57
(1,422)	1:161:A:LEU:HD13	1:99:A:LYS:H	8	0.57
(1,249)	1:102:A:GLU:H	1:52:A:LEU:HD11	9	0.57
(1,249)	1:102:A:GLU:H	1:52:A:LEU:HD12	9	0.57
(1,249)	1:102:A:GLU:H	1:52:A:LEU:HD13	9	0.57
(1,144)	1:51:A:GLN:H	1:52:A:LEU:HD11	9	0.57
(1,144)	1:51:A:GLN:H	1:52:A:LEU:HD12	9	0.57
(1,144)	1:51:A:GLN:H	1:52:A:LEU:HD13	9	0.57
(1,526)	1:162:A:ASP:H	1:149:A:LEU:HD11	9	0.56
(1,526)	1:162:A:ASP:H	1:149:A:LEU:HD12	9	0.56
(1,526)	1:162:A:ASP:H	1:149:A:LEU:HD13	9	0.56
(1,474)	1:141:A:ILE:H	1:139:A:ALA:H	4	0.56
(1,297)	1:139:A:ALA:H	1:137:A:VAL:HG21	6	0.56
(1,297)	1:139:A:ALA:H	1:137:A:VAL:HG22	6	0.56
(1,297)	1:139:A:ALA:H	1:137:A:VAL:HG23	6	0.56
(1,249)	1:102:A:GLU:H	1:52:A:LEU:HD11	10	0.56
(1,249)	1:102:A:GLU:H	1:52:A:LEU:HD12	10	0.56
(1,249)	1:102:A:GLU:H	1:52:A:LEU:HD13	10	0.56
(1,269)	1:140:A:ASP:H	1:137:A:VAL:HG11	8	0.55
(1,269)	1:140:A:ASP:H	1:137:A:VAL:HG12	8	0.55
(1,269)	1:140:A:ASP:H	1:137:A:VAL:HG13	8	0.55
(1,210)	1:77:A:HIS:H	1:110:A:VAL:HG11	3	0.55
(1,210)	1:77:A:HIS:H	1:110:A:VAL:HG12	3	0.55
(1,210)	1:77:A:HIS:H	1:110:A:VAL:HG13	3	0.55
(1,210)	1:77:A:HIS:H	1:110:A:VAL:HG11	6	0.55
(1,210)	1:77:A:HIS:H	1:110:A:VAL:HG12	6	0.55
(1,210)	1:77:A:HIS:H	1:110:A:VAL:HG13	6	0.55
(1,126)	1:105:A:VAL:HG11	1:66:A:LYS:H	3	0.55
(1,126)	1:105:A:VAL:HG12	1:66:A:LYS:H	3	0.55
(1,126)	1:105:A:VAL:HG13	1:66:A:LYS:H	3	0.55
(1,542)	1:106:A:LEU:HD21	1:52:A:LEU:H	1	0.54
(1,542)	1:106:A:LEU:HD22	1:52:A:LEU:H	1	0.54
(1,542)	1:106:A:LEU:HD23	1:52:A:LEU:H	1	0.54
(1,526)	1:162:A:ASP:H	1:149:A:LEU:HD11	3	0.54
(1,526)	1:162:A:ASP:H	1:149:A:LEU:HD12	3	0.54

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,526)	1:162:A:ASP:H	1:149:A:LEU:HD13	3	0.54
(1,526)	1:162:A:ASP:H	1:149:A:LEU:HD11	4	0.54
(1,526)	1:162:A:ASP:H	1:149:A:LEU:HD12	4	0.54
(1,526)	1:162:A:ASP:H	1:149:A:LEU:HD13	4	0.54
(1,526)	1:162:A:ASP:H	1:149:A:LEU:HD11	5	0.54
(1,526)	1:162:A:ASP:H	1:149:A:LEU:HD12	5	0.54
(1,526)	1:162:A:ASP:H	1:149:A:LEU:HD13	5	0.54
(1,526)	1:162:A:ASP:H	1:149:A:LEU:HD11	6	0.54
(1,526)	1:162:A:ASP:H	1:149:A:LEU:HD12	6	0.54
(1,526)	1:162:A:ASP:H	1:149:A:LEU:HD13	6	0.54
(1,269)	1:140:A:ASP:H	1:137:A:VAL:HG11	1	0.54
(1,269)	1:140:A:ASP:H	1:137:A:VAL:HG12	1	0.54
(1,269)	1:140:A:ASP:H	1:137:A:VAL:HG13	1	0.54
(1,226)	1:165:A:LYS:H	1:100:A:LEU:HD11	5	0.54
(1,226)	1:165:A:LYS:H	1:100:A:LEU:HD12	5	0.54
(1,226)	1:165:A:LYS:H	1:100:A:LEU:HD13	5	0.54
(1,210)	1:77:A:HIS:H	1:110:A:VAL:HG11	10	0.54
(1,210)	1:77:A:HIS:H	1:110:A:VAL:HG12	10	0.54
(1,210)	1:77:A:HIS:H	1:110:A:VAL:HG13	10	0.54
(1,206)	1:48:A:TRP:H	1:47:A:GLY:H	6	0.54
(1,206)	1:48:A:TRP:H	1:47:A:GLY:H	10	0.54
(1,22)	1:100:A:LEU:HD11	1:103:A:GLN:HE22	3	0.54
(1,22)	1:100:A:LEU:HD12	1:103:A:GLN:HE22	3	0.54
(1,22)	1:100:A:LEU:HD13	1:103:A:GLN:HE22	3	0.54
(1,526)	1:162:A:ASP:H	1:149:A:LEU:HD11	7	0.53
(1,526)	1:162:A:ASP:H	1:149:A:LEU:HD12	7	0.53
(1,526)	1:162:A:ASP:H	1:149:A:LEU:HD13	7	0.53
(1,526)	1:162:A:ASP:H	1:149:A:LEU:HD11	10	0.53
(1,526)	1:162:A:ASP:H	1:149:A:LEU:HD12	10	0.53
(1,526)	1:162:A:ASP:H	1:149:A:LEU:HD13	10	0.53
(1,226)	1:165:A:LYS:H	1:100:A:LEU:HD11	2	0.53
(1,226)	1:165:A:LYS:H	1:100:A:LEU:HD12	2	0.53
(1,226)	1:165:A:LYS:H	1:100:A:LEU:HD13	2	0.53
(1,226)	1:165:A:LYS:H	1:100:A:LEU:HD11	7	0.53
(1,226)	1:165:A:LYS:H	1:100:A:LEU:HD12	7	0.53
(1,226)	1:165:A:LYS:H	1:100:A:LEU:HD13	7	0.53
(1,226)	1:165:A:LYS:H	1:100:A:LEU:HD11	9	0.53
(1,226)	1:165:A:LYS:H	1:100:A:LEU:HD12	9	0.53
(1,226)	1:165:A:LYS:H	1:100:A:LEU:HD13	9	0.53
(1,144)	1:51:A:GLN:H	1:52:A:LEU:HD11	2	0.53
(1,144)	1:51:A:GLN:H	1:52:A:LEU:HD12	2	0.53
(1,144)	1:51:A:GLN:H	1:52:A:LEU:HD13	2	0.53

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,23)	1:109:A:LEU:H	1:77:A:HIS:O	7	0.52
(1,566)	1:106:A:LEU:HD11	1:75:A:ILE:CD1	1	0.52
(1,566)	1:106:A:LEU:HD12	1:75:A:ILE:CD1	1	0.52
(1,566)	1:106:A:LEU:HD13	1:75:A:ILE:CD1	1	0.52
(1,542)	1:106:A:LEU:HD21	1:52:A:LEU:H	4	0.52
(1,542)	1:106:A:LEU:HD22	1:52:A:LEU:H	4	0.52
(1,542)	1:106:A:LEU:HD23	1:52:A:LEU:H	4	0.52
(1,269)	1:140:A:ASP:H	1:137:A:VAL:HG11	5	0.52
(1,269)	1:140:A:ASP:H	1:137:A:VAL:HG12	5	0.52
(1,269)	1:140:A:ASP:H	1:137:A:VAL:HG13	5	0.52
(1,269)	1:140:A:ASP:H	1:137:A:VAL:HG11	7	0.52
(1,269)	1:140:A:ASP:H	1:137:A:VAL:HG12	7	0.52
(1,269)	1:140:A:ASP:H	1:137:A:VAL:HG13	7	0.52
(1,269)	1:140:A:ASP:H	1:137:A:VAL:HG11	10	0.52
(1,269)	1:140:A:ASP:H	1:137:A:VAL:HG12	10	0.52
(1,269)	1:140:A:ASP:H	1:137:A:VAL:HG13	10	0.52
(1,226)	1:165:A:LYS:H	1:100:A:LEU:HD11	1	0.52
(1,226)	1:165:A:LYS:H	1:100:A:LEU:HD12	1	0.52
(1,226)	1:165:A:LYS:H	1:100:A:LEU:HD13	1	0.52
(1,226)	1:165:A:LYS:H	1:100:A:LEU:HD11	10	0.52
(1,226)	1:165:A:LYS:H	1:100:A:LEU:HD12	10	0.52
(1,226)	1:165:A:LYS:H	1:100:A:LEU:HD13	10	0.52
(1,526)	1:162:A:ASP:H	1:149:A:LEU:HD11	1	0.51
(1,526)	1:162:A:ASP:H	1:149:A:LEU:HD12	1	0.51
(1,526)	1:162:A:ASP:H	1:149:A:LEU:HD13	1	0.51
(1,526)	1:162:A:ASP:H	1:149:A:LEU:HD11	2	0.51
(1,526)	1:162:A:ASP:H	1:149:A:LEU:HD12	2	0.51
(1,526)	1:162:A:ASP:H	1:149:A:LEU:HD13	2	0.51
(1,526)	1:162:A:ASP:H	1:149:A:LEU:HD11	8	0.51
(1,526)	1:162:A:ASP:H	1:149:A:LEU:HD12	8	0.51
(1,526)	1:162:A:ASP:H	1:149:A:LEU:HD13	8	0.51
(1,474)	1:141:A:ILE:H	1:139:A:ALA:H	6	0.51
(1,297)	1:139:A:ALA:H	1:137:A:VAL:HG21	9	0.51
(1,297)	1:139:A:ALA:H	1:137:A:VAL:HG22	9	0.51
(1,297)	1:139:A:ALA:H	1:137:A:VAL:HG23	9	0.51
(1,269)	1:140:A:ASP:H	1:137:A:VAL:HG11	3	0.51
(1,269)	1:140:A:ASP:H	1:137:A:VAL:HG12	3	0.51
(1,269)	1:140:A:ASP:H	1:137:A:VAL:HG13	3	0.51
(1,249)	1:102:A:GLU:H	1:52:A:LEU:HD11	8	0.51
(1,249)	1:102:A:GLU:H	1:52:A:LEU:HD12	8	0.51
(1,249)	1:102:A:GLU:H	1:52:A:LEU:HD13	8	0.51
(1,474)	1:141:A:ILE:H	1:139:A:ALA:H	9	0.5

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,249)	1:102:A:GLU:H	1:52:A:LEU:HD11	5	0.5
(1,249)	1:102:A:GLU:H	1:52:A:LEU:HD12	5	0.5
(1,249)	1:102:A:GLU:H	1:52:A:LEU:HD13	5	0.5
(1,249)	1:102:A:GLU:H	1:52:A:LEU:HD11	7	0.5
(1,249)	1:102:A:GLU:H	1:52:A:LEU:HD12	7	0.5
(1,249)	1:102:A:GLU:H	1:52:A:LEU:HD13	7	0.5
(1,226)	1:165:A:LYS:H	1:100:A:LEU:HD11	3	0.5
(1,226)	1:165:A:LYS:H	1:100:A:LEU:HD12	3	0.5
(1,226)	1:165:A:LYS:H	1:100:A:LEU:HD13	3	0.5
(1,206)	1:48:A:TRP:H	1:47:A:GLY:H	5	0.5
(1,474)	1:141:A:ILE:H	1:139:A:ALA:H	3	0.49
(1,297)	1:139:A:ALA:H	1:137:A:VAL:HG21	8	0.49
(1,297)	1:139:A:ALA:H	1:137:A:VAL:HG22	8	0.49
(1,297)	1:139:A:ALA:H	1:137:A:VAL:HG23	8	0.49
(1,265)	1:161:A:LEU:HD11	1:101:A:ALA:H	6	0.49
(1,265)	1:161:A:LEU:HD12	1:101:A:ALA:H	6	0.49
(1,265)	1:161:A:LEU:HD13	1:101:A:ALA:H	6	0.49
(1,265)	1:161:A:LEU:HD11	1:101:A:ALA:H	9	0.49
(1,265)	1:161:A:LEU:HD12	1:101:A:ALA:H	9	0.49
(1,265)	1:161:A:LEU:HD13	1:101:A:ALA:H	9	0.49
(1,226)	1:165:A:LYS:H	1:100:A:LEU:HD11	4	0.49
(1,226)	1:165:A:LYS:H	1:100:A:LEU:HD12	4	0.49
(1,226)	1:165:A:LYS:H	1:100:A:LEU:HD13	4	0.49
(1,226)	1:165:A:LYS:H	1:100:A:LEU:HD11	6	0.49
(1,226)	1:165:A:LYS:H	1:100:A:LEU:HD12	6	0.49
(1,226)	1:165:A:LYS:H	1:100:A:LEU:HD13	6	0.49
(1,474)	1:141:A:ILE:H	1:139:A:ALA:H	2	0.48
(1,297)	1:139:A:ALA:H	1:137:A:VAL:HG21	2	0.48
(1,297)	1:139:A:ALA:H	1:137:A:VAL:HG22	2	0.48
(1,297)	1:139:A:ALA:H	1:137:A:VAL:HG23	2	0.48
(1,297)	1:139:A:ALA:H	1:137:A:VAL:HG21	4	0.48
(1,297)	1:139:A:ALA:H	1:137:A:VAL:HG22	4	0.48
(1,297)	1:139:A:ALA:H	1:137:A:VAL:HG23	4	0.48
(1,265)	1:161:A:LEU:HD11	1:101:A:ALA:H	4	0.48
(1,265)	1:161:A:LEU:HD12	1:101:A:ALA:H	4	0.48
(1,265)	1:161:A:LEU:HD13	1:101:A:ALA:H	4	0.48
(1,250)	1:64:A:LYS:H	1:105:A:VAL:HG21	3	0.48
(1,250)	1:64:A:LYS:H	1:105:A:VAL:HG22	3	0.48
(1,250)	1:64:A:LYS:H	1:105:A:VAL:HG23	3	0.48
(1,144)	1:51:A:GLN:H	1:52:A:LEU:HD11	3	0.48
(1,144)	1:51:A:GLN:H	1:52:A:LEU:HD12	3	0.48
(1,144)	1:51:A:GLN:H	1:52:A:LEU:HD13	3	0.48

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,57)	1:148:A:ARG:H	1:149:A:LEU:HD11	10	0.48
(1,57)	1:148:A:ARG:H	1:149:A:LEU:HD12	10	0.48
(1,57)	1:148:A:ARG:H	1:149:A:LEU:HD13	10	0.48
(2,23)	1:109:A:LEU:H	1:77:A:HIS:O	1	0.47
(1,474)	1:141:A:ILE:H	1:139:A:ALA:H	1	0.47
(1,474)	1:141:A:ILE:H	1:139:A:ALA:H	5	0.47
(1,297)	1:139:A:ALA:H	1:137:A:VAL:HG21	1	0.47
(1,297)	1:139:A:ALA:H	1:137:A:VAL:HG22	1	0.47
(1,297)	1:139:A:ALA:H	1:137:A:VAL:HG23	1	0.47
(1,265)	1:161:A:LEU:HD11	1:101:A:ALA:H	10	0.47
(1,265)	1:161:A:LEU:HD12	1:101:A:ALA:H	10	0.47
(1,265)	1:161:A:LEU:HD13	1:101:A:ALA:H	10	0.47
(1,226)	1:165:A:LYS:H	1:100:A:LEU:HD11	8	0.47
(1,226)	1:165:A:LYS:H	1:100:A:LEU:HD12	8	0.47
(1,226)	1:165:A:LYS:H	1:100:A:LEU:HD13	8	0.47
(1,210)	1:77:A:HIS:H	1:110:A:VAL:HG11	9	0.47
(1,210)	1:77:A:HIS:H	1:110:A:VAL:HG12	9	0.47
(1,210)	1:77:A:HIS:H	1:110:A:VAL:HG13	9	0.47
(1,206)	1:48:A:TRP:H	1:47:A:GLY:H	4	0.47
(1,126)	1:105:A:VAL:HG11	1:66:A:LYS:H	2	0.47
(1,126)	1:105:A:VAL:HG12	1:66:A:LYS:H	2	0.47
(1,126)	1:105:A:VAL:HG13	1:66:A:LYS:H	2	0.47
(1,57)	1:148:A:ARG:H	1:149:A:LEU:HD11	1	0.47
(1,57)	1:148:A:ARG:H	1:149:A:LEU:HD12	1	0.47
(1,57)	1:148:A:ARG:H	1:149:A:LEU:HD13	1	0.47
(1,57)	1:148:A:ARG:H	1:149:A:LEU:HD11	2	0.47
(1,57)	1:148:A:ARG:H	1:149:A:LEU:HD12	2	0.47
(1,57)	1:148:A:ARG:H	1:149:A:LEU:HD13	2	0.47
(1,57)	1:148:A:ARG:H	1:149:A:LEU:HD11	4	0.47
(1,57)	1:148:A:ARG:H	1:149:A:LEU:HD12	4	0.47
(1,57)	1:148:A:ARG:H	1:149:A:LEU:HD13	4	0.47
(1,57)	1:148:A:ARG:H	1:149:A:LEU:HD11	8	0.47
(1,57)	1:148:A:ARG:H	1:149:A:LEU:HD12	8	0.47
(1,57)	1:148:A:ARG:H	1:149:A:LEU:HD13	8	0.47
(1,474)	1:141:A:ILE:H	1:139:A:ALA:H	7	0.46
(1,474)	1:141:A:ILE:H	1:139:A:ALA:H	8	0.46
(1,265)	1:161:A:LEU:HD11	1:101:A:ALA:H	8	0.46
(1,265)	1:161:A:LEU:HD12	1:101:A:ALA:H	8	0.46
(1,265)	1:161:A:LEU:HD13	1:101:A:ALA:H	8	0.46
(1,506)	1:97:A:ILE:H	1:99:A:LYS:H	7	0.45
(1,210)	1:77:A:HIS:H	1:110:A:VAL:HG11	5	0.45
(1,210)	1:77:A:HIS:H	1:110:A:VAL:HG12	5	0.45

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,210)	1:77:A:HIS:H	1:110:A:VAL:HG13	5	0.45
(1,144)	1:51:A:GLN:H	1:52:A:LEU:HD11	1	0.45
(1,144)	1:51:A:GLN:H	1:52:A:LEU:HD12	1	0.45
(1,144)	1:51:A:GLN:H	1:52:A:LEU:HD13	1	0.45
(1,126)	1:105:A:VAL:HG11	1:66:A:LYS:H	10	0.45
(1,126)	1:105:A:VAL:HG12	1:66:A:LYS:H	10	0.45
(1,126)	1:105:A:VAL:HG13	1:66:A:LYS:H	10	0.45
(1,57)	1:148:A:ARG:H	1:149:A:LEU:HD11	5	0.45
(1,57)	1:148:A:ARG:H	1:149:A:LEU:HD12	5	0.45
(1,57)	1:148:A:ARG:H	1:149:A:LEU:HD13	5	0.45
(2,29)	1:160:A:LEU:H	1:156:A:ASP:O	6	0.44
(2,23)	1:109:A:LEU:H	1:77:A:HIS:O	5	0.44
(1,566)	1:106:A:LEU:HD11	1:75:A:ILE:CD1	7	0.44
(1,566)	1:106:A:LEU:HD12	1:75:A:ILE:CD1	7	0.44
(1,566)	1:106:A:LEU:HD13	1:75:A:ILE:CD1	7	0.44
(1,474)	1:141:A:ILE:H	1:139:A:ALA:H	10	0.44
(1,347)	1:85:A:GLN:H	1:125:A:VAL:HG21	3	0.44
(1,347)	1:85:A:GLN:H	1:125:A:VAL:HG22	3	0.44
(1,347)	1:85:A:GLN:H	1:125:A:VAL:HG23	3	0.44
(1,210)	1:77:A:HIS:H	1:110:A:VAL:HG11	4	0.44
(1,210)	1:77:A:HIS:H	1:110:A:VAL:HG12	4	0.44
(1,210)	1:77:A:HIS:H	1:110:A:VAL:HG13	4	0.44
(1,57)	1:148:A:ARG:H	1:149:A:LEU:HD11	9	0.44
(1,57)	1:148:A:ARG:H	1:149:A:LEU:HD12	9	0.44
(1,57)	1:148:A:ARG:H	1:149:A:LEU:HD13	9	0.44
(2,23)	1:109:A:LEU:H	1:77:A:HIS:O	9	0.43
(1,506)	1:97:A:ILE:H	1:99:A:LYS:H	1	0.43
(1,297)	1:139:A:ALA:H	1:137:A:VAL:HG21	3	0.43
(1,297)	1:139:A:ALA:H	1:137:A:VAL:HG22	3	0.43
(1,297)	1:139:A:ALA:H	1:137:A:VAL:HG23	3	0.43
(1,297)	1:139:A:ALA:H	1:137:A:VAL:HG21	7	0.43
(1,297)	1:139:A:ALA:H	1:137:A:VAL:HG22	7	0.43
(1,297)	1:139:A:ALA:H	1:137:A:VAL:HG23	7	0.43
(1,210)	1:77:A:HIS:H	1:110:A:VAL:HG11	2	0.43
(1,210)	1:77:A:HIS:H	1:110:A:VAL:HG12	2	0.43
(1,210)	1:77:A:HIS:H	1:110:A:VAL:HG13	2	0.43
(1,57)	1:148:A:ARG:H	1:149:A:LEU:HD11	6	0.43
(1,57)	1:148:A:ARG:H	1:149:A:LEU:HD12	6	0.43
(1,57)	1:148:A:ARG:H	1:149:A:LEU:HD13	6	0.43
(1,422)	1:161:A:LEU:HD11	1:99:A:LYS:H	3	0.42
(1,422)	1:161:A:LEU:HD12	1:99:A:LYS:H	3	0.42
(1,422)	1:161:A:LEU:HD13	1:99:A:LYS:H	3	0.42

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,377)	1:112:A:GLU:H	1:113:A:THR:H	7	0.42
(1,297)	1:139:A:ALA:H	1:137:A:VAL:HG21	10	0.42
(1,297)	1:139:A:ALA:H	1:137:A:VAL:HG22	10	0.42
(1,297)	1:139:A:ALA:H	1:137:A:VAL:HG23	10	0.42
(1,265)	1:161:A:LEU:HD11	1:101:A:ALA:H	2	0.42
(1,265)	1:161:A:LEU:HD12	1:101:A:ALA:H	2	0.42
(1,265)	1:161:A:LEU:HD13	1:101:A:ALA:H	2	0.42
(1,57)	1:148:A:ARG:H	1:149:A:LEU:HD11	3	0.42
(1,57)	1:148:A:ARG:H	1:149:A:LEU:HD12	3	0.42
(1,57)	1:148:A:ARG:H	1:149:A:LEU:HD13	3	0.42
(2,29)	1:160:A:LEU:H	1:156:A:ASP:O	9	0.41
(2,23)	1:109:A:LEU:H	1:77:A:HIS:O	8	0.41
(1,377)	1:112:A:GLU:H	1:113:A:THR:H	1	0.41
(1,377)	1:112:A:GLU:H	1:113:A:THR:H	8	0.41
(1,297)	1:139:A:ALA:H	1:137:A:VAL:HG21	5	0.41
(1,297)	1:139:A:ALA:H	1:137:A:VAL:HG22	5	0.41
(1,297)	1:139:A:ALA:H	1:137:A:VAL:HG23	5	0.41
(1,265)	1:161:A:LEU:HD11	1:101:A:ALA:H	1	0.41
(1,265)	1:161:A:LEU:HD12	1:101:A:ALA:H	1	0.41
(1,265)	1:161:A:LEU:HD13	1:101:A:ALA:H	1	0.41
(1,265)	1:161:A:LEU:HD11	1:101:A:ALA:H	5	0.41
(1,265)	1:161:A:LEU:HD12	1:101:A:ALA:H	5	0.41
(1,265)	1:161:A:LEU:HD13	1:101:A:ALA:H	5	0.41
(1,506)	1:97:A:ILE:H	1:99:A:LYS:H	2	0.4
(1,506)	1:97:A:ILE:H	1:99:A:LYS:H	5	0.4
(1,506)	1:97:A:ILE:H	1:99:A:LYS:H	9	0.4
(1,206)	1:48:A:TRP:H	1:47:A:GLY:H	7	0.4
(1,89)	1:106:A:LEU:HD21	1:53:A:ILE:H	3	0.4
(1,89)	1:106:A:LEU:HD22	1:53:A:ILE:H	3	0.4
(1,89)	1:106:A:LEU:HD23	1:53:A:ILE:H	3	0.4
(1,57)	1:148:A:ARG:H	1:149:A:LEU:HD11	7	0.4
(1,57)	1:148:A:ARG:H	1:149:A:LEU:HD12	7	0.4
(1,57)	1:148:A:ARG:H	1:149:A:LEU:HD13	7	0.4
(2,23)	1:109:A:LEU:H	1:77:A:HIS:O	4	0.39
(1,265)	1:161:A:LEU:HD11	1:101:A:ALA:H	7	0.39
(1,265)	1:161:A:LEU:HD12	1:101:A:ALA:H	7	0.39
(1,265)	1:161:A:LEU:HD13	1:101:A:ALA:H	7	0.39
(1,249)	1:102:A:GLU:H	1:52:A:LEU:HD11	1	0.39
(1,249)	1:102:A:GLU:H	1:52:A:LEU:HD12	1	0.39
(1,249)	1:102:A:GLU:H	1:52:A:LEU:HD13	1	0.39
(1,249)	1:102:A:GLU:H	1:52:A:LEU:HD11	6	0.39
(1,249)	1:102:A:GLU:H	1:52:A:LEU:HD12	6	0.39

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,249)	1:102:A:GLU:H	1:52:A:LEU:HD13	6	0.39
(1,210)	1:77:A:HIS:H	1:110:A:VAL:HG11	1	0.39
(1,210)	1:77:A:HIS:H	1:110:A:VAL:HG12	1	0.39
(1,210)	1:77:A:HIS:H	1:110:A:VAL:HG13	1	0.39
(1,210)	1:77:A:HIS:H	1:110:A:VAL:HG11	7	0.39
(1,210)	1:77:A:HIS:H	1:110:A:VAL:HG12	7	0.39
(1,210)	1:77:A:HIS:H	1:110:A:VAL:HG13	7	0.39
(1,169)	1:85:A:GLN:H	1:87:A:LEU:H	3	0.39
(1,136)	1:62:A:LEU:HD21	1:131:A:VAL:H	9	0.39
(1,136)	1:62:A:LEU:HD22	1:131:A:VAL:H	9	0.39
(1,136)	1:62:A:LEU:HD23	1:131:A:VAL:H	9	0.39
(1,126)	1:105:A:VAL:HG11	1:66:A:LYS:H	4	0.39
(1,126)	1:105:A:VAL:HG12	1:66:A:LYS:H	4	0.39
(1,126)	1:105:A:VAL:HG13	1:66:A:LYS:H	4	0.39
(1,126)	1:105:A:VAL:HG11	1:66:A:LYS:H	7	0.39
(1,126)	1:105:A:VAL:HG12	1:66:A:LYS:H	7	0.39
(1,126)	1:105:A:VAL:HG13	1:66:A:LYS:H	7	0.39
(1,566)	1:106:A:LEU:HD11	1:75:A:ILE:CD1	6	0.38
(1,566)	1:106:A:LEU:HD12	1:75:A:ILE:CD1	6	0.38
(1,566)	1:106:A:LEU:HD13	1:75:A:ILE:CD1	6	0.38
(1,506)	1:97:A:ILE:H	1:99:A:LYS:H	6	0.38
(1,432)	1:97:A:ILE:HD11	1:96:A:GLU:H	3	0.38
(1,432)	1:97:A:ILE:HD12	1:96:A:GLU:H	3	0.38
(1,432)	1:97:A:ILE:HD13	1:96:A:GLU:H	3	0.38
(1,203)	1:52:A:LEU:HD11	1:103:A:GLN:H	9	0.38
(1,203)	1:52:A:LEU:HD12	1:103:A:GLN:H	9	0.38
(1,203)	1:52:A:LEU:HD13	1:103:A:GLN:H	9	0.38
(1,203)	1:52:A:LEU:HD11	1:103:A:GLN:H	10	0.38
(1,203)	1:52:A:LEU:HD12	1:103:A:GLN:H	10	0.38
(1,203)	1:52:A:LEU:HD13	1:103:A:GLN:H	10	0.38
(1,389)	1:138:A:ARG:H	1:137:A:VAL:HG11	9	0.37
(1,389)	1:138:A:ARG:H	1:137:A:VAL:HG12	9	0.37
(1,389)	1:138:A:ARG:H	1:137:A:VAL:HG13	9	0.37
(1,377)	1:112:A:GLU:H	1:113:A:THR:H	3	0.37
(1,210)	1:77:A:HIS:H	1:110:A:VAL:HG11	8	0.37
(1,210)	1:77:A:HIS:H	1:110:A:VAL:HG12	8	0.37
(1,210)	1:77:A:HIS:H	1:110:A:VAL:HG13	8	0.37
(1,136)	1:62:A:LEU:HD21	1:131:A:VAL:H	2	0.37
(1,136)	1:62:A:LEU:HD22	1:131:A:VAL:H	2	0.37
(1,136)	1:62:A:LEU:HD23	1:131:A:VAL:H	2	0.37
(1,126)	1:105:A:VAL:HG11	1:66:A:LYS:H	1	0.37
(1,126)	1:105:A:VAL:HG12	1:66:A:LYS:H	1	0.37

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,126)	1:105:A:VAL:HG13	1:66:A:LYS:H	1	0.37
(2,23)	1:109:A:LEU:H	1:77:A:HIS:O	2	0.36
(1,514)	1:106:A:LEU:HD21	1:103:A:GLN:H	4	0.36
(1,514)	1:106:A:LEU:HD22	1:103:A:GLN:H	4	0.36
(1,514)	1:106:A:LEU:HD23	1:103:A:GLN:H	4	0.36
(1,506)	1:97:A:ILE:H	1:99:A:LYS:H	10	0.36
(1,389)	1:138:A:ARG:H	1:137:A:VAL:HG11	2	0.36
(1,389)	1:138:A:ARG:H	1:137:A:VAL:HG12	2	0.36
(1,389)	1:138:A:ARG:H	1:137:A:VAL:HG13	2	0.36
(1,377)	1:112:A:GLU:H	1:113:A:THR:H	6	0.36
(1,377)	1:112:A:GLU:H	1:113:A:THR:H	10	0.36
(1,249)	1:102:A:GLU:H	1:52:A:LEU:HD11	2	0.36
(1,249)	1:102:A:GLU:H	1:52:A:LEU:HD12	2	0.36
(1,249)	1:102:A:GLU:H	1:52:A:LEU:HD13	2	0.36
(1,136)	1:62:A:LEU:HD21	1:131:A:VAL:H	3	0.36
(1,136)	1:62:A:LEU:HD22	1:131:A:VAL:H	3	0.36
(1,136)	1:62:A:LEU:HD23	1:131:A:VAL:H	3	0.36
(1,432)	1:97:A:ILE:HD11	1:96:A:GLU:H	7	0.35
(1,432)	1:97:A:ILE:HD12	1:96:A:GLU:H	7	0.35
(1,432)	1:97:A:ILE:HD13	1:96:A:GLU:H	7	0.35
(1,389)	1:138:A:ARG:H	1:137:A:VAL:HG11	4	0.35
(1,389)	1:138:A:ARG:H	1:137:A:VAL:HG12	4	0.35
(1,389)	1:138:A:ARG:H	1:137:A:VAL:HG13	4	0.35
(1,389)	1:138:A:ARG:H	1:137:A:VAL:HG11	6	0.35
(1,389)	1:138:A:ARG:H	1:137:A:VAL:HG12	6	0.35
(1,389)	1:138:A:ARG:H	1:137:A:VAL:HG13	6	0.35
(1,389)	1:138:A:ARG:H	1:137:A:VAL:HG11	7	0.35
(1,389)	1:138:A:ARG:H	1:137:A:VAL:HG12	7	0.35
(1,389)	1:138:A:ARG:H	1:137:A:VAL:HG13	7	0.35
(1,243)	1:56:A:GLN:H	1:57:A:THR:H	3	0.35
(1,243)	1:56:A:GLN:H	1:57:A:THR:H	4	0.35
(1,243)	1:56:A:GLN:H	1:57:A:THR:H	6	0.35
(1,235)	1:81:A:CYS:H	1:78:A:LEU:HD11	3	0.35
(1,235)	1:81:A:CYS:H	1:78:A:LEU:HD12	3	0.35
(1,235)	1:81:A:CYS:H	1:78:A:LEU:HD13	3	0.35
(1,144)	1:51:A:GLN:H	1:52:A:LEU:HD11	7	0.35
(1,144)	1:51:A:GLN:H	1:52:A:LEU:HD12	7	0.35
(1,144)	1:51:A:GLN:H	1:52:A:LEU:HD13	7	0.35
(1,514)	1:106:A:LEU:HD21	1:103:A:GLN:H	8	0.34
(1,514)	1:106:A:LEU:HD22	1:103:A:GLN:H	8	0.34
(1,514)	1:106:A:LEU:HD23	1:103:A:GLN:H	8	0.34
(1,432)	1:97:A:ILE:HD11	1:96:A:GLU:H	8	0.34

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,432)	1:97:A:ILE:HD12	1:96:A:GLU:H	8	0.34
(1,432)	1:97:A:ILE:HD13	1:96:A:GLU:H	8	0.34
(1,404)	1:158:A:ALA:H	1:149:A:LEU:HD11	5	0.34
(1,404)	1:158:A:ALA:H	1:149:A:LEU:HD12	5	0.34
(1,404)	1:158:A:ALA:H	1:149:A:LEU:HD13	5	0.34
(1,389)	1:138:A:ARG:H	1:137:A:VAL:HG11	3	0.34
(1,389)	1:138:A:ARG:H	1:137:A:VAL:HG12	3	0.34
(1,389)	1:138:A:ARG:H	1:137:A:VAL:HG13	3	0.34
(1,243)	1:56:A:GLN:H	1:57:A:THR:H	2	0.34
(1,243)	1:56:A:GLN:H	1:57:A:THR:H	10	0.34
(1,68)	1:44:A:LEU:HD21	1:44:A:LEU:H	3	0.34
(1,68)	1:44:A:LEU:HD22	1:44:A:LEU:H	3	0.34
(1,68)	1:44:A:LEU:HD23	1:44:A:LEU:H	3	0.34
(1,68)	1:44:A:LEU:HD21	1:44:A:LEU:H	5	0.34
(1,68)	1:44:A:LEU:HD22	1:44:A:LEU:H	5	0.34
(1,68)	1:44:A:LEU:HD23	1:44:A:LEU:H	5	0.34
(1,68)	1:44:A:LEU:HD21	1:44:A:LEU:H	8	0.34
(1,68)	1:44:A:LEU:HD22	1:44:A:LEU:H	8	0.34
(1,68)	1:44:A:LEU:HD23	1:44:A:LEU:H	8	0.34
(1,506)	1:97:A:ILE:H	1:99:A:LYS:H	4	0.33
(1,432)	1:97:A:ILE:HD11	1:96:A:GLU:H	1	0.33
(1,432)	1:97:A:ILE:HD12	1:96:A:GLU:H	1	0.33
(1,432)	1:97:A:ILE:HD13	1:96:A:GLU:H	1	0.33
(1,432)	1:97:A:ILE:HD11	1:96:A:GLU:H	2	0.33
(1,432)	1:97:A:ILE:HD12	1:96:A:GLU:H	2	0.33
(1,432)	1:97:A:ILE:HD13	1:96:A:GLU:H	2	0.33
(1,432)	1:97:A:ILE:HD11	1:96:A:GLU:H	4	0.33
(1,432)	1:97:A:ILE:HD12	1:96:A:GLU:H	4	0.33
(1,432)	1:97:A:ILE:HD13	1:96:A:GLU:H	4	0.33
(1,432)	1:97:A:ILE:HD11	1:96:A:GLU:H	5	0.33
(1,432)	1:97:A:ILE:HD12	1:96:A:GLU:H	5	0.33
(1,432)	1:97:A:ILE:HD13	1:96:A:GLU:H	5	0.33
(1,432)	1:97:A:ILE:HD11	1:96:A:GLU:H	9	0.33
(1,432)	1:97:A:ILE:HD12	1:96:A:GLU:H	9	0.33
(1,432)	1:97:A:ILE:HD13	1:96:A:GLU:H	9	0.33
(1,404)	1:158:A:ALA:H	1:149:A:LEU:HD11	2	0.33
(1,404)	1:158:A:ALA:H	1:149:A:LEU:HD12	2	0.33
(1,404)	1:158:A:ALA:H	1:149:A:LEU:HD13	2	0.33
(1,404)	1:158:A:ALA:H	1:149:A:LEU:HD11	3	0.33
(1,404)	1:158:A:ALA:H	1:149:A:LEU:HD12	3	0.33
(1,404)	1:158:A:ALA:H	1:149:A:LEU:HD13	3	0.33
(1,249)	1:102:A:GLU:H	1:52:A:LEU:HD11	4	0.33

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,249)	1:102:A:GLU:H	1:52:A:LEU:HD12	4	0.33
(1,249)	1:102:A:GLU:H	1:52:A:LEU:HD13	4	0.33
(1,243)	1:56:A:GLN:H	1:57:A:THR:H	5	0.33
(1,243)	1:56:A:GLN:H	1:57:A:THR:H	8	0.33
(1,243)	1:56:A:GLN:H	1:57:A:THR:H	9	0.33
(1,126)	1:105:A:VAL:HG11	1:66:A:LYS:H	5	0.33
(1,126)	1:105:A:VAL:HG12	1:66:A:LYS:H	5	0.33
(1,126)	1:105:A:VAL:HG13	1:66:A:LYS:H	5	0.33
(1,68)	1:44:A:LEU:HD21	1:44:A:LEU:H	2	0.33
(1,68)	1:44:A:LEU:HD22	1:44:A:LEU:H	2	0.33
(1,68)	1:44:A:LEU:HD23	1:44:A:LEU:H	2	0.33
(1,68)	1:44:A:LEU:HD21	1:44:A:LEU:H	6	0.33
(1,68)	1:44:A:LEU:HD22	1:44:A:LEU:H	6	0.33
(1,68)	1:44:A:LEU:HD23	1:44:A:LEU:H	6	0.33
(1,68)	1:44:A:LEU:HD21	1:44:A:LEU:H	7	0.33
(1,68)	1:44:A:LEU:HD22	1:44:A:LEU:H	7	0.33
(1,68)	1:44:A:LEU:HD23	1:44:A:LEU:H	7	0.33
(1,542)	1:106:A:LEU:HD21	1:52:A:LEU:H	3	0.32
(1,542)	1:106:A:LEU:HD22	1:52:A:LEU:H	3	0.32
(1,542)	1:106:A:LEU:HD23	1:52:A:LEU:H	3	0.32
(1,479)	1:56:A:GLN:H	1:57:A:THR:H	3	0.32
(1,479)	1:56:A:GLN:H	1:57:A:THR:H	4	0.32
(1,479)	1:56:A:GLN:H	1:57:A:THR:H	6	0.32
(1,432)	1:97:A:ILE:HD11	1:96:A:GLU:H	10	0.32
(1,432)	1:97:A:ILE:HD12	1:96:A:GLU:H	10	0.32
(1,432)	1:97:A:ILE:HD13	1:96:A:GLU:H	10	0.32
(1,404)	1:158:A:ALA:H	1:149:A:LEU:HD11	4	0.32
(1,404)	1:158:A:ALA:H	1:149:A:LEU:HD12	4	0.32
(1,404)	1:158:A:ALA:H	1:149:A:LEU:HD13	4	0.32
(1,404)	1:158:A:ALA:H	1:149:A:LEU:HD11	7	0.32
(1,404)	1:158:A:ALA:H	1:149:A:LEU:HD12	7	0.32
(1,404)	1:158:A:ALA:H	1:149:A:LEU:HD13	7	0.32
(1,350)	1:106:A:LEU:HD11	1:103:A:GLN:H	3	0.32
(1,350)	1:106:A:LEU:HD12	1:103:A:GLN:H	3	0.32
(1,350)	1:106:A:LEU:HD13	1:103:A:GLN:H	3	0.32
(1,350)	1:106:A:LEU:HD11	1:103:A:GLN:H	5	0.32
(1,350)	1:106:A:LEU:HD12	1:103:A:GLN:H	5	0.32
(1,350)	1:106:A:LEU:HD13	1:103:A:GLN:H	5	0.32
(1,256)	1:141:A:ILE:H	1:139:A:ALA:H	4	0.32
(1,243)	1:56:A:GLN:H	1:57:A:THR:H	1	0.32
(1,196)	1:87:A:LEU:HD11	1:92:A:ALA:H	3	0.32
(1,196)	1:87:A:LEU:HD12	1:92:A:ALA:H	3	0.32

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,196)	1:87:A:LEU:HD13	1:92:A:ALA:H	3	0.32
(1,136)	1:62:A:LEU:HD21	1:131:A:VAL:H	1	0.32
(1,136)	1:62:A:LEU:HD22	1:131:A:VAL:H	1	0.32
(1,136)	1:62:A:LEU:HD23	1:131:A:VAL:H	1	0.32
(1,112)	1:64:A:LYS:H	1:135:A:LEU:HD11	5	0.32
(1,112)	1:64:A:LYS:H	1:135:A:LEU:HD12	5	0.32
(1,112)	1:64:A:LYS:H	1:135:A:LEU:HD13	5	0.32
(1,68)	1:44:A:LEU:HD21	1:44:A:LEU:H	9	0.32
(1,68)	1:44:A:LEU:HD22	1:44:A:LEU:H	9	0.32
(1,68)	1:44:A:LEU:HD23	1:44:A:LEU:H	9	0.32
(1,506)	1:97:A:ILE:H	1:99:A:LYS:H	8	0.31
(1,479)	1:56:A:GLN:H	1:57:A:THR:H	2	0.31
(1,479)	1:56:A:GLN:H	1:57:A:THR:H	10	0.31
(1,404)	1:158:A:ALA:H	1:149:A:LEU:HD11	8	0.31
(1,404)	1:158:A:ALA:H	1:149:A:LEU:HD12	8	0.31
(1,404)	1:158:A:ALA:H	1:149:A:LEU:HD13	8	0.31
(1,355)	1:112:A:GLU:H	1:113:A:THR:H	7	0.31
(1,203)	1:52:A:LEU:HD11	1:103:A:GLN:H	5	0.31
(1,203)	1:52:A:LEU:HD12	1:103:A:GLN:H	5	0.31
(1,203)	1:52:A:LEU:HD13	1:103:A:GLN:H	5	0.31
(1,186)	1:44:A:LEU:HD21	1:44:A:LEU:H	3	0.31
(1,186)	1:44:A:LEU:HD22	1:44:A:LEU:H	3	0.31
(1,186)	1:44:A:LEU:HD23	1:44:A:LEU:H	3	0.31
(1,186)	1:44:A:LEU:HD21	1:44:A:LEU:H	5	0.31
(1,186)	1:44:A:LEU:HD22	1:44:A:LEU:H	5	0.31
(1,186)	1:44:A:LEU:HD23	1:44:A:LEU:H	5	0.31
(1,136)	1:62:A:LEU:HD21	1:131:A:VAL:H	7	0.31
(1,136)	1:62:A:LEU:HD22	1:131:A:VAL:H	7	0.31
(1,136)	1:62:A:LEU:HD23	1:131:A:VAL:H	7	0.31
(1,79)	1:135:A:LEU:HD11	1:62:A:LEU:HD11	6	0.31
(1,79)	1:135:A:LEU:HD11	1:62:A:LEU:HD12	6	0.31
(1,79)	1:135:A:LEU:HD11	1:62:A:LEU:HD13	6	0.31
(1,79)	1:135:A:LEU:HD12	1:62:A:LEU:HD11	6	0.31
(1,79)	1:135:A:LEU:HD12	1:62:A:LEU:HD12	6	0.31
(1,79)	1:135:A:LEU:HD12	1:62:A:LEU:HD13	6	0.31
(1,79)	1:135:A:LEU:HD13	1:62:A:LEU:HD11	6	0.31
(1,79)	1:135:A:LEU:HD13	1:62:A:LEU:HD12	6	0.31
(1,79)	1:135:A:LEU:HD13	1:62:A:LEU:HD13	6	0.31
(1,20)	1:102:A:GLU:H	1:52:A:LEU:HD11	9	0.31
(1,20)	1:102:A:GLU:H	1:52:A:LEU:HD12	9	0.31
(1,20)	1:102:A:GLU:H	1:52:A:LEU:HD13	9	0.31
(1,566)	1:106:A:LEU:HD11	1:75:A:ILE:CD1	3	0.3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,566)	1:106:A:LEU:HD12	1:75:A:ILE:CD1	3	0.3
(1,566)	1:106:A:LEU:HD13	1:75:A:ILE:CD1	3	0.3
(1,566)	1:106:A:LEU:HD11	1:75:A:ILE:CD1	9	0.3
(1,566)	1:106:A:LEU:HD12	1:75:A:ILE:CD1	9	0.3
(1,566)	1:106:A:LEU:HD13	1:75:A:ILE:CD1	9	0.3
(1,479)	1:56:A:GLN:H	1:57:A:THR:H	5	0.3
(1,479)	1:56:A:GLN:H	1:57:A:THR:H	8	0.3
(1,432)	1:97:A:ILE:HD11	1:96:A:GLU:H	6	0.3
(1,432)	1:97:A:ILE:HD12	1:96:A:GLU:H	6	0.3
(1,432)	1:97:A:ILE:HD13	1:96:A:GLU:H	6	0.3
(1,389)	1:138:A:ARG:H	1:137:A:VAL:HG11	1	0.3
(1,389)	1:138:A:ARG:H	1:137:A:VAL:HG12	1	0.3
(1,389)	1:138:A:ARG:H	1:137:A:VAL:HG13	1	0.3
(1,355)	1:112:A:GLU:H	1:113:A:THR:H	1	0.3
(1,355)	1:112:A:GLU:H	1:113:A:THR:H	8	0.3
(1,243)	1:56:A:GLN:H	1:57:A:THR:H	7	0.3
(1,186)	1:44:A:LEU:HD21	1:44:A:LEU:H	2	0.3
(1,186)	1:44:A:LEU:HD22	1:44:A:LEU:H	2	0.3
(1,186)	1:44:A:LEU:HD23	1:44:A:LEU:H	2	0.3
(1,186)	1:44:A:LEU:HD21	1:44:A:LEU:H	8	0.3
(1,186)	1:44:A:LEU:HD22	1:44:A:LEU:H	8	0.3
(1,186)	1:44:A:LEU:HD23	1:44:A:LEU:H	8	0.3
(1,144)	1:51:A:GLN:H	1:52:A:LEU:HD11	6	0.3
(1,144)	1:51:A:GLN:H	1:52:A:LEU:HD12	6	0.3
(1,144)	1:51:A:GLN:H	1:52:A:LEU:HD13	6	0.3
(1,120)	1:80:A:GLU:H	1:78:A:LEU:HD11	7	0.3
(1,120)	1:80:A:GLU:H	1:78:A:LEU:HD12	7	0.3
(1,120)	1:80:A:GLU:H	1:78:A:LEU:HD13	7	0.3
(1,20)	1:102:A:GLU:H	1:52:A:LEU:HD11	10	0.3
(1,20)	1:102:A:GLU:H	1:52:A:LEU:HD12	10	0.3
(1,20)	1:102:A:GLU:H	1:52:A:LEU:HD13	10	0.3
(1,479)	1:56:A:GLN:H	1:57:A:THR:H	1	0.29
(1,479)	1:56:A:GLN:H	1:57:A:THR:H	9	0.29
(1,404)	1:158:A:ALA:H	1:149:A:LEU:HD11	1	0.29
(1,404)	1:158:A:ALA:H	1:149:A:LEU:HD12	1	0.29
(1,404)	1:158:A:ALA:H	1:149:A:LEU:HD13	1	0.29
(1,377)	1:112:A:GLU:H	1:113:A:THR:H	9	0.29
(1,235)	1:81:A:CYS:H	1:78:A:LEU:HD11	4	0.29
(1,235)	1:81:A:CYS:H	1:78:A:LEU:HD12	4	0.29
(1,235)	1:81:A:CYS:H	1:78:A:LEU:HD13	4	0.29
(1,196)	1:87:A:LEU:HD11	1:92:A:ALA:H	9	0.29
(1,196)	1:87:A:LEU:HD12	1:92:A:ALA:H	9	0.29

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,196)	1:87:A:LEU:HD13	1:92:A:ALA:H	9	0.29
(1,186)	1:44:A:LEU:HD21	1:44:A:LEU:H	6	0.29
(1,186)	1:44:A:LEU:HD22	1:44:A:LEU:H	6	0.29
(1,186)	1:44:A:LEU:HD23	1:44:A:LEU:H	6	0.29
(1,186)	1:44:A:LEU:HD21	1:44:A:LEU:H	7	0.29
(1,186)	1:44:A:LEU:HD22	1:44:A:LEU:H	7	0.29
(1,186)	1:44:A:LEU:HD23	1:44:A:LEU:H	7	0.29
(2,29)	1:160:A:LEU:H	1:156:A:ASP:O	10	0.28
(2,23)	1:109:A:LEU:H	1:77:A:HIS:O	3	0.28
(1,377)	1:112:A:GLU:H	1:113:A:THR:H	4	0.28
(1,203)	1:52:A:LEU:HD11	1:103:A:GLN:H	7	0.28
(1,203)	1:52:A:LEU:HD12	1:103:A:GLN:H	7	0.28
(1,203)	1:52:A:LEU:HD13	1:103:A:GLN:H	7	0.28
(1,196)	1:87:A:LEU:HD11	1:92:A:ALA:H	1	0.28
(1,196)	1:87:A:LEU:HD12	1:92:A:ALA:H	1	0.28
(1,196)	1:87:A:LEU:HD13	1:92:A:ALA:H	1	0.28
(1,196)	1:87:A:LEU:HD11	1:92:A:ALA:H	2	0.28
(1,196)	1:87:A:LEU:HD12	1:92:A:ALA:H	2	0.28
(1,196)	1:87:A:LEU:HD13	1:92:A:ALA:H	2	0.28
(1,196)	1:87:A:LEU:HD11	1:92:A:ALA:H	4	0.28
(1,196)	1:87:A:LEU:HD12	1:92:A:ALA:H	4	0.28
(1,196)	1:87:A:LEU:HD13	1:92:A:ALA:H	4	0.28
(1,196)	1:87:A:LEU:HD11	1:92:A:ALA:H	5	0.28
(1,196)	1:87:A:LEU:HD12	1:92:A:ALA:H	5	0.28
(1,196)	1:87:A:LEU:HD13	1:92:A:ALA:H	5	0.28
(1,196)	1:87:A:LEU:HD11	1:92:A:ALA:H	7	0.28
(1,196)	1:87:A:LEU:HD12	1:92:A:ALA:H	7	0.28
(1,196)	1:87:A:LEU:HD13	1:92:A:ALA:H	7	0.28
(1,196)	1:87:A:LEU:HD11	1:92:A:ALA:H	10	0.28
(1,196)	1:87:A:LEU:HD12	1:92:A:ALA:H	10	0.28
(1,196)	1:87:A:LEU:HD13	1:92:A:ALA:H	10	0.28
(1,186)	1:44:A:LEU:HD21	1:44:A:LEU:H	9	0.28
(1,186)	1:44:A:LEU:HD22	1:44:A:LEU:H	9	0.28
(1,186)	1:44:A:LEU:HD23	1:44:A:LEU:H	9	0.28
(1,136)	1:62:A:LEU:HD21	1:131:A:VAL:H	8	0.28
(1,136)	1:62:A:LEU:HD22	1:131:A:VAL:H	8	0.28
(1,136)	1:62:A:LEU:HD23	1:131:A:VAL:H	8	0.28
(1,126)	1:105:A:VAL:HG11	1:66:A:LYS:H	9	0.28
(1,126)	1:105:A:VAL:HG12	1:66:A:LYS:H	9	0.28
(1,126)	1:105:A:VAL:HG13	1:66:A:LYS:H	9	0.28
(1,68)	1:44:A:LEU:HD21	1:44:A:LEU:H	1	0.28
(1,68)	1:44:A:LEU:HD22	1:44:A:LEU:H	1	0.28

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,68)	1:44:A:LEU:HD23	1:44:A:LEU:H	1	0.28
(1,68)	1:44:A:LEU:HD21	1:44:A:LEU:H	10	0.28
(1,68)	1:44:A:LEU:HD22	1:44:A:LEU:H	10	0.28
(1,68)	1:44:A:LEU:HD23	1:44:A:LEU:H	10	0.28
(1,24)	1:141:A:ILE:HD11	1:142:A:THR:H	6	0.28
(1,24)	1:141:A:ILE:HD12	1:142:A:THR:H	6	0.28
(1,24)	1:141:A:ILE:HD13	1:142:A:THR:H	6	0.28
(2,23)	1:109:A:LEU:H	1:77:A:HIS:O	10	0.27
(1,256)	1:141:A:ILE:H	1:139:A:ALA:H	6	0.27
(1,196)	1:87:A:LEU:HD11	1:92:A:ALA:H	6	0.27
(1,196)	1:87:A:LEU:HD12	1:92:A:ALA:H	6	0.27
(1,196)	1:87:A:LEU:HD13	1:92:A:ALA:H	6	0.27
(1,196)	1:87:A:LEU:HD11	1:92:A:ALA:H	8	0.27
(1,196)	1:87:A:LEU:HD12	1:92:A:ALA:H	8	0.27
(1,196)	1:87:A:LEU:HD13	1:92:A:ALA:H	8	0.27
(1,185)	1:97:A:ILE:H	1:95:A:LYS:H	5	0.27
(1,185)	1:97:A:ILE:H	1:95:A:LYS:H	7	0.27
(1,169)	1:85:A:GLN:H	1:87:A:LEU:H	6	0.27
(1,144)	1:51:A:GLN:H	1:52:A:LEU:HD11	8	0.27
(1,144)	1:51:A:GLN:H	1:52:A:LEU:HD12	8	0.27
(1,144)	1:51:A:GLN:H	1:52:A:LEU:HD13	8	0.27
(1,136)	1:62:A:LEU:HD21	1:131:A:VAL:H	5	0.27
(1,136)	1:62:A:LEU:HD22	1:131:A:VAL:H	5	0.27
(1,136)	1:62:A:LEU:HD23	1:131:A:VAL:H	5	0.27
(1,126)	1:105:A:VAL:HG11	1:66:A:LYS:H	8	0.27
(1,126)	1:105:A:VAL:HG12	1:66:A:LYS:H	8	0.27
(1,126)	1:105:A:VAL:HG13	1:66:A:LYS:H	8	0.27
(1,62)	1:138:A:ARG:H	1:137:A:VAL:HG11	9	0.27
(1,62)	1:138:A:ARG:H	1:137:A:VAL:HG12	9	0.27
(1,62)	1:138:A:ARG:H	1:137:A:VAL:HG13	9	0.27
(1,479)	1:56:A:GLN:H	1:57:A:THR:H	7	0.26
(1,355)	1:112:A:GLU:H	1:113:A:THR:H	3	0.26
(1,256)	1:141:A:ILE:H	1:139:A:ALA:H	9	0.26
(1,235)	1:81:A:CYS:H	1:78:A:LEU:HD11	1	0.26
(1,235)	1:81:A:CYS:H	1:78:A:LEU:HD12	1	0.26
(1,235)	1:81:A:CYS:H	1:78:A:LEU:HD13	1	0.26
(1,185)	1:97:A:ILE:H	1:95:A:LYS:H	1	0.26
(1,185)	1:97:A:ILE:H	1:95:A:LYS:H	3	0.26
(1,185)	1:97:A:ILE:H	1:95:A:LYS:H	8	0.26
(1,120)	1:80:A:GLU:H	1:78:A:LEU:HD11	10	0.26
(1,120)	1:80:A:GLU:H	1:78:A:LEU:HD12	10	0.26
(1,120)	1:80:A:GLU:H	1:78:A:LEU:HD13	10	0.26

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,62)	1:138:A:ARG:H	1:137:A:VAL:HG11	2	0.26
(1,62)	1:138:A:ARG:H	1:137:A:VAL:HG12	2	0.26
(1,62)	1:138:A:ARG:H	1:137:A:VAL:HG13	2	0.26
(1,24)	1:141:A:ILE:HD11	1:142:A:THR:H	9	0.26
(1,24)	1:141:A:ILE:HD12	1:142:A:THR:H	9	0.26
(1,24)	1:141:A:ILE:HD13	1:142:A:THR:H	9	0.26
(1,514)	1:106:A:LEU:HD21	1:103:A:GLN:H	10	0.25
(1,514)	1:106:A:LEU:HD22	1:103:A:GLN:H	10	0.25
(1,514)	1:106:A:LEU:HD23	1:103:A:GLN:H	10	0.25
(1,506)	1:97:A:ILE:H	1:99:A:LYS:H	3	0.25
(1,488)	1:171:A:LEU:H	1:172:A:LYS:H	3	0.25
(1,488)	1:171:A:LEU:H	1:172:A:LYS:H	5	0.25
(1,436)	1:161:A:LEU:HD11	1:98:A:GLN:H	9	0.25
(1,436)	1:161:A:LEU:HD12	1:98:A:GLN:H	9	0.25
(1,436)	1:161:A:LEU:HD13	1:98:A:GLN:H	9	0.25
(1,389)	1:138:A:ARG:H	1:137:A:VAL:HG11	8	0.25
(1,389)	1:138:A:ARG:H	1:137:A:VAL:HG12	8	0.25
(1,389)	1:138:A:ARG:H	1:137:A:VAL:HG13	8	0.25
(1,355)	1:112:A:GLU:H	1:113:A:THR:H	6	0.25
(1,355)	1:112:A:GLU:H	1:113:A:THR:H	10	0.25
(1,256)	1:141:A:ILE:H	1:139:A:ALA:H	3	0.25
(1,203)	1:52:A:LEU:HD11	1:103:A:GLN:H	2	0.25
(1,203)	1:52:A:LEU:HD12	1:103:A:GLN:H	2	0.25
(1,203)	1:52:A:LEU:HD13	1:103:A:GLN:H	2	0.25
(1,186)	1:44:A:LEU:HD21	1:44:A:LEU:H	1	0.25
(1,186)	1:44:A:LEU:HD22	1:44:A:LEU:H	1	0.25
(1,186)	1:44:A:LEU:HD23	1:44:A:LEU:H	1	0.25
(1,186)	1:44:A:LEU:HD21	1:44:A:LEU:H	10	0.25
(1,186)	1:44:A:LEU:HD22	1:44:A:LEU:H	10	0.25
(1,186)	1:44:A:LEU:HD23	1:44:A:LEU:H	10	0.25
(1,185)	1:97:A:ILE:H	1:95:A:LYS:H	2	0.25
(1,185)	1:97:A:ILE:H	1:95:A:LYS:H	4	0.25
(1,136)	1:62:A:LEU:HD21	1:131:A:VAL:H	4	0.25
(1,136)	1:62:A:LEU:HD22	1:131:A:VAL:H	4	0.25
(1,136)	1:62:A:LEU:HD23	1:131:A:VAL:H	4	0.25
(1,120)	1:80:A:GLU:H	1:78:A:LEU:HD11	4	0.25
(1,120)	1:80:A:GLU:H	1:78:A:LEU:HD12	4	0.25
(1,120)	1:80:A:GLU:H	1:78:A:LEU:HD13	4	0.25
(1,86)	1:109:A:LEU:HD21	1:107:A:LEU:HD11	6	0.25
(1,86)	1:109:A:LEU:HD21	1:107:A:LEU:HD12	6	0.25
(1,86)	1:109:A:LEU:HD21	1:107:A:LEU:HD13	6	0.25
(1,86)	1:109:A:LEU:HD22	1:107:A:LEU:HD11	6	0.25

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,86)	1:109:A:LEU:HD22	1:107:A:LEU:HD12	6	0.25
(1,86)	1:109:A:LEU:HD22	1:107:A:LEU:HD13	6	0.25
(1,86)	1:109:A:LEU:HD23	1:107:A:LEU:HD11	6	0.25
(1,86)	1:109:A:LEU:HD23	1:107:A:LEU:HD12	6	0.25
(1,86)	1:109:A:LEU:HD23	1:107:A:LEU:HD13	6	0.25
(1,68)	1:44:A:LEU:HD21	1:44:A:LEU:H	4	0.25
(1,68)	1:44:A:LEU:HD22	1:44:A:LEU:H	4	0.25
(1,68)	1:44:A:LEU:HD23	1:44:A:LEU:H	4	0.25
(1,62)	1:138:A:ARG:H	1:137:A:VAL:HG11	6	0.25
(1,62)	1:138:A:ARG:H	1:137:A:VAL:HG12	6	0.25
(1,62)	1:138:A:ARG:H	1:137:A:VAL:HG13	6	0.25
(1,50)	1:105:A:VAL:HG11	1:72:A:LEU:HD11	7	0.25
(1,50)	1:105:A:VAL:HG11	1:72:A:LEU:HD12	7	0.25
(1,50)	1:105:A:VAL:HG11	1:72:A:LEU:HD13	7	0.25
(1,50)	1:105:A:VAL:HG12	1:72:A:LEU:HD11	7	0.25
(1,50)	1:105:A:VAL:HG12	1:72:A:LEU:HD12	7	0.25
(1,50)	1:105:A:VAL:HG12	1:72:A:LEU:HD13	7	0.25
(1,50)	1:105:A:VAL:HG13	1:72:A:LEU:HD11	7	0.25
(1,50)	1:105:A:VAL:HG13	1:72:A:LEU:HD12	7	0.25
(1,50)	1:105:A:VAL:HG13	1:72:A:LEU:HD13	7	0.25
(1,23)	1:131:A:VAL:HG11	1:62:A:LEU:HD11	9	0.25
(1,23)	1:131:A:VAL:HG11	1:62:A:LEU:HD12	9	0.25
(1,23)	1:131:A:VAL:HG11	1:62:A:LEU:HD13	9	0.25
(1,23)	1:131:A:VAL:HG12	1:62:A:LEU:HD11	9	0.25
(1,23)	1:131:A:VAL:HG12	1:62:A:LEU:HD12	9	0.25
(1,23)	1:131:A:VAL:HG12	1:62:A:LEU:HD13	9	0.25
(1,23)	1:131:A:VAL:HG13	1:62:A:LEU:HD11	9	0.25
(1,23)	1:131:A:VAL:HG13	1:62:A:LEU:HD12	9	0.25
(1,23)	1:131:A:VAL:HG13	1:62:A:LEU:HD13	9	0.25
(1,20)	1:102:A:GLU:H	1:52:A:LEU:HD11	8	0.25
(1,20)	1:102:A:GLU:H	1:52:A:LEU:HD12	8	0.25
(1,20)	1:102:A:GLU:H	1:52:A:LEU:HD13	8	0.25
(1,488)	1:171:A:LEU:H	1:172:A:LYS:H	2	0.24
(1,488)	1:171:A:LEU:H	1:172:A:LYS:H	6	0.24
(1,477)	1:62:A:LEU:H	1:72:A:LEU:HD21	5	0.24
(1,477)	1:62:A:LEU:H	1:72:A:LEU:HD22	5	0.24
(1,477)	1:62:A:LEU:H	1:72:A:LEU:HD23	5	0.24
(1,436)	1:161:A:LEU:HD11	1:98:A:GLN:H	1	0.24
(1,436)	1:161:A:LEU:HD12	1:98:A:GLN:H	1	0.24
(1,436)	1:161:A:LEU:HD13	1:98:A:GLN:H	1	0.24
(1,436)	1:161:A:LEU:HD11	1:98:A:GLN:H	2	0.24
(1,436)	1:161:A:LEU:HD12	1:98:A:GLN:H	2	0.24

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,436)	1:161:A:LEU:HD13	1:98:A:GLN:H	2	0.24
(1,436)	1:161:A:LEU:HD11	1:98:A:GLN:H	5	0.24
(1,436)	1:161:A:LEU:HD12	1:98:A:GLN:H	5	0.24
(1,436)	1:161:A:LEU:HD13	1:98:A:GLN:H	5	0.24
(1,436)	1:161:A:LEU:HD11	1:98:A:GLN:H	8	0.24
(1,436)	1:161:A:LEU:HD12	1:98:A:GLN:H	8	0.24
(1,436)	1:161:A:LEU:HD13	1:98:A:GLN:H	8	0.24
(1,389)	1:138:A:ARG:H	1:137:A:VAL:HG11	5	0.24
(1,389)	1:138:A:ARG:H	1:137:A:VAL:HG12	5	0.24
(1,389)	1:138:A:ARG:H	1:137:A:VAL:HG13	5	0.24
(1,203)	1:52:A:LEU:HD11	1:103:A:GLN:H	8	0.24
(1,203)	1:52:A:LEU:HD12	1:103:A:GLN:H	8	0.24
(1,203)	1:52:A:LEU:HD13	1:103:A:GLN:H	8	0.24
(1,79)	1:135:A:LEU:HD11	1:62:A:LEU:HD11	8	0.24
(1,79)	1:135:A:LEU:HD11	1:62:A:LEU:HD12	8	0.24
(1,79)	1:135:A:LEU:HD11	1:62:A:LEU:HD13	8	0.24
(1,79)	1:135:A:LEU:HD12	1:62:A:LEU:HD11	8	0.24
(1,79)	1:135:A:LEU:HD12	1:62:A:LEU:HD12	8	0.24
(1,79)	1:135:A:LEU:HD12	1:62:A:LEU:HD13	8	0.24
(1,79)	1:135:A:LEU:HD13	1:62:A:LEU:HD11	8	0.24
(1,79)	1:135:A:LEU:HD13	1:62:A:LEU:HD12	8	0.24
(1,79)	1:135:A:LEU:HD13	1:62:A:LEU:HD13	8	0.24
(1,62)	1:138:A:ARG:H	1:137:A:VAL:HG11	3	0.24
(1,62)	1:138:A:ARG:H	1:137:A:VAL:HG12	3	0.24
(1,62)	1:138:A:ARG:H	1:137:A:VAL:HG13	3	0.24
(1,62)	1:138:A:ARG:H	1:137:A:VAL:HG11	4	0.24
(1,62)	1:138:A:ARG:H	1:137:A:VAL:HG12	4	0.24
(1,62)	1:138:A:ARG:H	1:137:A:VAL:HG13	4	0.24
(1,62)	1:138:A:ARG:H	1:137:A:VAL:HG11	7	0.24
(1,62)	1:138:A:ARG:H	1:137:A:VAL:HG12	7	0.24
(1,62)	1:138:A:ARG:H	1:137:A:VAL:HG13	7	0.24
(1,56)	1:160:A:LEU:HD11	1:87:A:LEU:HD21	9	0.24
(1,56)	1:160:A:LEU:HD11	1:87:A:LEU:HD22	9	0.24
(1,56)	1:160:A:LEU:HD11	1:87:A:LEU:HD23	9	0.24
(1,56)	1:160:A:LEU:HD12	1:87:A:LEU:HD21	9	0.24
(1,56)	1:160:A:LEU:HD12	1:87:A:LEU:HD22	9	0.24
(1,56)	1:160:A:LEU:HD12	1:87:A:LEU:HD23	9	0.24
(1,56)	1:160:A:LEU:HD13	1:87:A:LEU:HD21	9	0.24
(1,56)	1:160:A:LEU:HD13	1:87:A:LEU:HD22	9	0.24
(1,56)	1:160:A:LEU:HD13	1:87:A:LEU:HD23	9	0.24
(1,20)	1:102:A:GLU:H	1:52:A:LEU:HD11	5	0.24
(1,20)	1:102:A:GLU:H	1:52:A:LEU:HD12	5	0.24

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,20)	1:102:A:GLU:H	1:52:A:LEU:HD13	5	0.24
(1,20)	1:102:A:GLU:H	1:52:A:LEU:HD11	7	0.24
(1,20)	1:102:A:GLU:H	1:52:A:LEU:HD12	7	0.24
(1,20)	1:102:A:GLU:H	1:52:A:LEU:HD13	7	0.24
(1,529)	1:171:A:LEU:H	1:170:A:LEU:HD11	9	0.23
(1,529)	1:171:A:LEU:H	1:170:A:LEU:HD12	9	0.23
(1,529)	1:171:A:LEU:H	1:170:A:LEU:HD13	9	0.23
(1,488)	1:171:A:LEU:H	1:172:A:LYS:H	7	0.23
(1,488)	1:171:A:LEU:H	1:172:A:LYS:H	10	0.23
(1,477)	1:62:A:LEU:H	1:72:A:LEU:HD21	6	0.23
(1,477)	1:62:A:LEU:H	1:72:A:LEU:HD22	6	0.23
(1,477)	1:62:A:LEU:H	1:72:A:LEU:HD23	6	0.23
(1,436)	1:161:A:LEU:HD11	1:98:A:GLN:H	4	0.23
(1,436)	1:161:A:LEU:HD12	1:98:A:GLN:H	4	0.23
(1,436)	1:161:A:LEU:HD13	1:98:A:GLN:H	4	0.23
(1,436)	1:161:A:LEU:HD11	1:98:A:GLN:H	6	0.23
(1,436)	1:161:A:LEU:HD12	1:98:A:GLN:H	6	0.23
(1,436)	1:161:A:LEU:HD13	1:98:A:GLN:H	6	0.23
(1,436)	1:161:A:LEU:HD11	1:98:A:GLN:H	10	0.23
(1,436)	1:161:A:LEU:HD12	1:98:A:GLN:H	10	0.23
(1,436)	1:161:A:LEU:HD13	1:98:A:GLN:H	10	0.23
(1,389)	1:138:A:ARG:H	1:137:A:VAL:HG11	10	0.23
(1,389)	1:138:A:ARG:H	1:137:A:VAL:HG12	10	0.23
(1,389)	1:138:A:ARG:H	1:137:A:VAL:HG13	10	0.23
(1,256)	1:141:A:ILE:H	1:139:A:ALA:H	2	0.23
(1,235)	1:81:A:CYS:H	1:78:A:LEU:HD11	2	0.23
(1,235)	1:81:A:CYS:H	1:78:A:LEU:HD12	2	0.23
(1,235)	1:81:A:CYS:H	1:78:A:LEU:HD13	2	0.23
(1,203)	1:52:A:LEU:HD11	1:103:A:GLN:H	1	0.23
(1,203)	1:52:A:LEU:HD12	1:103:A:GLN:H	1	0.23
(1,203)	1:52:A:LEU:HD13	1:103:A:GLN:H	1	0.23
(1,185)	1:97:A:ILE:H	1:95:A:LYS:H	9	0.23
(1,126)	1:105:A:VAL:HG11	1:66:A:LYS:H	6	0.23
(1,126)	1:105:A:VAL:HG12	1:66:A:LYS:H	6	0.23
(1,126)	1:105:A:VAL:HG13	1:66:A:LYS:H	6	0.23
(1,120)	1:80:A:GLU:H	1:78:A:LEU:HD11	1	0.23
(1,120)	1:80:A:GLU:H	1:78:A:LEU:HD12	1	0.23
(1,120)	1:80:A:GLU:H	1:78:A:LEU:HD13	1	0.23
(1,86)	1:109:A:LEU:HD21	1:107:A:LEU:HD11	4	0.23
(1,86)	1:109:A:LEU:HD21	1:107:A:LEU:HD12	4	0.23
(1,86)	1:109:A:LEU:HD21	1:107:A:LEU:HD13	4	0.23
(1,86)	1:109:A:LEU:HD22	1:107:A:LEU:HD11	4	0.23

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,86)	1:109:A:LEU:HD22	1:107:A:LEU:HD12	4	0.23
(1,86)	1:109:A:LEU:HD22	1:107:A:LEU:HD13	4	0.23
(1,86)	1:109:A:LEU:HD23	1:107:A:LEU:HD11	4	0.23
(1,86)	1:109:A:LEU:HD23	1:107:A:LEU:HD12	4	0.23
(1,86)	1:109:A:LEU:HD23	1:107:A:LEU:HD13	4	0.23
(1,86)	1:109:A:LEU:HD21	1:107:A:LEU:HD11	7	0.23
(1,86)	1:109:A:LEU:HD21	1:107:A:LEU:HD12	7	0.23
(1,86)	1:109:A:LEU:HD21	1:107:A:LEU:HD13	7	0.23
(1,86)	1:109:A:LEU:HD22	1:107:A:LEU:HD11	7	0.23
(1,86)	1:109:A:LEU:HD22	1:107:A:LEU:HD12	7	0.23
(1,86)	1:109:A:LEU:HD22	1:107:A:LEU:HD13	7	0.23
(1,86)	1:109:A:LEU:HD23	1:107:A:LEU:HD11	7	0.23
(1,86)	1:109:A:LEU:HD23	1:107:A:LEU:HD12	7	0.23
(1,86)	1:109:A:LEU:HD23	1:107:A:LEU:HD13	7	0.23
(1,86)	1:109:A:LEU:HD21	1:107:A:LEU:HD11	9	0.23
(1,86)	1:109:A:LEU:HD21	1:107:A:LEU:HD12	9	0.23
(1,86)	1:109:A:LEU:HD21	1:107:A:LEU:HD13	9	0.23
(1,86)	1:109:A:LEU:HD22	1:107:A:LEU:HD11	9	0.23
(1,86)	1:109:A:LEU:HD22	1:107:A:LEU:HD12	9	0.23
(1,86)	1:109:A:LEU:HD22	1:107:A:LEU:HD13	9	0.23
(1,86)	1:109:A:LEU:HD23	1:107:A:LEU:HD11	9	0.23
(1,86)	1:109:A:LEU:HD23	1:107:A:LEU:HD12	9	0.23
(1,86)	1:109:A:LEU:HD23	1:107:A:LEU:HD13	9	0.23
(1,24)	1:141:A:ILE:HD11	1:142:A:THR:H	1	0.23
(1,24)	1:141:A:ILE:HD12	1:142:A:THR:H	1	0.23
(1,24)	1:141:A:ILE:HD13	1:142:A:THR:H	1	0.23
(1,24)	1:141:A:ILE:HD11	1:142:A:THR:H	5	0.23
(1,24)	1:141:A:ILE:HD12	1:142:A:THR:H	5	0.23
(1,24)	1:141:A:ILE:HD13	1:142:A:THR:H	5	0.23
(1,529)	1:171:A:LEU:H	1:170:A:LEU:HD11	1	0.22
(1,529)	1:171:A:LEU:H	1:170:A:LEU:HD12	1	0.22
(1,529)	1:171:A:LEU:H	1:170:A:LEU:HD13	1	0.22
(1,529)	1:171:A:LEU:H	1:170:A:LEU:HD11	4	0.22
(1,529)	1:171:A:LEU:H	1:170:A:LEU:HD12	4	0.22
(1,529)	1:171:A:LEU:H	1:170:A:LEU:HD13	4	0.22
(1,488)	1:171:A:LEU:H	1:172:A:LYS:H	8	0.22
(1,377)	1:112:A:GLU:H	1:113:A:THR:H	2	0.22
(1,350)	1:106:A:LEU:HD11	1:103:A:GLN:H	4	0.22
(1,350)	1:106:A:LEU:HD12	1:103:A:GLN:H	4	0.22
(1,350)	1:106:A:LEU:HD13	1:103:A:GLN:H	4	0.22
(1,256)	1:141:A:ILE:H	1:139:A:ALA:H	1	0.22
(1,256)	1:141:A:ILE:H	1:139:A:ALA:H	5	0.22

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,203)	1:52:A:LEU:HD11	1:103:A:GLN:H	4	0.22
(1,203)	1:52:A:LEU:HD12	1:103:A:GLN:H	4	0.22
(1,203)	1:52:A:LEU:HD13	1:103:A:GLN:H	4	0.22
(1,203)	1:52:A:LEU:HD11	1:103:A:GLN:H	6	0.22
(1,203)	1:52:A:LEU:HD12	1:103:A:GLN:H	6	0.22
(1,203)	1:52:A:LEU:HD13	1:103:A:GLN:H	6	0.22
(1,169)	1:85:A:GLN:H	1:87:A:LEU:H	10	0.22
(1,136)	1:62:A:LEU:HD21	1:131:A:VAL:H	6	0.22
(1,136)	1:62:A:LEU:HD22	1:131:A:VAL:H	6	0.22
(1,136)	1:62:A:LEU:HD23	1:131:A:VAL:H	6	0.22
(1,120)	1:80:A:GLU:H	1:78:A:LEU:HD11	2	0.22
(1,120)	1:80:A:GLU:H	1:78:A:LEU:HD12	2	0.22
(1,120)	1:80:A:GLU:H	1:78:A:LEU:HD13	2	0.22
(1,120)	1:80:A:GLU:H	1:78:A:LEU:HD11	5	0.22
(1,120)	1:80:A:GLU:H	1:78:A:LEU:HD12	5	0.22
(1,120)	1:80:A:GLU:H	1:78:A:LEU:HD13	5	0.22
(1,120)	1:80:A:GLU:H	1:78:A:LEU:HD11	6	0.22
(1,120)	1:80:A:GLU:H	1:78:A:LEU:HD12	6	0.22
(1,120)	1:80:A:GLU:H	1:78:A:LEU:HD13	6	0.22
(1,120)	1:80:A:GLU:H	1:78:A:LEU:HD11	8	0.22
(1,120)	1:80:A:GLU:H	1:78:A:LEU:HD12	8	0.22
(1,120)	1:80:A:GLU:H	1:78:A:LEU:HD13	8	0.22
(1,56)	1:160:A:LEU:HD11	1:87:A:LEU:HD21	5	0.22
(1,56)	1:160:A:LEU:HD11	1:87:A:LEU:HD22	5	0.22
(1,56)	1:160:A:LEU:HD11	1:87:A:LEU:HD23	5	0.22
(1,56)	1:160:A:LEU:HD12	1:87:A:LEU:HD21	5	0.22
(1,56)	1:160:A:LEU:HD12	1:87:A:LEU:HD22	5	0.22
(1,56)	1:160:A:LEU:HD12	1:87:A:LEU:HD23	5	0.22
(1,56)	1:160:A:LEU:HD13	1:87:A:LEU:HD21	5	0.22
(1,56)	1:160:A:LEU:HD13	1:87:A:LEU:HD22	5	0.22
(1,56)	1:160:A:LEU:HD13	1:87:A:LEU:HD23	5	0.22
(1,56)	1:160:A:LEU:HD11	1:87:A:LEU:HD21	6	0.22
(1,56)	1:160:A:LEU:HD11	1:87:A:LEU:HD22	6	0.22
(1,56)	1:160:A:LEU:HD11	1:87:A:LEU:HD23	6	0.22
(1,56)	1:160:A:LEU:HD12	1:87:A:LEU:HD21	6	0.22
(1,56)	1:160:A:LEU:HD12	1:87:A:LEU:HD22	6	0.22
(1,56)	1:160:A:LEU:HD12	1:87:A:LEU:HD23	6	0.22
(1,56)	1:160:A:LEU:HD13	1:87:A:LEU:HD21	6	0.22
(1,56)	1:160:A:LEU:HD13	1:87:A:LEU:HD22	6	0.22
(1,56)	1:160:A:LEU:HD13	1:87:A:LEU:HD23	6	0.22
(1,56)	1:160:A:LEU:HD11	1:87:A:LEU:HD21	8	0.22
(1,56)	1:160:A:LEU:HD11	1:87:A:LEU:HD22	8	0.22

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,56)	1:160:A:LEU:HD11	1:87:A:LEU:HD23	8	0.22
(1,56)	1:160:A:LEU:HD12	1:87:A:LEU:HD21	8	0.22
(1,56)	1:160:A:LEU:HD12	1:87:A:LEU:HD22	8	0.22
(1,56)	1:160:A:LEU:HD12	1:87:A:LEU:HD23	8	0.22
(1,56)	1:160:A:LEU:HD13	1:87:A:LEU:HD21	8	0.22
(1,56)	1:160:A:LEU:HD13	1:87:A:LEU:HD22	8	0.22
(1,56)	1:160:A:LEU:HD13	1:87:A:LEU:HD23	8	0.22
(1,56)	1:160:A:LEU:HD11	1:87:A:LEU:HD21	10	0.22
(1,56)	1:160:A:LEU:HD11	1:87:A:LEU:HD22	10	0.22
(1,56)	1:160:A:LEU:HD11	1:87:A:LEU:HD23	10	0.22
(1,56)	1:160:A:LEU:HD12	1:87:A:LEU:HD21	10	0.22
(1,56)	1:160:A:LEU:HD12	1:87:A:LEU:HD22	10	0.22
(1,56)	1:160:A:LEU:HD12	1:87:A:LEU:HD23	10	0.22
(1,56)	1:160:A:LEU:HD13	1:87:A:LEU:HD21	10	0.22
(1,56)	1:160:A:LEU:HD13	1:87:A:LEU:HD22	10	0.22
(1,56)	1:160:A:LEU:HD13	1:87:A:LEU:HD23	10	0.22
(1,24)	1:141:A:ILE:HD11	1:142:A:THR:H	8	0.22
(1,24)	1:141:A:ILE:HD12	1:142:A:THR:H	8	0.22
(1,24)	1:141:A:ILE:HD13	1:142:A:THR:H	8	0.22
(1,24)	1:141:A:ILE:HD11	1:142:A:THR:H	10	0.22
(1,24)	1:141:A:ILE:HD12	1:142:A:THR:H	10	0.22
(1,24)	1:141:A:ILE:HD13	1:142:A:THR:H	10	0.22
(2,23)	1:109:A:LEU:H	1:77:A:HIS:O	6	0.21
(1,529)	1:171:A:LEU:H	1:170:A:LEU:HD11	7	0.21
(1,529)	1:171:A:LEU:H	1:170:A:LEU:HD12	7	0.21
(1,529)	1:171:A:LEU:H	1:170:A:LEU:HD13	7	0.21
(1,529)	1:171:A:LEU:H	1:170:A:LEU:HD11	8	0.21
(1,529)	1:171:A:LEU:H	1:170:A:LEU:HD12	8	0.21
(1,529)	1:171:A:LEU:H	1:170:A:LEU:HD13	8	0.21
(1,477)	1:62:A:LEU:H	1:72:A:LEU:HD21	7	0.21
(1,477)	1:62:A:LEU:H	1:72:A:LEU:HD22	7	0.21
(1,477)	1:62:A:LEU:H	1:72:A:LEU:HD23	7	0.21
(1,436)	1:161:A:LEU:HD11	1:98:A:GLN:H	7	0.21
(1,436)	1:161:A:LEU:HD12	1:98:A:GLN:H	7	0.21
(1,436)	1:161:A:LEU:HD13	1:98:A:GLN:H	7	0.21
(1,256)	1:141:A:ILE:H	1:139:A:ALA:H	7	0.21
(1,256)	1:141:A:ILE:H	1:139:A:ALA:H	8	0.21
(1,186)	1:44:A:LEU:HD21	1:44:A:LEU:H	4	0.21
(1,186)	1:44:A:LEU:HD22	1:44:A:LEU:H	4	0.21
(1,186)	1:44:A:LEU:HD23	1:44:A:LEU:H	4	0.21
(1,185)	1:97:A:ILE:H	1:95:A:LYS:H	10	0.21
(1,110)	1:160:A:LEU:HD11	1:159:A:LEU:H	6	0.21

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,110)	1:160:A:LEU:HD12	1:159:A:LEU:H	6	0.21
(1,110)	1:160:A:LEU:HD13	1:159:A:LEU:H	6	0.21
(1,110)	1:160:A:LEU:HD11	1:159:A:LEU:H	9	0.21
(1,110)	1:160:A:LEU:HD12	1:159:A:LEU:H	9	0.21
(1,110)	1:160:A:LEU:HD13	1:159:A:LEU:H	9	0.21
(1,79)	1:135:A:LEU:HD11	1:62:A:LEU:HD11	4	0.21
(1,79)	1:135:A:LEU:HD11	1:62:A:LEU:HD12	4	0.21
(1,79)	1:135:A:LEU:HD11	1:62:A:LEU:HD13	4	0.21
(1,79)	1:135:A:LEU:HD12	1:62:A:LEU:HD11	4	0.21
(1,79)	1:135:A:LEU:HD12	1:62:A:LEU:HD12	4	0.21
(1,79)	1:135:A:LEU:HD12	1:62:A:LEU:HD13	4	0.21
(1,79)	1:135:A:LEU:HD13	1:62:A:LEU:HD11	4	0.21
(1,79)	1:135:A:LEU:HD13	1:62:A:LEU:HD12	4	0.21
(1,79)	1:135:A:LEU:HD13	1:62:A:LEU:HD13	4	0.21
(1,79)	1:135:A:LEU:HD11	1:62:A:LEU:HD11	9	0.21
(1,79)	1:135:A:LEU:HD11	1:62:A:LEU:HD12	9	0.21
(1,79)	1:135:A:LEU:HD11	1:62:A:LEU:HD13	9	0.21
(1,79)	1:135:A:LEU:HD12	1:62:A:LEU:HD11	9	0.21
(1,79)	1:135:A:LEU:HD12	1:62:A:LEU:HD12	9	0.21
(1,79)	1:135:A:LEU:HD12	1:62:A:LEU:HD13	9	0.21
(1,79)	1:135:A:LEU:HD13	1:62:A:LEU:HD11	9	0.21
(1,79)	1:135:A:LEU:HD13	1:62:A:LEU:HD12	9	0.21
(1,79)	1:135:A:LEU:HD13	1:62:A:LEU:HD13	9	0.21
(1,56)	1:160:A:LEU:HD11	1:87:A:LEU:HD21	1	0.21
(1,56)	1:160:A:LEU:HD11	1:87:A:LEU:HD22	1	0.21
(1,56)	1:160:A:LEU:HD11	1:87:A:LEU:HD23	1	0.21
(1,56)	1:160:A:LEU:HD12	1:87:A:LEU:HD21	1	0.21
(1,56)	1:160:A:LEU:HD12	1:87:A:LEU:HD22	1	0.21
(1,56)	1:160:A:LEU:HD12	1:87:A:LEU:HD23	1	0.21
(1,56)	1:160:A:LEU:HD13	1:87:A:LEU:HD21	1	0.21
(1,56)	1:160:A:LEU:HD13	1:87:A:LEU:HD22	1	0.21
(1,56)	1:160:A:LEU:HD13	1:87:A:LEU:HD23	1	0.21
(1,56)	1:160:A:LEU:HD11	1:87:A:LEU:HD21	2	0.21
(1,56)	1:160:A:LEU:HD11	1:87:A:LEU:HD22	2	0.21
(1,56)	1:160:A:LEU:HD11	1:87:A:LEU:HD23	2	0.21
(1,56)	1:160:A:LEU:HD12	1:87:A:LEU:HD21	2	0.21
(1,56)	1:160:A:LEU:HD12	1:87:A:LEU:HD22	2	0.21
(1,56)	1:160:A:LEU:HD12	1:87:A:LEU:HD23	2	0.21
(1,56)	1:160:A:LEU:HD13	1:87:A:LEU:HD21	2	0.21
(1,56)	1:160:A:LEU:HD13	1:87:A:LEU:HD22	2	0.21
(1,56)	1:160:A:LEU:HD13	1:87:A:LEU:HD23	2	0.21
(1,56)	1:160:A:LEU:HD11	1:87:A:LEU:HD21	4	0.21

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,56)	1:160:A:LEU:HD11	1:87:A:LEU:HD22	4	0.21
(1,56)	1:160:A:LEU:HD11	1:87:A:LEU:HD23	4	0.21
(1,56)	1:160:A:LEU:HD12	1:87:A:LEU:HD21	4	0.21
(1,56)	1:160:A:LEU:HD12	1:87:A:LEU:HD22	4	0.21
(1,56)	1:160:A:LEU:HD12	1:87:A:LEU:HD23	4	0.21
(1,56)	1:160:A:LEU:HD13	1:87:A:LEU:HD21	4	0.21
(1,56)	1:160:A:LEU:HD13	1:87:A:LEU:HD22	4	0.21
(1,56)	1:160:A:LEU:HD13	1:87:A:LEU:HD23	4	0.21
(1,529)	1:171:A:LEU:H	1:170:A:LEU:HD11	2	0.2
(1,529)	1:171:A:LEU:H	1:170:A:LEU:HD12	2	0.2
(1,529)	1:171:A:LEU:H	1:170:A:LEU:HD13	2	0.2
(1,529)	1:171:A:LEU:H	1:170:A:LEU:HD11	3	0.2
(1,529)	1:171:A:LEU:H	1:170:A:LEU:HD12	3	0.2
(1,529)	1:171:A:LEU:H	1:170:A:LEU:HD13	3	0.2
(1,529)	1:171:A:LEU:H	1:170:A:LEU:HD11	5	0.2
(1,529)	1:171:A:LEU:H	1:170:A:LEU:HD12	5	0.2
(1,529)	1:171:A:LEU:H	1:170:A:LEU:HD13	5	0.2
(1,529)	1:171:A:LEU:H	1:170:A:LEU:HD11	6	0.2
(1,529)	1:171:A:LEU:H	1:170:A:LEU:HD12	6	0.2
(1,529)	1:171:A:LEU:H	1:170:A:LEU:HD13	6	0.2
(1,529)	1:171:A:LEU:H	1:170:A:LEU:HD11	10	0.2
(1,529)	1:171:A:LEU:H	1:170:A:LEU:HD12	10	0.2
(1,529)	1:171:A:LEU:H	1:170:A:LEU:HD13	10	0.2
(1,488)	1:171:A:LEU:H	1:172:A:LYS:H	1	0.2
(1,488)	1:171:A:LEU:H	1:172:A:LYS:H	4	0.2
(1,477)	1:62:A:LEU:H	1:72:A:LEU:HD21	2	0.2
(1,477)	1:62:A:LEU:H	1:72:A:LEU:HD22	2	0.2
(1,477)	1:62:A:LEU:H	1:72:A:LEU:HD23	2	0.2
(1,477)	1:62:A:LEU:H	1:72:A:LEU:HD21	8	0.2
(1,477)	1:62:A:LEU:H	1:72:A:LEU:HD22	8	0.2
(1,477)	1:62:A:LEU:H	1:72:A:LEU:HD23	8	0.2
(1,256)	1:141:A:ILE:H	1:139:A:ALA:H	10	0.2
(1,185)	1:97:A:ILE:H	1:95:A:LYS:H	6	0.2
(1,120)	1:80:A:GLU:H	1:78:A:LEU:HD11	9	0.2
(1,120)	1:80:A:GLU:H	1:78:A:LEU:HD12	9	0.2
(1,120)	1:80:A:GLU:H	1:78:A:LEU:HD13	9	0.2
(1,110)	1:160:A:LEU:HD11	1:159:A:LEU:H	10	0.2
(1,110)	1:160:A:LEU:HD12	1:159:A:LEU:H	10	0.2
(1,110)	1:160:A:LEU:HD13	1:159:A:LEU:H	10	0.2
(1,86)	1:109:A:LEU:HD21	1:107:A:LEU:HD11	2	0.2
(1,86)	1:109:A:LEU:HD21	1:107:A:LEU:HD12	2	0.2
(1,86)	1:109:A:LEU:HD21	1:107:A:LEU:HD13	2	0.2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,86)	1:109:A:LEU:HD22	1:107:A:LEU:HD11	2	0.2
(1,86)	1:109:A:LEU:HD22	1:107:A:LEU:HD12	2	0.2
(1,86)	1:109:A:LEU:HD22	1:107:A:LEU:HD13	2	0.2
(1,86)	1:109:A:LEU:HD23	1:107:A:LEU:HD11	2	0.2
(1,86)	1:109:A:LEU:HD23	1:107:A:LEU:HD12	2	0.2
(1,86)	1:109:A:LEU:HD23	1:107:A:LEU:HD13	2	0.2
(1,86)	1:109:A:LEU:HD21	1:107:A:LEU:HD11	10	0.2
(1,86)	1:109:A:LEU:HD21	1:107:A:LEU:HD12	10	0.2
(1,86)	1:109:A:LEU:HD21	1:107:A:LEU:HD13	10	0.2
(1,86)	1:109:A:LEU:HD22	1:107:A:LEU:HD11	10	0.2
(1,86)	1:109:A:LEU:HD22	1:107:A:LEU:HD12	10	0.2
(1,86)	1:109:A:LEU:HD22	1:107:A:LEU:HD13	10	0.2
(1,86)	1:109:A:LEU:HD23	1:107:A:LEU:HD11	10	0.2
(1,86)	1:109:A:LEU:HD23	1:107:A:LEU:HD12	10	0.2
(1,86)	1:109:A:LEU:HD23	1:107:A:LEU:HD13	10	0.2
(1,56)	1:160:A:LEU:HD11	1:87:A:LEU:HD21	7	0.2
(1,56)	1:160:A:LEU:HD11	1:87:A:LEU:HD22	7	0.2
(1,56)	1:160:A:LEU:HD11	1:87:A:LEU:HD23	7	0.2
(1,56)	1:160:A:LEU:HD12	1:87:A:LEU:HD21	7	0.2
(1,56)	1:160:A:LEU:HD12	1:87:A:LEU:HD22	7	0.2
(1,56)	1:160:A:LEU:HD12	1:87:A:LEU:HD23	7	0.2
(1,56)	1:160:A:LEU:HD13	1:87:A:LEU:HD21	7	0.2
(1,56)	1:160:A:LEU:HD13	1:87:A:LEU:HD22	7	0.2
(1,56)	1:160:A:LEU:HD13	1:87:A:LEU:HD23	7	0.2
(1,24)	1:141:A:ILE:HD11	1:142:A:THR:H	2	0.2
(1,24)	1:141:A:ILE:HD12	1:142:A:THR:H	2	0.2
(1,24)	1:141:A:ILE:HD13	1:142:A:THR:H	2	0.2
(1,17)	1:136:A:THR:H	1:135:A:LEU:HD11	8	0.2
(1,17)	1:136:A:THR:H	1:135:A:LEU:HD12	8	0.2
(1,17)	1:136:A:THR:H	1:135:A:LEU:HD13	8	0.2
(1,514)	1:106:A:LEU:HD21	1:103:A:GLN:H	6	0.19
(1,514)	1:106:A:LEU:HD22	1:103:A:GLN:H	6	0.19
(1,514)	1:106:A:LEU:HD23	1:103:A:GLN:H	6	0.19
(1,488)	1:171:A:LEU:H	1:172:A:LYS:H	9	0.19
(1,481)	1:106:A:LEU:HD21	1:53:A:ILE:H	7	0.19
(1,481)	1:106:A:LEU:HD22	1:53:A:ILE:H	7	0.19
(1,481)	1:106:A:LEU:HD23	1:53:A:ILE:H	7	0.19
(1,169)	1:85:A:GLN:H	1:87:A:LEU:H	4	0.19
(1,86)	1:109:A:LEU:HD21	1:107:A:LEU:HD11	3	0.19
(1,86)	1:109:A:LEU:HD21	1:107:A:LEU:HD12	3	0.19
(1,86)	1:109:A:LEU:HD21	1:107:A:LEU:HD13	3	0.19
(1,86)	1:109:A:LEU:HD22	1:107:A:LEU:HD11	3	0.19

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,86)	1:109:A:LEU:HD22	1:107:A:LEU:HD12	3	0.19
(1,86)	1:109:A:LEU:HD22	1:107:A:LEU:HD13	3	0.19
(1,86)	1:109:A:LEU:HD23	1:107:A:LEU:HD11	3	0.19
(1,86)	1:109:A:LEU:HD23	1:107:A:LEU:HD12	3	0.19
(1,86)	1:109:A:LEU:HD23	1:107:A:LEU:HD13	3	0.19
(1,79)	1:135:A:LEU:HD11	1:62:A:LEU:HD11	10	0.19
(1,79)	1:135:A:LEU:HD11	1:62:A:LEU:HD12	10	0.19
(1,79)	1:135:A:LEU:HD11	1:62:A:LEU:HD13	10	0.19
(1,79)	1:135:A:LEU:HD12	1:62:A:LEU:HD11	10	0.19
(1,79)	1:135:A:LEU:HD12	1:62:A:LEU:HD12	10	0.19
(1,79)	1:135:A:LEU:HD12	1:62:A:LEU:HD13	10	0.19
(1,79)	1:135:A:LEU:HD13	1:62:A:LEU:HD11	10	0.19
(1,79)	1:135:A:LEU:HD13	1:62:A:LEU:HD12	10	0.19
(1,79)	1:135:A:LEU:HD13	1:62:A:LEU:HD13	10	0.19
(1,62)	1:138:A:ARG:H	1:137:A:VAL:HG11	1	0.19
(1,62)	1:138:A:ARG:H	1:137:A:VAL:HG12	1	0.19
(1,62)	1:138:A:ARG:H	1:137:A:VAL:HG13	1	0.19
(1,50)	1:105:A:VAL:HG11	1:72:A:LEU:HD11	1	0.19
(1,50)	1:105:A:VAL:HG11	1:72:A:LEU:HD12	1	0.19
(1,50)	1:105:A:VAL:HG11	1:72:A:LEU:HD13	1	0.19
(1,50)	1:105:A:VAL:HG12	1:72:A:LEU:HD11	1	0.19
(1,50)	1:105:A:VAL:HG12	1:72:A:LEU:HD12	1	0.19
(1,50)	1:105:A:VAL:HG12	1:72:A:LEU:HD13	1	0.19
(1,50)	1:105:A:VAL:HG13	1:72:A:LEU:HD11	1	0.19
(1,50)	1:105:A:VAL:HG13	1:72:A:LEU:HD12	1	0.19
(1,50)	1:105:A:VAL:HG13	1:72:A:LEU:HD13	1	0.19
(1,50)	1:105:A:VAL:HG11	1:72:A:LEU:HD11	4	0.19
(1,50)	1:105:A:VAL:HG11	1:72:A:LEU:HD12	4	0.19
(1,50)	1:105:A:VAL:HG11	1:72:A:LEU:HD13	4	0.19
(1,50)	1:105:A:VAL:HG12	1:72:A:LEU:HD11	4	0.19
(1,50)	1:105:A:VAL:HG12	1:72:A:LEU:HD12	4	0.19
(1,50)	1:105:A:VAL:HG12	1:72:A:LEU:HD13	4	0.19
(1,50)	1:105:A:VAL:HG13	1:72:A:LEU:HD11	4	0.19
(1,50)	1:105:A:VAL:HG13	1:72:A:LEU:HD12	4	0.19
(1,50)	1:105:A:VAL:HG13	1:72:A:LEU:HD13	4	0.19
(1,47)	1:171:A:LEU:HD21	1:171:A:LEU:H	4	0.19
(1,47)	1:171:A:LEU:HD22	1:171:A:LEU:H	4	0.19
(1,47)	1:171:A:LEU:HD23	1:171:A:LEU:H	4	0.19
(1,41)	1:87:A:LEU:HD11	1:160:A:LEU:HD11	6	0.19
(1,41)	1:87:A:LEU:HD11	1:160:A:LEU:HD12	6	0.19
(1,41)	1:87:A:LEU:HD11	1:160:A:LEU:HD13	6	0.19
(1,41)	1:87:A:LEU:HD12	1:160:A:LEU:HD11	6	0.19

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,41)	1:87:A:LEU:HD12	1:160:A:LEU:HD12	6	0.19
(1,41)	1:87:A:LEU:HD12	1:160:A:LEU:HD13	6	0.19
(1,41)	1:87:A:LEU:HD13	1:160:A:LEU:HD11	6	0.19
(1,41)	1:87:A:LEU:HD13	1:160:A:LEU:HD12	6	0.19
(1,41)	1:87:A:LEU:HD13	1:160:A:LEU:HD13	6	0.19
(1,41)	1:87:A:LEU:HD11	1:160:A:LEU:HD11	10	0.19
(1,41)	1:87:A:LEU:HD11	1:160:A:LEU:HD12	10	0.19
(1,41)	1:87:A:LEU:HD11	1:160:A:LEU:HD13	10	0.19
(1,41)	1:87:A:LEU:HD12	1:160:A:LEU:HD11	10	0.19
(1,41)	1:87:A:LEU:HD12	1:160:A:LEU:HD12	10	0.19
(1,41)	1:87:A:LEU:HD12	1:160:A:LEU:HD13	10	0.19
(1,41)	1:87:A:LEU:HD13	1:160:A:LEU:HD11	10	0.19
(1,41)	1:87:A:LEU:HD13	1:160:A:LEU:HD12	10	0.19
(1,41)	1:87:A:LEU:HD13	1:160:A:LEU:HD13	10	0.19
(1,24)	1:141:A:ILE:HD11	1:142:A:THR:H	4	0.19
(1,24)	1:141:A:ILE:HD12	1:142:A:THR:H	4	0.19
(1,24)	1:141:A:ILE:HD13	1:142:A:THR:H	4	0.19
(1,23)	1:131:A:VAL:HG11	1:62:A:LEU:HD11	2	0.19
(1,23)	1:131:A:VAL:HG11	1:62:A:LEU:HD12	2	0.19
(1,23)	1:131:A:VAL:HG11	1:62:A:LEU:HD13	2	0.19
(1,23)	1:131:A:VAL:HG12	1:62:A:LEU:HD11	2	0.19
(1,23)	1:131:A:VAL:HG12	1:62:A:LEU:HD12	2	0.19
(1,23)	1:131:A:VAL:HG12	1:62:A:LEU:HD13	2	0.19
(1,23)	1:131:A:VAL:HG13	1:62:A:LEU:HD11	2	0.19
(1,23)	1:131:A:VAL:HG13	1:62:A:LEU:HD12	2	0.19
(1,23)	1:131:A:VAL:HG13	1:62:A:LEU:HD13	2	0.19
(1,23)	1:131:A:VAL:HG11	1:62:A:LEU:HD11	6	0.19
(1,23)	1:131:A:VAL:HG11	1:62:A:LEU:HD12	6	0.19
(1,23)	1:131:A:VAL:HG11	1:62:A:LEU:HD13	6	0.19
(1,23)	1:131:A:VAL:HG12	1:62:A:LEU:HD11	6	0.19
(1,23)	1:131:A:VAL:HG12	1:62:A:LEU:HD12	6	0.19
(1,23)	1:131:A:VAL:HG12	1:62:A:LEU:HD13	6	0.19
(1,23)	1:131:A:VAL:HG13	1:62:A:LEU:HD11	6	0.19
(1,23)	1:131:A:VAL:HG13	1:62:A:LEU:HD12	6	0.19
(1,23)	1:131:A:VAL:HG13	1:62:A:LEU:HD13	6	0.19
(1,566)	1:106:A:LEU:HD11	1:75:A:ILE:CD1	2	0.18
(1,566)	1:106:A:LEU:HD12	1:75:A:ILE:CD1	2	0.18
(1,566)	1:106:A:LEU:HD13	1:75:A:ILE:CD1	2	0.18
(1,355)	1:112:A:GLU:H	1:113:A:THR:H	9	0.18
(1,238)	1:171:A:LEU:H	1:172:A:LYS:H	3	0.18
(1,238)	1:171:A:LEU:H	1:172:A:LYS:H	5	0.18
(1,238)	1:171:A:LEU:H	1:172:A:LYS:H	6	0.18

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,235)	1:81:A:CYS:H	1:78:A:LEU:HD11	6	0.18
(1,235)	1:81:A:CYS:H	1:78:A:LEU:HD12	6	0.18
(1,235)	1:81:A:CYS:H	1:78:A:LEU:HD13	6	0.18
(1,169)	1:85:A:GLN:H	1:87:A:LEU:H	1	0.18
(1,169)	1:85:A:GLN:H	1:87:A:LEU:H	8	0.18
(1,169)	1:85:A:GLN:H	1:87:A:LEU:H	9	0.18
(1,50)	1:105:A:VAL:HG11	1:72:A:LEU:HD11	3	0.18
(1,50)	1:105:A:VAL:HG11	1:72:A:LEU:HD12	3	0.18
(1,50)	1:105:A:VAL:HG11	1:72:A:LEU:HD13	3	0.18
(1,50)	1:105:A:VAL:HG12	1:72:A:LEU:HD11	3	0.18
(1,50)	1:105:A:VAL:HG12	1:72:A:LEU:HD12	3	0.18
(1,50)	1:105:A:VAL:HG12	1:72:A:LEU:HD13	3	0.18
(1,50)	1:105:A:VAL:HG13	1:72:A:LEU:HD11	3	0.18
(1,50)	1:105:A:VAL:HG13	1:72:A:LEU:HD12	3	0.18
(1,50)	1:105:A:VAL:HG13	1:72:A:LEU:HD13	3	0.18
(1,50)	1:105:A:VAL:HG11	1:72:A:LEU:HD11	10	0.18
(1,50)	1:105:A:VAL:HG11	1:72:A:LEU:HD12	10	0.18
(1,50)	1:105:A:VAL:HG11	1:72:A:LEU:HD13	10	0.18
(1,50)	1:105:A:VAL:HG12	1:72:A:LEU:HD11	10	0.18
(1,50)	1:105:A:VAL:HG12	1:72:A:LEU:HD12	10	0.18
(1,50)	1:105:A:VAL:HG12	1:72:A:LEU:HD13	10	0.18
(1,50)	1:105:A:VAL:HG13	1:72:A:LEU:HD11	10	0.18
(1,50)	1:105:A:VAL:HG13	1:72:A:LEU:HD12	10	0.18
(1,50)	1:105:A:VAL:HG13	1:72:A:LEU:HD13	10	0.18
(1,47)	1:171:A:LEU:HD21	1:171:A:LEU:H	1	0.18
(1,47)	1:171:A:LEU:HD22	1:171:A:LEU:H	1	0.18
(1,47)	1:171:A:LEU:HD23	1:171:A:LEU:H	1	0.18
(1,41)	1:87:A:LEU:HD11	1:160:A:LEU:HD11	8	0.18
(1,41)	1:87:A:LEU:HD11	1:160:A:LEU:HD12	8	0.18
(1,41)	1:87:A:LEU:HD11	1:160:A:LEU:HD13	8	0.18
(1,41)	1:87:A:LEU:HD12	1:160:A:LEU:HD11	8	0.18
(1,41)	1:87:A:LEU:HD12	1:160:A:LEU:HD12	8	0.18
(1,41)	1:87:A:LEU:HD12	1:160:A:LEU:HD13	8	0.18
(1,41)	1:87:A:LEU:HD13	1:160:A:LEU:HD11	8	0.18
(1,41)	1:87:A:LEU:HD13	1:160:A:LEU:HD12	8	0.18
(1,41)	1:87:A:LEU:HD13	1:160:A:LEU:HD13	8	0.18
(1,23)	1:131:A:VAL:HG11	1:62:A:LEU:HD11	1	0.18
(1,23)	1:131:A:VAL:HG11	1:62:A:LEU:HD12	1	0.18
(1,23)	1:131:A:VAL:HG11	1:62:A:LEU:HD13	1	0.18
(1,23)	1:131:A:VAL:HG12	1:62:A:LEU:HD11	1	0.18
(1,23)	1:131:A:VAL:HG12	1:62:A:LEU:HD12	1	0.18
(1,23)	1:131:A:VAL:HG12	1:62:A:LEU:HD13	1	0.18

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,23)	1:131:A:VAL:HG13	1:62:A:LEU:HD11	1	0.18
(1,23)	1:131:A:VAL:HG13	1:62:A:LEU:HD12	1	0.18
(1,23)	1:131:A:VAL:HG13	1:62:A:LEU:HD13	1	0.18
(1,23)	1:131:A:VAL:HG11	1:62:A:LEU:HD11	3	0.18
(1,23)	1:131:A:VAL:HG11	1:62:A:LEU:HD12	3	0.18
(1,23)	1:131:A:VAL:HG11	1:62:A:LEU:HD13	3	0.18
(1,23)	1:131:A:VAL:HG12	1:62:A:LEU:HD11	3	0.18
(1,23)	1:131:A:VAL:HG12	1:62:A:LEU:HD12	3	0.18
(1,23)	1:131:A:VAL:HG12	1:62:A:LEU:HD13	3	0.18
(1,23)	1:131:A:VAL:HG13	1:62:A:LEU:HD11	3	0.18
(1,23)	1:131:A:VAL:HG13	1:62:A:LEU:HD12	3	0.18
(1,23)	1:131:A:VAL:HG13	1:62:A:LEU:HD13	3	0.18
(1,23)	1:131:A:VAL:HG11	1:62:A:LEU:HD11	8	0.18
(1,23)	1:131:A:VAL:HG11	1:62:A:LEU:HD12	8	0.18
(1,23)	1:131:A:VAL:HG11	1:62:A:LEU:HD13	8	0.18
(1,23)	1:131:A:VAL:HG12	1:62:A:LEU:HD11	8	0.18
(1,23)	1:131:A:VAL:HG12	1:62:A:LEU:HD12	8	0.18
(1,23)	1:131:A:VAL:HG12	1:62:A:LEU:HD13	8	0.18
(1,23)	1:131:A:VAL:HG13	1:62:A:LEU:HD11	8	0.18
(1,23)	1:131:A:VAL:HG13	1:62:A:LEU:HD12	8	0.18
(1,23)	1:131:A:VAL:HG13	1:62:A:LEU:HD13	8	0.18
(1,566)	1:106:A:LEU:HD11	1:75:A:ILE:CD1	8	0.17
(1,566)	1:106:A:LEU:HD12	1:75:A:ILE:CD1	8	0.17
(1,566)	1:106:A:LEU:HD13	1:75:A:ILE:CD1	8	0.17
(1,514)	1:106:A:LEU:HD21	1:103:A:GLN:H	1	0.17
(1,514)	1:106:A:LEU:HD22	1:103:A:GLN:H	1	0.17
(1,514)	1:106:A:LEU:HD23	1:103:A:GLN:H	1	0.17
(1,477)	1:62:A:LEU:H	1:72:A:LEU:HD21	1	0.17
(1,477)	1:62:A:LEU:H	1:72:A:LEU:HD22	1	0.17
(1,477)	1:62:A:LEU:H	1:72:A:LEU:HD23	1	0.17
(1,436)	1:161:A:LEU:HD11	1:98:A:GLN:H	3	0.17
(1,436)	1:161:A:LEU:HD12	1:98:A:GLN:H	3	0.17
(1,436)	1:161:A:LEU:HD13	1:98:A:GLN:H	3	0.17
(1,355)	1:112:A:GLU:H	1:113:A:THR:H	4	0.17
(1,238)	1:171:A:LEU:H	1:172:A:LYS:H	2	0.17
(1,235)	1:81:A:CYS:H	1:78:A:LEU:HD11	8	0.17
(1,235)	1:81:A:CYS:H	1:78:A:LEU:HD12	8	0.17
(1,235)	1:81:A:CYS:H	1:78:A:LEU:HD13	8	0.17
(1,169)	1:85:A:GLN:H	1:87:A:LEU:H	5	0.17
(1,136)	1:62:A:LEU:HD21	1:131:A:VAL:H	10	0.17
(1,136)	1:62:A:LEU:HD22	1:131:A:VAL:H	10	0.17
(1,136)	1:62:A:LEU:HD23	1:131:A:VAL:H	10	0.17

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,86)	1:109:A:LEU:HD21	1:107:A:LEU:HD11	1	0.17
(1,86)	1:109:A:LEU:HD21	1:107:A:LEU:HD12	1	0.17
(1,86)	1:109:A:LEU:HD21	1:107:A:LEU:HD13	1	0.17
(1,86)	1:109:A:LEU:HD22	1:107:A:LEU:HD11	1	0.17
(1,86)	1:109:A:LEU:HD22	1:107:A:LEU:HD12	1	0.17
(1,86)	1:109:A:LEU:HD22	1:107:A:LEU:HD13	1	0.17
(1,86)	1:109:A:LEU:HD23	1:107:A:LEU:HD11	1	0.17
(1,86)	1:109:A:LEU:HD23	1:107:A:LEU:HD12	1	0.17
(1,86)	1:109:A:LEU:HD23	1:107:A:LEU:HD13	1	0.17
(1,86)	1:109:A:LEU:HD21	1:107:A:LEU:HD11	8	0.17
(1,86)	1:109:A:LEU:HD21	1:107:A:LEU:HD12	8	0.17
(1,86)	1:109:A:LEU:HD21	1:107:A:LEU:HD13	8	0.17
(1,86)	1:109:A:LEU:HD22	1:107:A:LEU:HD11	8	0.17
(1,86)	1:109:A:LEU:HD22	1:107:A:LEU:HD12	8	0.17
(1,86)	1:109:A:LEU:HD22	1:107:A:LEU:HD13	8	0.17
(1,86)	1:109:A:LEU:HD23	1:107:A:LEU:HD11	8	0.17
(1,86)	1:109:A:LEU:HD23	1:107:A:LEU:HD12	8	0.17
(1,86)	1:109:A:LEU:HD23	1:107:A:LEU:HD13	8	0.17
(1,79)	1:135:A:LEU:HD11	1:62:A:LEU:HD11	1	0.17
(1,79)	1:135:A:LEU:HD11	1:62:A:LEU:HD12	1	0.17
(1,79)	1:135:A:LEU:HD11	1:62:A:LEU:HD13	1	0.17
(1,79)	1:135:A:LEU:HD12	1:62:A:LEU:HD11	1	0.17
(1,79)	1:135:A:LEU:HD12	1:62:A:LEU:HD12	1	0.17
(1,79)	1:135:A:LEU:HD12	1:62:A:LEU:HD13	1	0.17
(1,79)	1:135:A:LEU:HD13	1:62:A:LEU:HD11	1	0.17
(1,79)	1:135:A:LEU:HD13	1:62:A:LEU:HD12	1	0.17
(1,79)	1:135:A:LEU:HD13	1:62:A:LEU:HD13	1	0.17
(1,79)	1:135:A:LEU:HD11	1:62:A:LEU:HD11	3	0.17
(1,79)	1:135:A:LEU:HD11	1:62:A:LEU:HD12	3	0.17
(1,79)	1:135:A:LEU:HD11	1:62:A:LEU:HD13	3	0.17
(1,79)	1:135:A:LEU:HD12	1:62:A:LEU:HD11	3	0.17
(1,79)	1:135:A:LEU:HD12	1:62:A:LEU:HD12	3	0.17
(1,79)	1:135:A:LEU:HD12	1:62:A:LEU:HD13	3	0.17
(1,79)	1:135:A:LEU:HD13	1:62:A:LEU:HD11	3	0.17
(1,79)	1:135:A:LEU:HD13	1:62:A:LEU:HD12	3	0.17
(1,79)	1:135:A:LEU:HD13	1:62:A:LEU:HD13	3	0.17
(1,50)	1:105:A:VAL:HG11	1:72:A:LEU:HD11	2	0.17
(1,50)	1:105:A:VAL:HG11	1:72:A:LEU:HD12	2	0.17
(1,50)	1:105:A:VAL:HG11	1:72:A:LEU:HD13	2	0.17
(1,50)	1:105:A:VAL:HG12	1:72:A:LEU:HD11	2	0.17
(1,50)	1:105:A:VAL:HG12	1:72:A:LEU:HD12	2	0.17
(1,50)	1:105:A:VAL:HG12	1:72:A:LEU:HD13	2	0.17

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,50)	1:105:A:VAL:HG13	1:72:A:LEU:HD11	2	0.17
(1,50)	1:105:A:VAL:HG13	1:72:A:LEU:HD12	2	0.17
(1,50)	1:105:A:VAL:HG13	1:72:A:LEU:HD13	2	0.17
(1,47)	1:171:A:LEU:HD21	1:171:A:LEU:H	7	0.17
(1,47)	1:171:A:LEU:HD22	1:171:A:LEU:H	7	0.17
(1,47)	1:171:A:LEU:HD23	1:171:A:LEU:H	7	0.17
(1,47)	1:171:A:LEU:HD21	1:171:A:LEU:H	9	0.17
(1,47)	1:171:A:LEU:HD22	1:171:A:LEU:H	9	0.17
(1,47)	1:171:A:LEU:HD23	1:171:A:LEU:H	9	0.17
(1,47)	1:171:A:LEU:HD21	1:171:A:LEU:H	10	0.17
(1,47)	1:171:A:LEU:HD22	1:171:A:LEU:H	10	0.17
(1,47)	1:171:A:LEU:HD23	1:171:A:LEU:H	10	0.17
(1,41)	1:87:A:LEU:HD11	1:160:A:LEU:HD11	1	0.17
(1,41)	1:87:A:LEU:HD11	1:160:A:LEU:HD12	1	0.17
(1,41)	1:87:A:LEU:HD11	1:160:A:LEU:HD13	1	0.17
(1,41)	1:87:A:LEU:HD12	1:160:A:LEU:HD11	1	0.17
(1,41)	1:87:A:LEU:HD12	1:160:A:LEU:HD12	1	0.17
(1,41)	1:87:A:LEU:HD12	1:160:A:LEU:HD13	1	0.17
(1,41)	1:87:A:LEU:HD13	1:160:A:LEU:HD11	1	0.17
(1,41)	1:87:A:LEU:HD13	1:160:A:LEU:HD12	1	0.17
(1,41)	1:87:A:LEU:HD13	1:160:A:LEU:HD13	1	0.17
(1,41)	1:87:A:LEU:HD11	1:160:A:LEU:HD11	5	0.17
(1,41)	1:87:A:LEU:HD11	1:160:A:LEU:HD12	5	0.17
(1,41)	1:87:A:LEU:HD11	1:160:A:LEU:HD13	5	0.17
(1,41)	1:87:A:LEU:HD12	1:160:A:LEU:HD11	5	0.17
(1,41)	1:87:A:LEU:HD12	1:160:A:LEU:HD12	5	0.17
(1,41)	1:87:A:LEU:HD12	1:160:A:LEU:HD13	5	0.17
(1,41)	1:87:A:LEU:HD13	1:160:A:LEU:HD11	5	0.17
(1,41)	1:87:A:LEU:HD13	1:160:A:LEU:HD12	5	0.17
(1,41)	1:87:A:LEU:HD13	1:160:A:LEU:HD13	5	0.17
(1,41)	1:87:A:LEU:HD11	1:160:A:LEU:HD11	7	0.17
(1,41)	1:87:A:LEU:HD11	1:160:A:LEU:HD12	7	0.17
(1,41)	1:87:A:LEU:HD11	1:160:A:LEU:HD13	7	0.17
(1,41)	1:87:A:LEU:HD12	1:160:A:LEU:HD11	7	0.17
(1,41)	1:87:A:LEU:HD12	1:160:A:LEU:HD12	7	0.17
(1,41)	1:87:A:LEU:HD12	1:160:A:LEU:HD13	7	0.17
(1,41)	1:87:A:LEU:HD13	1:160:A:LEU:HD11	7	0.17
(1,41)	1:87:A:LEU:HD13	1:160:A:LEU:HD12	7	0.17
(1,41)	1:87:A:LEU:HD13	1:160:A:LEU:HD13	7	0.17
(1,41)	1:87:A:LEU:HD11	1:160:A:LEU:HD11	9	0.17
(1,41)	1:87:A:LEU:HD11	1:160:A:LEU:HD12	9	0.17
(1,41)	1:87:A:LEU:HD11	1:160:A:LEU:HD13	9	0.17

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,41)	1:87:A:LEU:HD12	1:160:A:LEU:HD11	9	0.17
(1,41)	1:87:A:LEU:HD12	1:160:A:LEU:HD12	9	0.17
(1,41)	1:87:A:LEU:HD12	1:160:A:LEU:HD13	9	0.17
(1,41)	1:87:A:LEU:HD13	1:160:A:LEU:HD11	9	0.17
(1,41)	1:87:A:LEU:HD13	1:160:A:LEU:HD12	9	0.17
(1,41)	1:87:A:LEU:HD13	1:160:A:LEU:HD13	9	0.17
(1,514)	1:106:A:LEU:HD21	1:103:A:GLN:H	5	0.16
(1,514)	1:106:A:LEU:HD22	1:103:A:GLN:H	5	0.16
(1,514)	1:106:A:LEU:HD23	1:103:A:GLN:H	5	0.16
(1,477)	1:62:A:LEU:H	1:72:A:LEU:HD21	4	0.16
(1,477)	1:62:A:LEU:H	1:72:A:LEU:HD22	4	0.16
(1,477)	1:62:A:LEU:H	1:72:A:LEU:HD23	4	0.16
(1,477)	1:62:A:LEU:H	1:72:A:LEU:HD21	9	0.16
(1,477)	1:62:A:LEU:H	1:72:A:LEU:HD22	9	0.16
(1,477)	1:62:A:LEU:H	1:72:A:LEU:HD23	9	0.16
(1,477)	1:62:A:LEU:H	1:72:A:LEU:HD21	10	0.16
(1,477)	1:62:A:LEU:H	1:72:A:LEU:HD22	10	0.16
(1,477)	1:62:A:LEU:H	1:72:A:LEU:HD23	10	0.16
(1,350)	1:106:A:LEU:HD11	1:103:A:GLN:H	7	0.16
(1,350)	1:106:A:LEU:HD12	1:103:A:GLN:H	7	0.16
(1,350)	1:106:A:LEU:HD13	1:103:A:GLN:H	7	0.16
(1,238)	1:171:A:LEU:H	1:172:A:LYS:H	7	0.16
(1,238)	1:171:A:LEU:H	1:172:A:LYS:H	10	0.16
(1,177)	1:102:A:GLU:H	1:100:A:LEU:HD21	3	0.16
(1,177)	1:102:A:GLU:H	1:100:A:LEU:HD22	3	0.16
(1,177)	1:102:A:GLU:H	1:100:A:LEU:HD23	3	0.16
(1,177)	1:102:A:GLU:H	1:100:A:LEU:HD21	7	0.16
(1,177)	1:102:A:GLU:H	1:100:A:LEU:HD22	7	0.16
(1,177)	1:102:A:GLU:H	1:100:A:LEU:HD23	7	0.16
(1,177)	1:102:A:GLU:H	1:100:A:LEU:HD21	10	0.16
(1,177)	1:102:A:GLU:H	1:100:A:LEU:HD22	10	0.16
(1,177)	1:102:A:GLU:H	1:100:A:LEU:HD23	10	0.16
(1,112)	1:64:A:LYS:H	1:135:A:LEU:HD11	1	0.16
(1,112)	1:64:A:LYS:H	1:135:A:LEU:HD12	1	0.16
(1,112)	1:64:A:LYS:H	1:135:A:LEU:HD13	1	0.16
(1,112)	1:64:A:LYS:H	1:135:A:LEU:HD11	4	0.16
(1,112)	1:64:A:LYS:H	1:135:A:LEU:HD12	4	0.16
(1,112)	1:64:A:LYS:H	1:135:A:LEU:HD13	4	0.16
(1,86)	1:109:A:LEU:HD21	1:107:A:LEU:HD11	5	0.16
(1,86)	1:109:A:LEU:HD21	1:107:A:LEU:HD12	5	0.16
(1,86)	1:109:A:LEU:HD21	1:107:A:LEU:HD13	5	0.16
(1,86)	1:109:A:LEU:HD22	1:107:A:LEU:HD11	5	0.16

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,86)	1:109:A:LEU:HD22	1:107:A:LEU:HD12	5	0.16
(1,86)	1:109:A:LEU:HD22	1:107:A:LEU:HD13	5	0.16
(1,86)	1:109:A:LEU:HD23	1:107:A:LEU:HD11	5	0.16
(1,86)	1:109:A:LEU:HD23	1:107:A:LEU:HD12	5	0.16
(1,86)	1:109:A:LEU:HD23	1:107:A:LEU:HD13	5	0.16
(1,79)	1:135:A:LEU:HD11	1:62:A:LEU:HD11	5	0.16
(1,79)	1:135:A:LEU:HD11	1:62:A:LEU:HD12	5	0.16
(1,79)	1:135:A:LEU:HD11	1:62:A:LEU:HD13	5	0.16
(1,79)	1:135:A:LEU:HD12	1:62:A:LEU:HD11	5	0.16
(1,79)	1:135:A:LEU:HD12	1:62:A:LEU:HD12	5	0.16
(1,79)	1:135:A:LEU:HD12	1:62:A:LEU:HD13	5	0.16
(1,79)	1:135:A:LEU:HD13	1:62:A:LEU:HD11	5	0.16
(1,79)	1:135:A:LEU:HD13	1:62:A:LEU:HD12	5	0.16
(1,79)	1:135:A:LEU:HD13	1:62:A:LEU:HD13	5	0.16
(1,79)	1:135:A:LEU:HD11	1:62:A:LEU:HD11	7	0.16
(1,79)	1:135:A:LEU:HD11	1:62:A:LEU:HD12	7	0.16
(1,79)	1:135:A:LEU:HD11	1:62:A:LEU:HD13	7	0.16
(1,79)	1:135:A:LEU:HD12	1:62:A:LEU:HD11	7	0.16
(1,79)	1:135:A:LEU:HD12	1:62:A:LEU:HD12	7	0.16
(1,79)	1:135:A:LEU:HD12	1:62:A:LEU:HD13	7	0.16
(1,79)	1:135:A:LEU:HD13	1:62:A:LEU:HD11	7	0.16
(1,79)	1:135:A:LEU:HD13	1:62:A:LEU:HD12	7	0.16
(1,79)	1:135:A:LEU:HD13	1:62:A:LEU:HD13	7	0.16
(1,50)	1:105:A:VAL:HG11	1:72:A:LEU:HD11	8	0.16
(1,50)	1:105:A:VAL:HG11	1:72:A:LEU:HD12	8	0.16
(1,50)	1:105:A:VAL:HG11	1:72:A:LEU:HD13	8	0.16
(1,50)	1:105:A:VAL:HG12	1:72:A:LEU:HD11	8	0.16
(1,50)	1:105:A:VAL:HG12	1:72:A:LEU:HD12	8	0.16
(1,50)	1:105:A:VAL:HG12	1:72:A:LEU:HD13	8	0.16
(1,50)	1:105:A:VAL:HG13	1:72:A:LEU:HD11	8	0.16
(1,50)	1:105:A:VAL:HG13	1:72:A:LEU:HD12	8	0.16
(1,50)	1:105:A:VAL:HG13	1:72:A:LEU:HD13	8	0.16
(1,47)	1:171:A:LEU:HD21	1:171:A:LEU:H	2	0.16
(1,47)	1:171:A:LEU:HD22	1:171:A:LEU:H	2	0.16
(1,47)	1:171:A:LEU:HD23	1:171:A:LEU:H	2	0.16
(1,47)	1:171:A:LEU:HD21	1:171:A:LEU:H	5	0.16
(1,47)	1:171:A:LEU:HD22	1:171:A:LEU:H	5	0.16
(1,47)	1:171:A:LEU:HD23	1:171:A:LEU:H	5	0.16
(1,47)	1:171:A:LEU:HD21	1:171:A:LEU:H	8	0.16
(1,47)	1:171:A:LEU:HD22	1:171:A:LEU:H	8	0.16
(1,47)	1:171:A:LEU:HD23	1:171:A:LEU:H	8	0.16
(1,41)	1:87:A:LEU:HD11	1:160:A:LEU:HD11	2	0.16

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,41)	1:87:A:LEU:HD11	1:160:A:LEU:HD12	2	0.16
(1,41)	1:87:A:LEU:HD11	1:160:A:LEU:HD13	2	0.16
(1,41)	1:87:A:LEU:HD12	1:160:A:LEU:HD11	2	0.16
(1,41)	1:87:A:LEU:HD12	1:160:A:LEU:HD12	2	0.16
(1,41)	1:87:A:LEU:HD12	1:160:A:LEU:HD13	2	0.16
(1,41)	1:87:A:LEU:HD13	1:160:A:LEU:HD11	2	0.16
(1,41)	1:87:A:LEU:HD13	1:160:A:LEU:HD12	2	0.16
(1,41)	1:87:A:LEU:HD13	1:160:A:LEU:HD13	2	0.16
(1,41)	1:87:A:LEU:HD11	1:160:A:LEU:HD11	3	0.16
(1,41)	1:87:A:LEU:HD11	1:160:A:LEU:HD12	3	0.16
(1,41)	1:87:A:LEU:HD11	1:160:A:LEU:HD13	3	0.16
(1,41)	1:87:A:LEU:HD12	1:160:A:LEU:HD11	3	0.16
(1,41)	1:87:A:LEU:HD12	1:160:A:LEU:HD12	3	0.16
(1,41)	1:87:A:LEU:HD12	1:160:A:LEU:HD13	3	0.16
(1,41)	1:87:A:LEU:HD13	1:160:A:LEU:HD11	3	0.16
(1,41)	1:87:A:LEU:HD13	1:160:A:LEU:HD12	3	0.16
(1,41)	1:87:A:LEU:HD13	1:160:A:LEU:HD13	3	0.16
(1,41)	1:87:A:LEU:HD11	1:160:A:LEU:HD11	4	0.16
(1,41)	1:87:A:LEU:HD11	1:160:A:LEU:HD12	4	0.16
(1,41)	1:87:A:LEU:HD11	1:160:A:LEU:HD13	4	0.16
(1,41)	1:87:A:LEU:HD12	1:160:A:LEU:HD11	4	0.16
(1,41)	1:87:A:LEU:HD12	1:160:A:LEU:HD12	4	0.16
(1,41)	1:87:A:LEU:HD12	1:160:A:LEU:HD13	4	0.16
(1,41)	1:87:A:LEU:HD13	1:160:A:LEU:HD11	4	0.16
(1,41)	1:87:A:LEU:HD13	1:160:A:LEU:HD12	4	0.16
(1,41)	1:87:A:LEU:HD13	1:160:A:LEU:HD13	4	0.16
(1,23)	1:131:A:VAL:HG11	1:62:A:LEU:HD11	4	0.16
(1,23)	1:131:A:VAL:HG11	1:62:A:LEU:HD12	4	0.16
(1,23)	1:131:A:VAL:HG11	1:62:A:LEU:HD13	4	0.16
(1,23)	1:131:A:VAL:HG12	1:62:A:LEU:HD11	4	0.16
(1,23)	1:131:A:VAL:HG12	1:62:A:LEU:HD12	4	0.16
(1,23)	1:131:A:VAL:HG12	1:62:A:LEU:HD13	4	0.16
(1,23)	1:131:A:VAL:HG13	1:62:A:LEU:HD11	4	0.16
(1,23)	1:131:A:VAL:HG13	1:62:A:LEU:HD12	4	0.16
(1,23)	1:131:A:VAL:HG13	1:62:A:LEU:HD13	4	0.16
(1,17)	1:136:A:THR:H	1:135:A:LEU:HD11	2	0.16
(1,17)	1:136:A:THR:H	1:135:A:LEU:HD12	2	0.16
(1,17)	1:136:A:THR:H	1:135:A:LEU:HD13	2	0.16
(2,28)	1:136:A:THR:H	1:132:A:ASP:O	1	0.15
(2,28)	1:136:A:THR:H	1:132:A:ASP:O	4	0.15
(2,28)	1:136:A:THR:H	1:132:A:ASP:O	9	0.15
(1,570)	1:118:A:LEU:HD21	1:62:A:LEU:CD2	5	0.15

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,570)	1:118:A:LEU:HD22	1:62:A:LEU:CD2	5	0.15
(1,570)	1:118:A:LEU:HD23	1:62:A:LEU:CD2	5	0.15
(1,514)	1:106:A:LEU:HD21	1:103:A:GLN:H	2	0.15
(1,514)	1:106:A:LEU:HD22	1:103:A:GLN:H	2	0.15
(1,514)	1:106:A:LEU:HD23	1:103:A:GLN:H	2	0.15
(1,455)	1:160:A:LEU:HD11	1:165:A:LYS:H	7	0.15
(1,455)	1:160:A:LEU:HD12	1:165:A:LYS:H	7	0.15
(1,455)	1:160:A:LEU:HD13	1:165:A:LYS:H	7	0.15
(1,350)	1:106:A:LEU:HD11	1:103:A:GLN:H	1	0.15
(1,350)	1:106:A:LEU:HD12	1:103:A:GLN:H	1	0.15
(1,350)	1:106:A:LEU:HD13	1:103:A:GLN:H	1	0.15
(1,238)	1:171:A:LEU:H	1:172:A:LYS:H	8	0.15
(1,235)	1:81:A:CYS:H	1:78:A:LEU:HD11	5	0.15
(1,235)	1:81:A:CYS:H	1:78:A:LEU:HD12	5	0.15
(1,235)	1:81:A:CYS:H	1:78:A:LEU:HD13	5	0.15
(1,177)	1:102:A:GLU:H	1:100:A:LEU:HD21	1	0.15
(1,177)	1:102:A:GLU:H	1:100:A:LEU:HD22	1	0.15
(1,177)	1:102:A:GLU:H	1:100:A:LEU:HD23	1	0.15
(1,112)	1:64:A:LYS:H	1:135:A:LEU:HD11	2	0.15
(1,112)	1:64:A:LYS:H	1:135:A:LEU:HD12	2	0.15
(1,112)	1:64:A:LYS:H	1:135:A:LEU:HD13	2	0.15
(1,110)	1:160:A:LEU:HD11	1:159:A:LEU:H	1	0.15
(1,110)	1:160:A:LEU:HD12	1:159:A:LEU:H	1	0.15
(1,110)	1:160:A:LEU:HD13	1:159:A:LEU:H	1	0.15
(1,110)	1:160:A:LEU:HD11	1:159:A:LEU:H	3	0.15
(1,110)	1:160:A:LEU:HD12	1:159:A:LEU:H	3	0.15
(1,110)	1:160:A:LEU:HD13	1:159:A:LEU:H	3	0.15
(1,110)	1:160:A:LEU:HD11	1:159:A:LEU:H	4	0.15
(1,110)	1:160:A:LEU:HD12	1:159:A:LEU:H	4	0.15
(1,110)	1:160:A:LEU:HD13	1:159:A:LEU:H	4	0.15
(1,110)	1:160:A:LEU:HD11	1:159:A:LEU:H	7	0.15
(1,110)	1:160:A:LEU:HD12	1:159:A:LEU:H	7	0.15
(1,110)	1:160:A:LEU:HD13	1:159:A:LEU:H	7	0.15
(1,110)	1:160:A:LEU:HD11	1:159:A:LEU:H	8	0.15
(1,110)	1:160:A:LEU:HD12	1:159:A:LEU:H	8	0.15
(1,110)	1:160:A:LEU:HD13	1:159:A:LEU:H	8	0.15
(1,79)	1:135:A:LEU:HD11	1:62:A:LEU:HD11	2	0.15
(1,79)	1:135:A:LEU:HD11	1:62:A:LEU:HD12	2	0.15
(1,79)	1:135:A:LEU:HD11	1:62:A:LEU:HD13	2	0.15
(1,79)	1:135:A:LEU:HD12	1:62:A:LEU:HD11	2	0.15
(1,79)	1:135:A:LEU:HD12	1:62:A:LEU:HD12	2	0.15
(1,79)	1:135:A:LEU:HD12	1:62:A:LEU:HD13	2	0.15

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,79)	1:135:A:LEU:HD13	1:62:A:LEU:HD11	2	0.15
(1,79)	1:135:A:LEU:HD13	1:62:A:LEU:HD12	2	0.15
(1,79)	1:135:A:LEU:HD13	1:62:A:LEU:HD13	2	0.15
(1,62)	1:138:A:ARG:H	1:137:A:VAL:HG11	8	0.15
(1,62)	1:138:A:ARG:H	1:137:A:VAL:HG12	8	0.15
(1,62)	1:138:A:ARG:H	1:137:A:VAL:HG13	8	0.15
(1,47)	1:171:A:LEU:HD21	1:171:A:LEU:H	3	0.15
(1,47)	1:171:A:LEU:HD22	1:171:A:LEU:H	3	0.15
(1,47)	1:171:A:LEU:HD23	1:171:A:LEU:H	3	0.15
(1,23)	1:131:A:VAL:HG11	1:62:A:LEU:HD11	7	0.15
(1,23)	1:131:A:VAL:HG11	1:62:A:LEU:HD12	7	0.15
(1,23)	1:131:A:VAL:HG11	1:62:A:LEU:HD13	7	0.15
(1,23)	1:131:A:VAL:HG12	1:62:A:LEU:HD11	7	0.15
(1,23)	1:131:A:VAL:HG12	1:62:A:LEU:HD12	7	0.15
(1,23)	1:131:A:VAL:HG12	1:62:A:LEU:HD13	7	0.15
(1,23)	1:131:A:VAL:HG13	1:62:A:LEU:HD11	7	0.15
(1,23)	1:131:A:VAL:HG13	1:62:A:LEU:HD12	7	0.15
(1,23)	1:131:A:VAL:HG13	1:62:A:LEU:HD13	7	0.15
(1,17)	1:136:A:THR:H	1:135:A:LEU:HD11	3	0.15
(1,17)	1:136:A:THR:H	1:135:A:LEU:HD12	3	0.15
(1,17)	1:136:A:THR:H	1:135:A:LEU:HD13	3	0.15
(1,17)	1:136:A:THR:H	1:135:A:LEU:HD11	9	0.15
(1,17)	1:136:A:THR:H	1:135:A:LEU:HD12	9	0.15
(1,17)	1:136:A:THR:H	1:135:A:LEU:HD13	9	0.15
(1,17)	1:136:A:THR:H	1:135:A:LEU:HD11	10	0.15
(1,17)	1:136:A:THR:H	1:135:A:LEU:HD12	10	0.15
(1,17)	1:136:A:THR:H	1:135:A:LEU:HD13	10	0.15
(1,559)	1:75:A:ILE:HD11	1:106:A:LEU:CD1	5	0.14
(1,559)	1:75:A:ILE:HD12	1:106:A:LEU:CD1	5	0.14
(1,559)	1:75:A:ILE:HD13	1:106:A:LEU:CD1	5	0.14
(1,514)	1:106:A:LEU:HD21	1:103:A:GLN:H	9	0.14
(1,514)	1:106:A:LEU:HD22	1:103:A:GLN:H	9	0.14
(1,514)	1:106:A:LEU:HD23	1:103:A:GLN:H	9	0.14
(1,477)	1:62:A:LEU:H	1:72:A:LEU:HD21	3	0.14
(1,477)	1:62:A:LEU:H	1:72:A:LEU:HD22	3	0.14
(1,477)	1:62:A:LEU:H	1:72:A:LEU:HD23	3	0.14
(1,455)	1:160:A:LEU:HD11	1:165:A:LYS:H	1	0.14
(1,455)	1:160:A:LEU:HD12	1:165:A:LYS:H	1	0.14
(1,455)	1:160:A:LEU:HD13	1:165:A:LYS:H	1	0.14
(1,455)	1:160:A:LEU:HD11	1:165:A:LYS:H	2	0.14
(1,455)	1:160:A:LEU:HD12	1:165:A:LYS:H	2	0.14
(1,455)	1:160:A:LEU:HD13	1:165:A:LYS:H	2	0.14

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,177)	1:102:A:GLU:H	1:100:A:LEU:HD21	4	0.14
(1,177)	1:102:A:GLU:H	1:100:A:LEU:HD22	4	0.14
(1,177)	1:102:A:GLU:H	1:100:A:LEU:HD23	4	0.14
(1,169)	1:85:A:GLN:H	1:87:A:LEU:H	7	0.14
(1,112)	1:64:A:LYS:H	1:135:A:LEU:HD11	7	0.14
(1,112)	1:64:A:LYS:H	1:135:A:LEU:HD12	7	0.14
(1,112)	1:64:A:LYS:H	1:135:A:LEU:HD13	7	0.14
(1,110)	1:160:A:LEU:HD11	1:159:A:LEU:H	2	0.14
(1,110)	1:160:A:LEU:HD12	1:159:A:LEU:H	2	0.14
(1,110)	1:160:A:LEU:HD13	1:159:A:LEU:H	2	0.14
(1,110)	1:160:A:LEU:HD11	1:159:A:LEU:H	5	0.14
(1,110)	1:160:A:LEU:HD12	1:159:A:LEU:H	5	0.14
(1,110)	1:160:A:LEU:HD13	1:159:A:LEU:H	5	0.14
(1,47)	1:171:A:LEU:HD21	1:171:A:LEU:H	6	0.14
(1,47)	1:171:A:LEU:HD22	1:171:A:LEU:H	6	0.14
(1,47)	1:171:A:LEU:HD23	1:171:A:LEU:H	6	0.14
(2,28)	1:136:A:THR:H	1:132:A:ASP:O	2	0.13
(1,559)	1:75:A:ILE:HD11	1:106:A:LEU:CD1	4	0.13
(1,559)	1:75:A:ILE:HD12	1:106:A:LEU:CD1	4	0.13
(1,559)	1:75:A:ILE:HD13	1:106:A:LEU:CD1	4	0.13
(1,455)	1:160:A:LEU:HD11	1:165:A:LYS:H	4	0.13
(1,455)	1:160:A:LEU:HD12	1:165:A:LYS:H	4	0.13
(1,455)	1:160:A:LEU:HD13	1:165:A:LYS:H	4	0.13
(1,455)	1:160:A:LEU:HD11	1:165:A:LYS:H	5	0.13
(1,455)	1:160:A:LEU:HD12	1:165:A:LYS:H	5	0.13
(1,455)	1:160:A:LEU:HD13	1:165:A:LYS:H	5	0.13
(1,455)	1:160:A:LEU:HD11	1:165:A:LYS:H	8	0.13
(1,455)	1:160:A:LEU:HD12	1:165:A:LYS:H	8	0.13
(1,455)	1:160:A:LEU:HD13	1:165:A:LYS:H	8	0.13
(1,455)	1:160:A:LEU:HD11	1:165:A:LYS:H	9	0.13
(1,455)	1:160:A:LEU:HD12	1:165:A:LYS:H	9	0.13
(1,455)	1:160:A:LEU:HD13	1:165:A:LYS:H	9	0.13
(1,455)	1:160:A:LEU:HD11	1:165:A:LYS:H	10	0.13
(1,455)	1:160:A:LEU:HD12	1:165:A:LYS:H	10	0.13
(1,455)	1:160:A:LEU:HD13	1:165:A:LYS:H	10	0.13
(1,402)	1:166:A:LYS:H	1:141:A:ILE:HD11	7	0.13
(1,402)	1:166:A:LYS:H	1:141:A:ILE:HD12	7	0.13
(1,402)	1:166:A:LYS:H	1:141:A:ILE:HD13	7	0.13
(1,238)	1:171:A:LEU:H	1:172:A:LYS:H	1	0.13
(1,238)	1:171:A:LEU:H	1:172:A:LYS:H	4	0.13
(1,238)	1:171:A:LEU:H	1:172:A:LYS:H	9	0.13
(1,206)	1:48:A:TRP:H	1:47:A:GLY:H	1	0.13

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,177)	1:102:A:GLU:H	1:100:A:LEU:HD21	2	0.13
(1,177)	1:102:A:GLU:H	1:100:A:LEU:HD22	2	0.13
(1,177)	1:102:A:GLU:H	1:100:A:LEU:HD23	2	0.13
(1,169)	1:85:A:GLN:H	1:87:A:LEU:H	2	0.13
(1,62)	1:138:A:ARG:H	1:137:A:VAL:HG11	5	0.13
(1,62)	1:138:A:ARG:H	1:137:A:VAL:HG12	5	0.13
(1,62)	1:138:A:ARG:H	1:137:A:VAL:HG13	5	0.13
(1,20)	1:102:A:GLU:H	1:52:A:LEU:HD11	1	0.13
(1,20)	1:102:A:GLU:H	1:52:A:LEU:HD12	1	0.13
(1,20)	1:102:A:GLU:H	1:52:A:LEU:HD13	1	0.13
(1,20)	1:102:A:GLU:H	1:52:A:LEU:HD11	6	0.13
(1,20)	1:102:A:GLU:H	1:52:A:LEU:HD12	6	0.13
(1,20)	1:102:A:GLU:H	1:52:A:LEU:HD13	6	0.13
(1,17)	1:136:A:THR:H	1:135:A:LEU:HD11	4	0.13
(1,17)	1:136:A:THR:H	1:135:A:LEU:HD12	4	0.13
(1,17)	1:136:A:THR:H	1:135:A:LEU:HD13	4	0.13
(1,17)	1:136:A:THR:H	1:135:A:LEU:HD11	5	0.13
(1,17)	1:136:A:THR:H	1:135:A:LEU:HD12	5	0.13
(1,17)	1:136:A:THR:H	1:135:A:LEU:HD13	5	0.13
(1,570)	1:118:A:LEU:HD21	1:62:A:LEU:CD2	3	0.12
(1,570)	1:118:A:LEU:HD22	1:62:A:LEU:CD2	3	0.12
(1,570)	1:118:A:LEU:HD23	1:62:A:LEU:CD2	3	0.12
(1,566)	1:106:A:LEU:HD11	1:75:A:ILE:CD1	10	0.12
(1,566)	1:106:A:LEU:HD12	1:75:A:ILE:CD1	10	0.12
(1,566)	1:106:A:LEU:HD13	1:75:A:ILE:CD1	10	0.12
(1,481)	1:106:A:LEU:HD21	1:53:A:ILE:H	10	0.12
(1,481)	1:106:A:LEU:HD22	1:53:A:ILE:H	10	0.12
(1,481)	1:106:A:LEU:HD23	1:53:A:ILE:H	10	0.12
(1,456)	1:161:A:LEU:HD11	1:96:A:GLU:H	3	0.12
(1,456)	1:161:A:LEU:HD12	1:96:A:GLU:H	3	0.12
(1,456)	1:161:A:LEU:HD13	1:96:A:GLU:H	3	0.12
(1,456)	1:161:A:LEU:HD11	1:96:A:GLU:H	4	0.12
(1,456)	1:161:A:LEU:HD12	1:96:A:GLU:H	4	0.12
(1,456)	1:161:A:LEU:HD13	1:96:A:GLU:H	4	0.12
(1,455)	1:160:A:LEU:HD11	1:165:A:LYS:H	3	0.12
(1,455)	1:160:A:LEU:HD12	1:165:A:LYS:H	3	0.12
(1,455)	1:160:A:LEU:HD13	1:165:A:LYS:H	3	0.12
(1,455)	1:160:A:LEU:HD11	1:165:A:LYS:H	6	0.12
(1,455)	1:160:A:LEU:HD12	1:165:A:LYS:H	6	0.12
(1,455)	1:160:A:LEU:HD13	1:165:A:LYS:H	6	0.12
(1,402)	1:166:A:LYS:H	1:141:A:ILE:HD11	3	0.12
(1,402)	1:166:A:LYS:H	1:141:A:ILE:HD12	3	0.12

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,402)	1:166:A:LYS:H	1:141:A:ILE:HD13	3	0.12
(1,377)	1:112:A:GLU:H	1:113:A:THR:H	5	0.12
(1,235)	1:81:A:CYS:H	1:78:A:LEU:HD11	9	0.12
(1,235)	1:81:A:CYS:H	1:78:A:LEU:HD12	9	0.12
(1,235)	1:81:A:CYS:H	1:78:A:LEU:HD13	9	0.12
(1,177)	1:102:A:GLU:H	1:100:A:LEU:HD21	5	0.12
(1,177)	1:102:A:GLU:H	1:100:A:LEU:HD22	5	0.12
(1,177)	1:102:A:GLU:H	1:100:A:LEU:HD23	5	0.12
(1,177)	1:102:A:GLU:H	1:100:A:LEU:HD21	9	0.12
(1,177)	1:102:A:GLU:H	1:100:A:LEU:HD22	9	0.12
(1,177)	1:102:A:GLU:H	1:100:A:LEU:HD23	9	0.12
(1,112)	1:64:A:LYS:H	1:135:A:LEU:HD11	8	0.12
(1,112)	1:64:A:LYS:H	1:135:A:LEU:HD12	8	0.12
(1,112)	1:64:A:LYS:H	1:135:A:LEU:HD13	8	0.12
(1,62)	1:138:A:ARG:H	1:137:A:VAL:HG11	10	0.12
(1,62)	1:138:A:ARG:H	1:137:A:VAL:HG12	10	0.12
(1,62)	1:138:A:ARG:H	1:137:A:VAL:HG13	10	0.12
(1,60)	1:78:A:LEU:H	1:110:A:VAL:HG11	3	0.12
(1,60)	1:78:A:LEU:H	1:110:A:VAL:HG12	3	0.12
(1,60)	1:78:A:LEU:H	1:110:A:VAL:HG13	3	0.12
(1,23)	1:131:A:VAL:HG11	1:62:A:LEU:HD11	5	0.12
(1,23)	1:131:A:VAL:HG11	1:62:A:LEU:HD12	5	0.12
(1,23)	1:131:A:VAL:HG11	1:62:A:LEU:HD13	5	0.12
(1,23)	1:131:A:VAL:HG12	1:62:A:LEU:HD11	5	0.12
(1,23)	1:131:A:VAL:HG12	1:62:A:LEU:HD12	5	0.12
(1,23)	1:131:A:VAL:HG12	1:62:A:LEU:HD13	5	0.12
(1,23)	1:131:A:VAL:HG13	1:62:A:LEU:HD11	5	0.12
(1,23)	1:131:A:VAL:HG13	1:62:A:LEU:HD12	5	0.12
(1,23)	1:131:A:VAL:HG13	1:62:A:LEU:HD13	5	0.12
(2,28)	1:136:A:THR:H	1:132:A:ASP:O	3	0.11
(1,570)	1:118:A:LEU:HD21	1:62:A:LEU:CD2	2	0.11
(1,570)	1:118:A:LEU:HD22	1:62:A:LEU:CD2	2	0.11
(1,570)	1:118:A:LEU:HD23	1:62:A:LEU:CD2	2	0.11
(1,514)	1:106:A:LEU:HD21	1:103:A:GLN:H	7	0.11
(1,514)	1:106:A:LEU:HD22	1:103:A:GLN:H	7	0.11
(1,514)	1:106:A:LEU:HD23	1:103:A:GLN:H	7	0.11
(1,481)	1:106:A:LEU:HD21	1:53:A:ILE:H	8	0.11
(1,481)	1:106:A:LEU:HD22	1:53:A:ILE:H	8	0.11
(1,481)	1:106:A:LEU:HD23	1:53:A:ILE:H	8	0.11
(1,456)	1:161:A:LEU:HD11	1:96:A:GLU:H	2	0.11
(1,456)	1:161:A:LEU:HD12	1:96:A:GLU:H	2	0.11
(1,456)	1:161:A:LEU:HD13	1:96:A:GLU:H	2	0.11

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,456)	1:161:A:LEU:HD11	1:96:A:GLU:H	5	0.11
(1,456)	1:161:A:LEU:HD12	1:96:A:GLU:H	5	0.11
(1,456)	1:161:A:LEU:HD13	1:96:A:GLU:H	5	0.11
(1,456)	1:161:A:LEU:HD11	1:96:A:GLU:H	8	0.11
(1,456)	1:161:A:LEU:HD12	1:96:A:GLU:H	8	0.11
(1,456)	1:161:A:LEU:HD13	1:96:A:GLU:H	8	0.11
(1,402)	1:166:A:LYS:H	1:141:A:ILE:HD11	2	0.11
(1,402)	1:166:A:LYS:H	1:141:A:ILE:HD12	2	0.11
(1,402)	1:166:A:LYS:H	1:141:A:ILE:HD13	2	0.11
(1,364)	1:106:A:LEU:HD11	1:106:A:LEU:H	4	0.11
(1,364)	1:106:A:LEU:HD12	1:106:A:LEU:H	4	0.11
(1,364)	1:106:A:LEU:HD13	1:106:A:LEU:H	4	0.11
(1,355)	1:112:A:GLU:H	1:113:A:THR:H	2	0.11
(1,215)	1:162:A:ASP:H	1:159:A:LEU:HD21	3	0.11
(1,215)	1:162:A:ASP:H	1:159:A:LEU:HD22	3	0.11
(1,215)	1:162:A:ASP:H	1:159:A:LEU:HD23	3	0.11
(1,206)	1:48:A:TRP:H	1:47:A:GLY:H	3	0.11
(1,50)	1:105:A:VAL:HG11	1:72:A:LEU:HD11	5	0.11
(1,50)	1:105:A:VAL:HG11	1:72:A:LEU:HD12	5	0.11
(1,50)	1:105:A:VAL:HG11	1:72:A:LEU:HD13	5	0.11
(1,50)	1:105:A:VAL:HG12	1:72:A:LEU:HD11	5	0.11
(1,50)	1:105:A:VAL:HG12	1:72:A:LEU:HD12	5	0.11
(1,50)	1:105:A:VAL:HG12	1:72:A:LEU:HD13	5	0.11
(1,50)	1:105:A:VAL:HG13	1:72:A:LEU:HD11	5	0.11
(1,50)	1:105:A:VAL:HG13	1:72:A:LEU:HD12	5	0.11
(1,50)	1:105:A:VAL:HG13	1:72:A:LEU:HD13	5	0.11
(1,24)	1:141:A:ILE:HD11	1:142:A:THR:H	7	0.11
(1,24)	1:141:A:ILE:HD12	1:142:A:THR:H	7	0.11
(1,24)	1:141:A:ILE:HD13	1:142:A:THR:H	7	0.11
(1,17)	1:136:A:THR:H	1:135:A:LEU:HD11	1	0.11
(1,17)	1:136:A:THR:H	1:135:A:LEU:HD12	1	0.11
(1,17)	1:136:A:THR:H	1:135:A:LEU:HD13	1	0.11
(1,12)	1:100:A:LEU:HD11	1:168:A:LEU:HD11	2	0.11
(1,12)	1:100:A:LEU:HD11	1:168:A:LEU:HD12	2	0.11
(1,12)	1:100:A:LEU:HD11	1:168:A:LEU:HD13	2	0.11
(1,12)	1:100:A:LEU:HD12	1:168:A:LEU:HD11	2	0.11
(1,12)	1:100:A:LEU:HD12	1:168:A:LEU:HD12	2	0.11
(1,12)	1:100:A:LEU:HD12	1:168:A:LEU:HD13	2	0.11
(1,12)	1:100:A:LEU:HD13	1:168:A:LEU:HD11	2	0.11
(1,12)	1:100:A:LEU:HD13	1:168:A:LEU:HD12	2	0.11
(1,12)	1:100:A:LEU:HD13	1:168:A:LEU:HD13	2	0.11
(1,12)	1:100:A:LEU:HD11	1:168:A:LEU:HD11	3	0.11

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,12)	1:100:A:LEU:HD11	1:168:A:LEU:HD12	3	0.11
(1,12)	1:100:A:LEU:HD11	1:168:A:LEU:HD13	3	0.11
(1,12)	1:100:A:LEU:HD12	1:168:A:LEU:HD11	3	0.11
(1,12)	1:100:A:LEU:HD12	1:168:A:LEU:HD12	3	0.11
(1,12)	1:100:A:LEU:HD12	1:168:A:LEU:HD13	3	0.11
(1,12)	1:100:A:LEU:HD13	1:168:A:LEU:HD11	3	0.11
(1,12)	1:100:A:LEU:HD13	1:168:A:LEU:HD12	3	0.11
(1,12)	1:100:A:LEU:HD13	1:168:A:LEU:HD13	3	0.11
(1,12)	1:100:A:LEU:HD11	1:168:A:LEU:HD11	4	0.11
(1,12)	1:100:A:LEU:HD11	1:168:A:LEU:HD12	4	0.11
(1,12)	1:100:A:LEU:HD11	1:168:A:LEU:HD13	4	0.11
(1,12)	1:100:A:LEU:HD12	1:168:A:LEU:HD11	4	0.11
(1,12)	1:100:A:LEU:HD12	1:168:A:LEU:HD12	4	0.11
(1,12)	1:100:A:LEU:HD12	1:168:A:LEU:HD13	4	0.11
(1,12)	1:100:A:LEU:HD13	1:168:A:LEU:HD11	4	0.11
(1,12)	1:100:A:LEU:HD13	1:168:A:LEU:HD12	4	0.11
(1,12)	1:100:A:LEU:HD13	1:168:A:LEU:HD13	4	0.11
(1,592)	1:170:A:LEU:HD11	1:170:A:LEU:CD1	1	0.1
(1,592)	1:170:A:LEU:HD12	1:170:A:LEU:CD1	1	0.1
(1,592)	1:170:A:LEU:HD13	1:170:A:LEU:CD1	1	0.1
(1,592)	1:170:A:LEU:HD11	1:170:A:LEU:CD1	2	0.1
(1,592)	1:170:A:LEU:HD12	1:170:A:LEU:CD1	2	0.1
(1,592)	1:170:A:LEU:HD13	1:170:A:LEU:CD1	2	0.1
(1,592)	1:105:A:VAL:HG21	1:105:A:VAL:CG2	3	0.1
(1,592)	1:105:A:VAL:HG22	1:105:A:VAL:CG2	3	0.1
(1,592)	1:105:A:VAL:HG23	1:105:A:VAL:CG2	3	0.1
(1,592)	1:170:A:LEU:HD11	1:170:A:LEU:CD1	4	0.1
(1,592)	1:170:A:LEU:HD12	1:170:A:LEU:CD1	4	0.1
(1,592)	1:170:A:LEU:HD13	1:170:A:LEU:CD1	4	0.1
(1,592)	1:105:A:VAL:HG21	1:105:A:VAL:CG2	5	0.1
(1,592)	1:105:A:VAL:HG22	1:105:A:VAL:CG2	5	0.1
(1,592)	1:105:A:VAL:HG23	1:105:A:VAL:CG2	5	0.1
(1,592)	1:105:A:VAL:HG21	1:105:A:VAL:CG2	6	0.1
(1,592)	1:105:A:VAL:HG22	1:105:A:VAL:CG2	6	0.1
(1,592)	1:105:A:VAL:HG23	1:105:A:VAL:CG2	6	0.1
(1,592)	1:170:A:LEU:HD11	1:170:A:LEU:CD1	7	0.1
(1,592)	1:170:A:LEU:HD12	1:170:A:LEU:CD1	7	0.1
(1,592)	1:170:A:LEU:HD13	1:170:A:LEU:CD1	7	0.1
(1,592)	1:170:A:LEU:HD11	1:170:A:LEU:CD1	8	0.1
(1,592)	1:170:A:LEU:HD12	1:170:A:LEU:CD1	8	0.1
(1,592)	1:170:A:LEU:HD13	1:170:A:LEU:CD1	8	0.1
(1,592)	1:105:A:VAL:HG21	1:105:A:VAL:CG2	9	0.1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,592)	1:105:A:VAL:HG22	1:105:A:VAL:CG2	9	0.1
(1,592)	1:105:A:VAL:HG23	1:105:A:VAL:CG2	9	0.1
(1,592)	1:170:A:LEU:HD11	1:170:A:LEU:CD1	10	0.1
(1,592)	1:170:A:LEU:HD12	1:170:A:LEU:CD1	10	0.1
(1,592)	1:170:A:LEU:HD13	1:170:A:LEU:CD1	10	0.1
(1,456)	1:161:A:LEU:HD11	1:96:A:GLU:H	7	0.1
(1,456)	1:161:A:LEU:HD12	1:96:A:GLU:H	7	0.1
(1,456)	1:161:A:LEU:HD13	1:96:A:GLU:H	7	0.1
(1,402)	1:166:A:LYS:H	1:141:A:ILE:HD11	5	0.1
(1,402)	1:166:A:LYS:H	1:141:A:ILE:HD12	5	0.1
(1,402)	1:166:A:LYS:H	1:141:A:ILE:HD13	5	0.1
(1,402)	1:166:A:LYS:H	1:141:A:ILE:HD11	9	0.1
(1,402)	1:166:A:LYS:H	1:141:A:ILE:HD12	9	0.1
(1,402)	1:166:A:LYS:H	1:141:A:ILE:HD13	9	0.1
(1,235)	1:81:A:CYS:H	1:78:A:LEU:HD11	7	0.1
(1,235)	1:81:A:CYS:H	1:78:A:LEU:HD12	7	0.1
(1,235)	1:81:A:CYS:H	1:78:A:LEU:HD13	7	0.1
(1,20)	1:102:A:GLU:H	1:52:A:LEU:HD11	2	0.1
(1,20)	1:102:A:GLU:H	1:52:A:LEU:HD12	2	0.1
(1,20)	1:102:A:GLU:H	1:52:A:LEU:HD13	2	0.1
(1,17)	1:136:A:THR:H	1:135:A:LEU:HD11	6	0.1
(1,17)	1:136:A:THR:H	1:135:A:LEU:HD12	6	0.1
(1,17)	1:136:A:THR:H	1:135:A:LEU:HD13	6	0.1
(1,12)	1:100:A:LEU:HD11	1:168:A:LEU:HD11	7	0.1
(1,12)	1:100:A:LEU:HD11	1:168:A:LEU:HD12	7	0.1
(1,12)	1:100:A:LEU:HD11	1:168:A:LEU:HD13	7	0.1
(1,12)	1:100:A:LEU:HD12	1:168:A:LEU:HD11	7	0.1
(1,12)	1:100:A:LEU:HD12	1:168:A:LEU:HD12	7	0.1
(1,12)	1:100:A:LEU:HD12	1:168:A:LEU:HD13	7	0.1
(1,12)	1:100:A:LEU:HD13	1:168:A:LEU:HD11	7	0.1
(1,12)	1:100:A:LEU:HD13	1:168:A:LEU:HD12	7	0.1
(1,12)	1:100:A:LEU:HD13	1:168:A:LEU:HD13	7	0.1

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

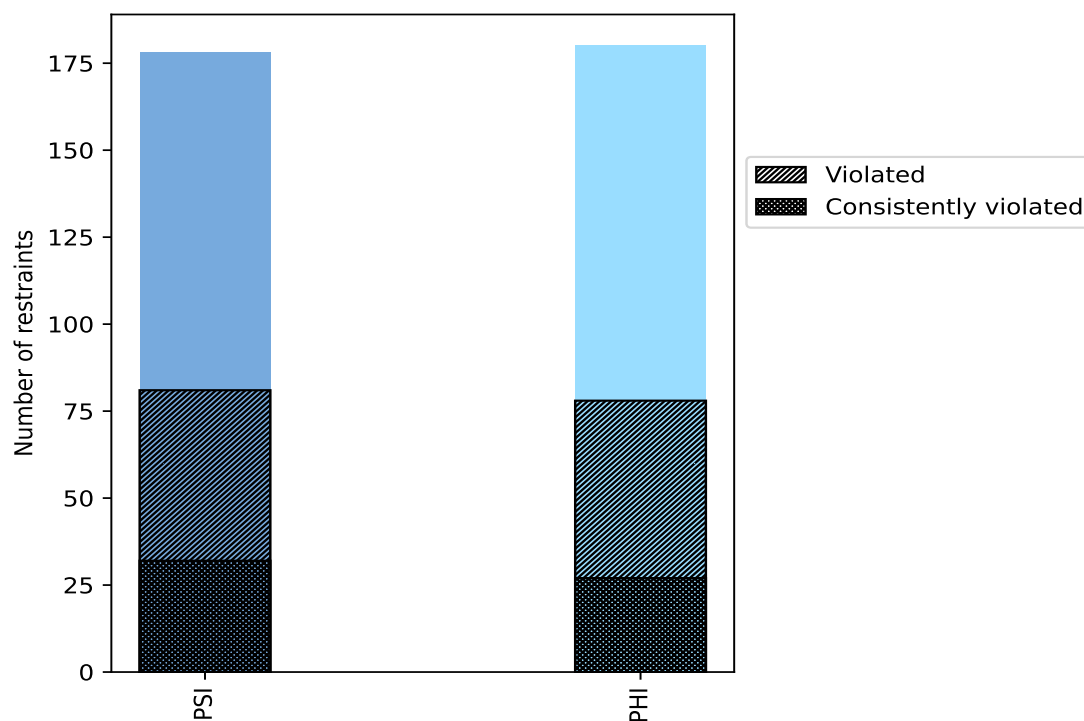
10.1 Summary of dihedral-angle violations [i](#)

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
PSI	178	49.7	81	45.5	22.6	32	18.0	8.9
PHI	180	50.3	78	43.3	21.8	27	15.0	7.5
Total	358	100.0	159	44.4	44.4	59	16.5	16.5

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

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



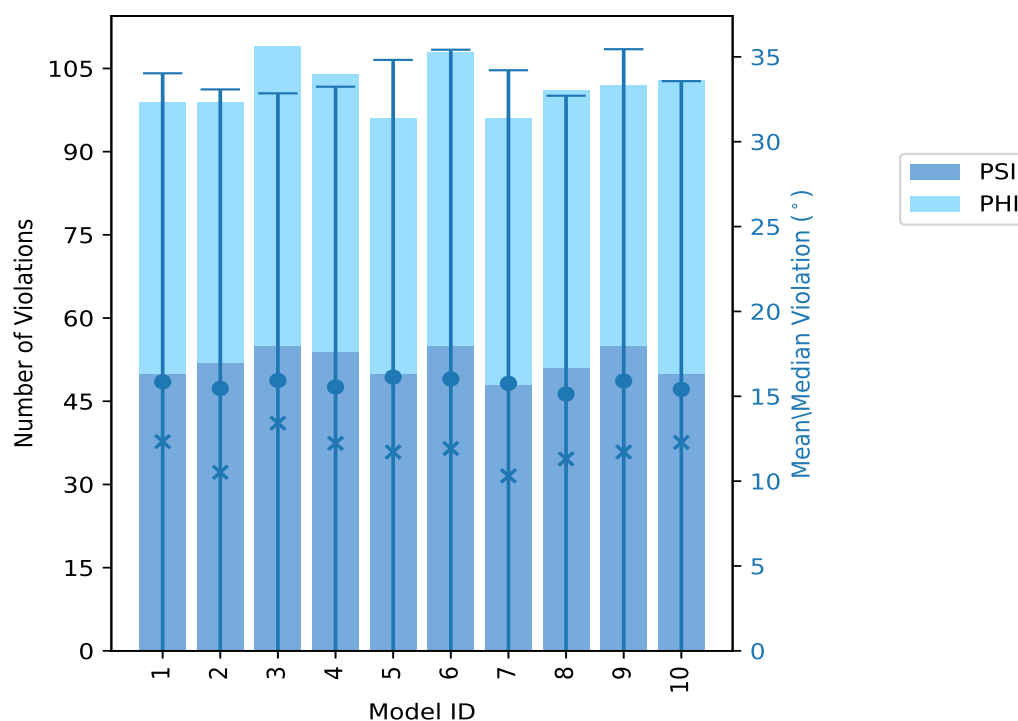
Violated and consistently violated restraints are shown using different hatch patterns in their respective categories

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

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

Model ID	Number of violations			Mean (°)	Max (°)	SD (°)	Median (°)
	PSI	PHI	Total				
1	50	49	99	15.85	106.8	18.18	12.33
2	52	47	99	15.46	107.18	17.62	10.52
3	55	54	109	15.93	102.96	16.92	13.42
4	54	50	104	15.55	106.26	17.69	12.23
5	50	46	96	16.13	108.84	18.69	11.72
6	55	53	108	16.02	112.42	19.4	11.92
7	48	48	96	15.76	102.91	18.45	10.31
8	51	50	101	15.13	107.28	17.58	11.31
9	55	47	102	15.9	107.77	19.55	11.72
10	50	53	103	15.41	110.29	18.16	12.28

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



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

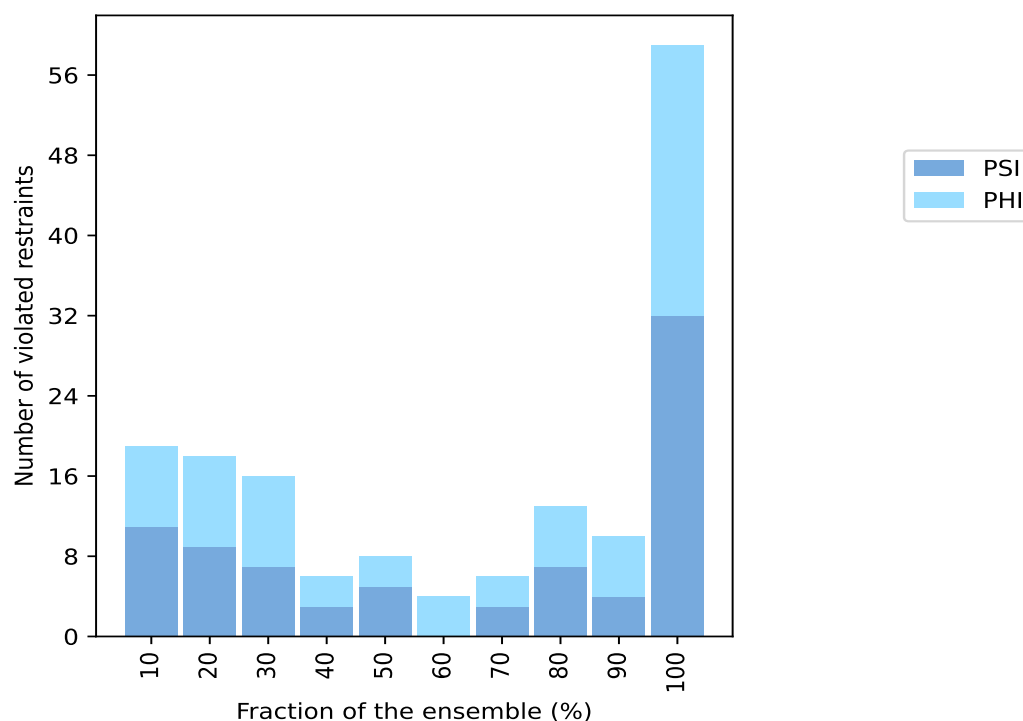
10.3 Dihedral-angle violation statistics for the ensemble [i](#)

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

Number of violated restraints			Fraction of the ensemble	
PSI	PHI	Total	Count ¹	%
11	8	19	1	10.0
9	9	18	2	20.0
7	9	16	3	30.0
3	3	6	4	40.0
5	3	8	5	50.0
0	4	4	6	60.0
3	3	6	7	70.0
7	6	13	8	80.0
4	6	10	9	90.0
32	27	59	10	100.0

¹ Number of models with violations

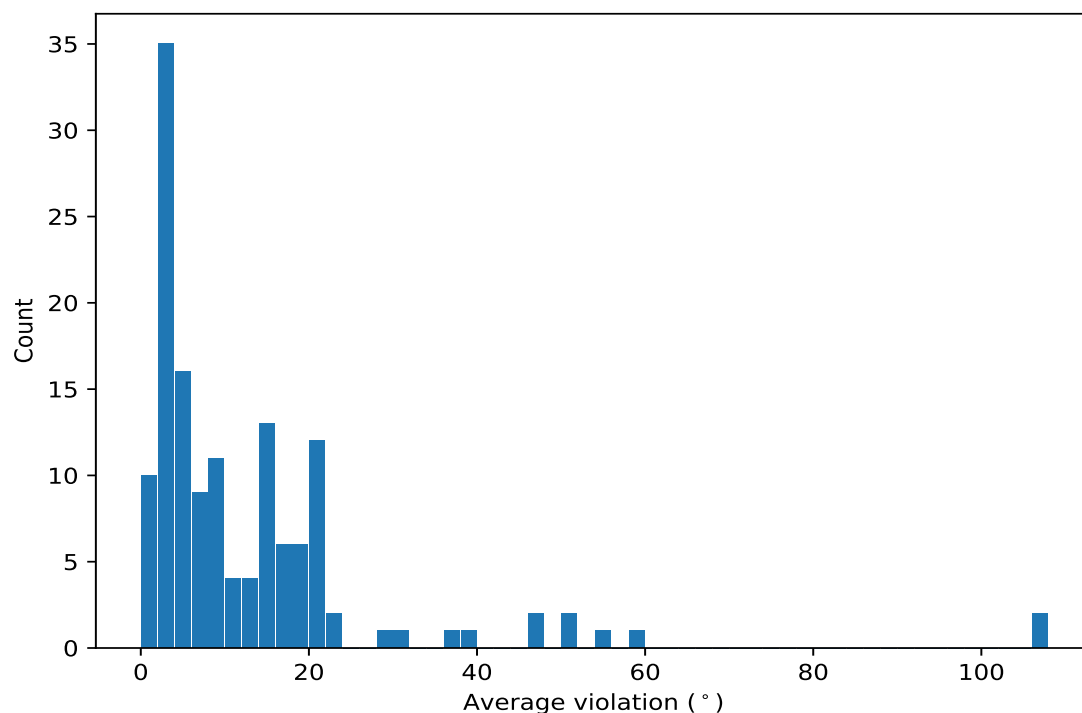
10.3.1 Bar graph : Dihedral-angle Violation statistics for the ensemble [i](#)



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

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

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



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

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

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Models ¹	Mean	SD ²	Median
(1,302)	1:125:B:VAL:N	1:125:B:VAL:CA	1:125:B:VAL:C	1:126:B:PRO:N	10	107.24	2.83	107.23
(1,301)	1:125:A:VAL:N	1:125:A:VAL:CA	1:125:A:VAL:C	1:126:A:PRO:N	10	107.08	2.74	106.84
(1,298)	1:120:B:PRO:N	1:120:B:PRO:CA	1:120:B:PRO:C	1:121:B:ASP:N	10	51.31	1.54	51.16
(1,297)	1:120:A:PRO:N	1:120:A:PRO:CA	1:120:A:PRO:C	1:121:A:ASP:N	10	50.68	2.45	51.28
(1,326)	1:152:B:TYR:N	1:152:B:TYR:CA	1:152:B:TYR:C	1:153:B:GLU:N	10	46.91	1.9	46.9
(1,325)	1:152:A:TYR:N	1:152:A:TYR:CA	1:152:A:TYR:C	1:153:A:GLU:N	10	46.46	2.14	46.87
(1,184)	1:43:B:THR:N	1:43:B:THR:CA	1:43:B:THR:C	1:44:B:LEU:N	10	38.86	1.86	39.5
(1,183)	1:43:A:THR:N	1:43:A:THR:CA	1:43:A:THR:C	1:44:A:LEU:N	10	37.59	2.94	38.26
(1,149)	1:151:A:ALA:C	1:152:A:TYR:N	1:152:A:TYR:CA	1:152:A:TYR:C	10	30.78	2.05	30.56
(1,150)	1:151:B:ALA:C	1:152:B:TYR:N	1:152:B:TYR:CA	1:152:B:TYR:C	10	29.73	1.21	30.05
(1,23)	1:59:A:GLU:C	1:60:A:GLU:N	1:60:A:GLU:CA	1:60:A:GLU:C	10	22.19	1.24	21.95
(1,155)	1:154:A:PRO:C	1:155:A:ALA:N	1:155:A:ALA:CA	1:155:A:ALA:C	10	22.12	0.96	22.18
(1,156)	1:154:B:PRO:C	1:155:B:ALA:N	1:155:B:ALA:CA	1:155:B:ALA:C	10	21.89	2.23	22.61

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Models ¹	Mean	SD ²	Median
(1,182)	1:42:B:GLN:N	1:42:B:GLN:CA	1:42:B:GLN:C	1:43:B:THR:N	10	21.88	5.92	23.26
(1,283)	1:109:A:LEU:N	1:109:A:LEU:CA	1:109:A:LEU:C	1:110:A:VAL:N	10	21.67	1.37	21.38
(1,181)	1:42:A:GLN:N	1:42:A:GLN:CA	1:42:A:GLN:C	1:43:A:THR:N	10	21.63	6.67	20.64
(1,115)	1:116:A:LYS:C	1:117:A:HIS:N	1:117:A:HIS:CA	1:117:A:HIS:C	10	21.62	2.23	21.25
(1,21)	1:58:A:TYR:C	1:59:A:GLU:N	1:59:A:GLU:CA	1:59:A:GLU:C	10	21.4	2.34	21.1
(1,24)	1:59:B:GLU:C	1:60:B:GLU:N	1:60:B:GLU:CA	1:60:B:GLU:C	10	21.35	1.43	21.32
(1,284)	1:109:B:LEU:N	1:109:B:LEU:CA	1:109:B:LEU:C	1:110:B:VAL:N	10	21.05	1.45	20.97
(1,116)	1:116:B:LYS:C	1:117:B:HIS:N	1:117:B:HIS:CA	1:117:B:HIS:C	10	20.7	2.74	19.84
(1,22)	1:58:B:TYR:C	1:59:B:GLU:N	1:59:B:GLU:CA	1:59:B:GLU:C	10	20.0	2.25	20.35
(1,249)	1:89:A:LYS:N	1:89:A:LYS:CA	1:89:A:LYS:C	1:90:A:VAL:N	10	18.61	1.85	18.02
(1,250)	1:89:B:LYS:N	1:89:B:LYS:CA	1:89:B:LYS:C	1:90:B:VAL:N	10	18.51	1.73	18.34
(1,291)	1:116:A:LYS:N	1:116:A:LYS:CA	1:116:A:LYS:C	1:117:A:HIS:N	10	18.33	1.88	17.64
(1,313)	1:137:A:VAL:N	1:137:A:VAL:CA	1:137:A:VAL:C	1:138:A:ARG:N	10	18.14	3.25	20.04
(1,111)	1:114:A:THR:C	1:115:A:ASP:N	1:115:A:ASP:CA	1:115:A:ASP:C	10	17.81	1.7	17.98
(1,88)	1:98:B:GLN:C	1:99:B:LYS:N	1:99:B:LYS:CA	1:99:B:LYS:C	10	17.8	1.57	18.04
(1,314)	1:137:B:VAL:N	1:137:B:VAL:CA	1:137:B:VAL:C	1:138:B:ARG:N	10	17.78	2.89	18.53
(1,292)	1:116:B:LYS:N	1:116:B:LYS:CA	1:116:B:LYS:C	1:117:B:HIS:N	10	17.76	2.51	17.27
(1,112)	1:114:B:THR:C	1:115:B:ASP:N	1:115:B:ASP:CA	1:115:B:ASP:C	10	17.69	2.04	18.09
(1,87)	1:98:A:GLN:C	1:99:A:LYS:N	1:99:A:LYS:CA	1:99:A:LYS:C	10	16.31	3.22	17.42
(1,175)	1:165:A:LYS:C	1:166:A:LYS:N	1:166:A:LYS:CA	1:166:A:LYS:C	10	15.93	0.62	16.08
(1,186)	1:44:B:LEU:N	1:44:B:LEU:CA	1:44:B:LEU:C	1:45:B:SER:N	10	15.92	3.12	14.98
(1,130)	1:131:B:VAL:C	1:132:B:ASP:N	1:132:B:ASP:CA	1:132:B:ASP:C	10	15.62	2.19	15.82
(1,176)	1:165:B:LYS:C	1:166:B:LYS:N	1:166:B:LYS:CA	1:166:B:LYS:C	10	15.35	0.79	15.38
(1,201)	1:59:A:GLU:N	1:59:A:GLU:CA	1:59:A:GLU:C	1:60:A:GLU:N	10	14.33	1.51	13.6
(1,58)	1:79:B:ASP:C	1:80:B:GLU:N	1:80:B:GLU:CA	1:80:B:GLU:C	10	14.28	2.12	13.9
(1,129)	1:131:A:VAL:C	1:132:A:ASP:N	1:132:A:ASP:CA	1:132:A:ASP:C	10	14.22	1.66	14.2
(1,57)	1:79:A:ASP:C	1:80:A:GLU:N	1:80:A:GLU:CA	1:80:A:GLU:C	10	14.19	2.26	14.34
(1,202)	1:59:B:GLU:N	1:59:B:GLU:CA	1:59:B:GLU:C	1:60:B:GLU:N	10	14.0	1.5	13.22
(1,199)	1:58:A:TYR:N	1:58:A:TYR:CA	1:58:A:TYR:C	1:59:A:GLU:N	10	13.12	2.56	12.36
(1,246)	1:86:B:ALA:N	1:86:B:ALA:CA	1:86:B:ALA:C	1:87:B:LEU:N	10	12.73	3.12	12.46
(1,245)	1:86:A:ALA:N	1:86:A:ALA:CA	1:86:A:ALA:C	1:87:A:LEU:N	10	12.44	2.81	12.03
(1,324)	1:149:B:LEU:N	1:149:B:LEU:CA	1:149:B:LEU:C	1:150:B:TYR:N	10	11.83	2.01	11.26
(1,48)	1:73:B:MET:C	1:74:B:ILE:N	1:74:B:ILE:CA	1:74:B:ILE:C	10	11.81	2.53	12.01
(1,200)	1:58:B:TYR:N	1:58:B:TYR:CA	1:58:B:TYR:C	1:59:B:GLU:N	10	10.98	2.77	11.56
(1,47)	1:73:A:MET:C	1:74:A:ILE:N	1:74:A:ILE:CA	1:74:A:ILE:C	10	10.51	0.66	10.6
(1,323)	1:149:A:LEU:N	1:149:A:LEU:CA	1:149:A:LEU:C	1:150:A:TYR:N	10	9.56	2.47	9.8
(1,3)	1:42:A:GLN:C	1:43:A:THR:N	1:43:A:THR:CA	1:43:A:THR:C	10	7.34	4.78	6.68
(1,311)	1:136:A:THR:N	1:136:A:THR:CA	1:136:A:THR:C	1:137:A:VAL:N	10	5.19	1.41	5.09
(1,347)	1:163:A:ASN:N	1:163:A:ASN:CA	1:163:A:ASN:C	1:164:A:MET:N	10	4.53	0.46	4.48
(1,348)	1:163:B:ASN:N	1:163:B:ASN:CA	1:163:B:ASN:C	1:164:B:MET:N	10	4.51	0.63	4.34
(1,351)	1:165:A:LYS:N	1:165:A:LYS:CA	1:165:A:LYS:C	1:166:A:LYS:N	10	3.48	0.57	3.72
(1,352)	1:165:B:LYS:N	1:165:B:LYS:CA	1:165:B:LYS:C	1:166:B:LYS:N	10	3.05	0.75	3.27
(1,163)	1:159:A:LEU:C	1:160:A:LEU:N	1:160:A:LEU:CA	1:160:A:LEU:C	10	3.04	0.66	2.96
(1,75)	1:90:A:VAL:C	1:91:A:PHE:N	1:91:A:PHE:CA	1:91:A:PHE:C	10	2.91	0.45	3.16
(1,67)	1:86:A:ALA:C	1:87:A:LEU:N	1:87:A:LEU:CA	1:87:A:LEU:C	10	2.73	1.57	2.3
(1,172)	1:163:B:ASN:C	1:164:B:MET:N	1:164:B:MET:CA	1:164:B:MET:C	10	1.96	0.58	2.05
(1,190)	1:46:B:ARG:N	1:46:B:ARG:CA	1:46:B:ARG:C	1:47:B:GLY:N	9	55.35	19.91	59.86
(1,262)	1:97:B:ILE:N	1:97:B:ILE:CA	1:97:B:ILE:C	1:98:B:GLN:N	9	5.13	1.21	5.07
(1,312)	1:136:B:THR:N	1:136:B:THR:CA	1:136:B:THR:C	1:137:B:VAL:N	9	4.91	1.39	5.15
(1,261)	1:97:A:ILE:N	1:97:A:ILE:CA	1:97:A:ILE:C	1:98:A:GLN:N	9	4.7	0.89	4.91
(1,32)	1:63:B:TYR:C	1:64:B:LYS:N	1:64:B:LYS:CA	1:64:B:LYS:C	9	3.8	1.91	3.66

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Models ¹	Mean	SD ²	Median
(1,6)	1:43:B:THR:C	1:44:B:LEU:N	1:44:B:LEU:CA	1:44:B:LEU:C	9	3.5	1.8	2.53
(1,68)	1:86:B:ALA:C	1:87:B:LEU:N	1:87:B:LEU:CA	1:87:B:LEU:C	9	3.07	1.29	3.03
(1,164)	1:159:B:LEU:C	1:160:B:LEU:N	1:160:B:LEU:CA	1:160:B:LEU:C	9	2.96	0.54	3.13
(1,83)	1:96:A:GLU:C	1:97:A:ILE:N	1:97:A:ILE:CA	1:97:A:ILE:C	9	2.74	0.65	2.74
(1,76)	1:90:B:VAL:C	1:91:B:PHE:N	1:91:B:PHE:CA	1:91:B:PHE:C	9	2.64	0.58	2.69
(1,189)	1:46:A:ARG:N	1:46:A:ARG:CA	1:46:A:ARG:C	1:47:A:GLY:N	8	59.64	21.91	62.94
(1,13)	1:49:A:GLY:C	1:50:A:ASP:N	1:50:A:ASP:CA	1:50:A:ASP:C	8	20.07	8.17	19.94
(1,14)	1:49:B:GLY:C	1:50:B:ASP:N	1:50:B:ASP:CA	1:50:B:ASP:C	8	18.17	13.94	16.47
(1,185)	1:44:A:LEU:N	1:44:A:LEU:CA	1:44:A:LEU:C	1:45:A:SER:N	8	15.24	4.85	12.94
(1,4)	1:42:B:GLN:C	1:43:B:THR:N	1:43:B:THR:CA	1:43:B:THR:C	8	9.04	3.94	10.86
(1,209)	1:63:A:TYR:N	1:63:A:TYR:CA	1:63:A:TYR:C	1:64:A:LYS:N	8	8.01	4.23	8.16
(1,196)	1:54:B:TRP:N	1:54:B:TRP:CA	1:54:B:TRP:C	1:55:B:THR:N	8	7.26	4.06	7.69
(1,282)	1:108:B:ASN:N	1:108:B:ASN:CA	1:108:B:ASN:C	1:109:B:LEU:N	8	7.11	4.02	7.26
(1,281)	1:108:A:ASN:N	1:108:A:ASN:CA	1:108:A:ASN:C	1:109:A:LEU:N	8	4.92	3.25	3.81
(1,213)	1:65:A:SER:N	1:65:A:SER:CA	1:65:A:SER:C	1:66:A:LYS:N	8	3.82	1.7	4.04
(1,84)	1:96:B:GLU:C	1:97:B:ILE:N	1:97:B:ILE:CA	1:97:B:ILE:C	8	3.43	1.07	3.13
(1,64)	1:84:B:SER:C	1:85:B:GLN:N	1:85:B:GLN:CA	1:85:B:GLN:C	8	2.0	0.89	1.78
(1,171)	1:163:A:ASN:C	1:164:A:MET:N	1:164:A:MET:CA	1:164:A:MET:C	8	1.9	0.45	1.86
(1,195)	1:54:A:TRP:N	1:54:A:TRP:CA	1:54:A:TRP:C	1:55:A:THR:N	7	9.61	5.04	8.41
(1,332)	1:155:B:ALA:N	1:155:B:ALA:CA	1:155:B:ALA:C	1:156:B:ASP:N	7	9.55	0.32	9.57
(1,331)	1:155:A:ALA:N	1:155:A:ALA:CA	1:155:A:ALA:C	1:156:A:ASP:N	7	9.21	0.27	9.21
(1,5)	1:43:A:THR:C	1:44:A:LEU:N	1:44:A:LEU:CA	1:44:A:LEU:C	7	2.77	1.17	2.54
(1,63)	1:84:A:SER:C	1:85:A:GLN:N	1:85:A:GLN:CA	1:85:A:GLN:C	7	2.64	1.27	1.97
(1,162)	1:158:B:ALA:C	1:159:B:LEU:N	1:159:B:LEU:CA	1:159:B:LEU:C	7	2.46	0.99	2.18
(1,12)	1:47:B:GLY:C	1:48:B:TRP:N	1:48:B:TRP:CA	1:48:B:TRP:C	6	20.02	12.02	23.49
(1,110)	1:111:B:TYR:C	1:112:B:GLU:N	1:112:B:GLU:CA	1:112:B:GLU:C	6	7.65	1.07	7.8
(1,31)	1:63:A:TYR:C	1:64:A:LYS:N	1:64:A:LYS:CA	1:64:A:LYS:C	6	6.72	2.05	6.38
(1,161)	1:158:A:ALA:C	1:159:A:LEU:N	1:159:A:LEU:CA	1:159:A:LEU:C	6	2.17	0.42	2.14
(1,237)	1:80:A:GLU:N	1:80:A:GLU:CA	1:80:A:GLU:C	1:81:A:CYS:N	5	9.83	6.29	8.36
(1,210)	1:63:B:TYR:N	1:63:B:TYR:CA	1:63:B:TYR:C	1:64:B:LYS:N	5	8.54	1.23	8.17
(1,34)	1:64:B:LYS:C	1:65:B:SER:N	1:65:B:SER:CA	1:65:B:SER:C	5	5.17	2.52	4.88
(1,132)	1:132:B:ASP:C	1:133:B:PRO:N	1:133:B:PRO:CA	1:133:B:PRO:C	5	4.42	1.77	4.7
(1,11)	1:47:A:GLY:C	1:48:A:TRP:N	1:48:A:TRP:CA	1:48:A:TRP:C	5	4.27	1.72	4.04
(1,214)	1:65:B:SER:N	1:65:B:SER:CA	1:65:B:SER:C	1:66:B:LYS:N	5	3.76	1.54	4.08
(1,276)	1:105:B:VAL:N	1:105:B:VAL:CA	1:105:B:VAL:C	1:106:B:LEU:N	5	3.75	2.0	2.66
(1,275)	1:105:A:VAL:N	1:105:A:VAL:CA	1:105:A:VAL:C	1:106:A:LEU:N	5	3.3	2.09	2.36
(1,109)	1:111:A:TYR:C	1:112:A:GLU:N	1:112:A:GLU:CA	1:112:A:GLU:C	4	8.02	0.51	8.02
(1,36)	1:65:B:SER:C	1:66:B:LYS:N	1:66:B:LYS:CA	1:66:B:LYS:C	4	6.52	4.68	5.28
(1,338)	1:158:B:ALA:N	1:158:B:ALA:CA	1:158:B:ALA:C	1:159:B:LEU:N	4	3.59	2.02	3.37
(1,204)	1:60:B:GLU:N	1:60:B:GLU:CA	1:60:B:GLU:C	1:61:B:ALA:N	4	2.97	0.92	2.76
(1,131)	1:132:A:ASP:C	1:133:A:PRO:N	1:133:A:PRO:CA	1:133:A:PRO:C	4	2.46	0.98	2.45
(1,187)	1:45:A:SER:N	1:45:A:SER:CA	1:45:A:SER:C	1:46:A:ARG:N	4	2.43	1.63	1.72
(1,160)	1:157:B:THR:C	1:158:B:ALA:N	1:158:B:ALA:CA	1:158:B:ALA:C	3	19.2	3.47	19.62
(1,159)	1:157:A:THR:C	1:158:A:ALA:N	1:158:A:ALA:CA	1:158:A:ALA:C	3	15.22	1.85	16.52
(1,145)	1:146:A:SER:C	1:147:A:ASN:N	1:147:A:ASN:CA	1:147:A:ASN:C	3	14.02	7.56	18.58
(1,238)	1:80:B:GLU:N	1:80:B:GLU:CA	1:80:B:GLU:C	1:81:B:CYS:N	3	12.76	7.27	8.46
(1,16)	1:53:B:ILE:C	1:54:B:TRP:N	1:54:B:TRP:CA	1:54:B:TRP:C	3	7.79	3.84	9.02
(1,33)	1:64:A:LYS:C	1:65:A:SER:N	1:65:A:SER:CA	1:65:A:SER:C	3	7.44	2.99	5.4
(1,336)	1:157:B:THR:N	1:157:B:THR:CA	1:157:B:THR:C	1:158:B:ALA:N	3	5.55	3.15	5.92
(1,191)	1:48:A:TRP:N	1:48:A:TRP:CA	1:48:A:TRP:C	1:49:A:GLY:N	3	5.07	3.78	2.42
(1,192)	1:48:B:TRP:N	1:48:B:TRP:CA	1:48:B:TRP:C	1:49:B:GLY:N	3	4.44	1.38	3.49

Continued on next page...

Continued from previous page...

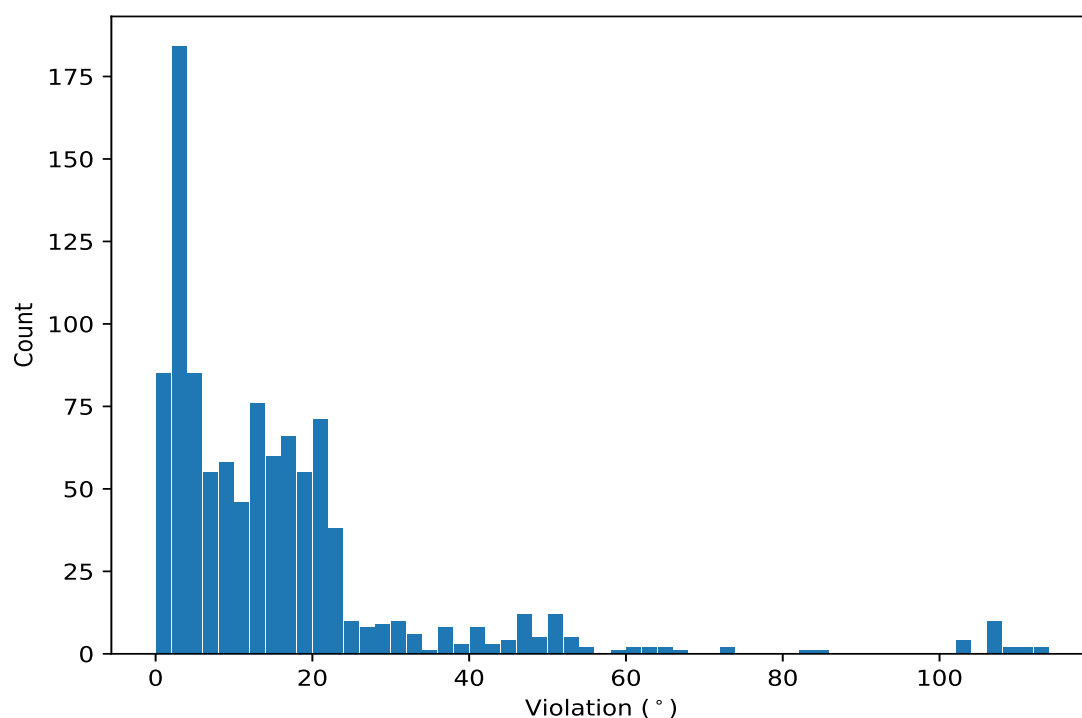
Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Models ¹	Mean	SD ²	Median
(1,188)	1:45:B:SER:N	1:45:B:SER:CA	1:45:B:SER:C	1:46:B:ARG:N	3	4.1	1.64	3.94
(1,203)	1:60:A:GLU:N	1:60:A:GLU:CA	1:60:A:GLU:C	1:61:A:ALA:N	3	3.7	1.4	4.37
(1,20)	1:57:B:THR:C	1:58:B:TYR:N	1:58:B:TYR:CA	1:58:B:TYR:C	3	2.79	1.26	2.81
(1,9)	1:45:A:SER:C	1:46:A:ARG:N	1:46:A:ARG:CA	1:46:A:ARG:C	3	2.56	0.45	2.32
(1,35)	1:65:A:SER:C	1:66:A:LYS:N	1:66:A:LYS:CA	1:66:A:LYS:C	3	2.53	1.37	1.95
(1,337)	1:158:A:ALA:N	1:158:A:ALA:CA	1:158:A:ALA:C	1:159:A:LEU:N	3	1.81	0.36	1.85
(1,10)	1:45:B:SER:C	1:46:B:ARG:N	1:46:B:ARG:CA	1:46:B:ARG:C	3	1.51	0.41	1.27
(1,194)	1:50:B:ASP:N	1:50:B:ASP:CA	1:50:B:ASP:C	1:51:B:GLN:N	2	14.84	7.9	14.84
(1,217)	1:67:A:THR:N	1:67:A:THR:CA	1:67:A:THR:C	1:68:A:SER:N	2	9.32	4.48	9.32
(1,193)	1:50:A:ASP:N	1:50:A:ASP:CA	1:50:A:ASP:C	1:51:A:GLN:N	2	8.82	5.91	8.82
(1,260)	1:96:B:GLU:N	1:96:B:GLU:CA	1:96:B:GLU:C	1:97:B:ILE:N	2	7.38	1.13	7.38
(1,101)	1:106:A:LEU:C	1:107:A:LEU:N	1:107:A:LEU:CA	1:107:A:LEU:C	2	5.35	2.72	5.35
(1,288)	1:112:B:GLU:N	1:112:B:GLU:CA	1:112:B:GLU:C	1:113:B:THR:N	2	4.92	1.72	4.92
(1,7)	1:44:A:LEU:C	1:45:A:SER:N	1:45:A:SER:CA	1:45:A:SER:C	2	3.48	0.37	3.48
(1,335)	1:157:A:THR:N	1:157:A:THR:CA	1:157:A:THR:C	1:158:A:ALA:N	2	3.37	0.26	3.37
(1,8)	1:44:B:LEU:C	1:45:B:SER:N	1:45:B:SER:CA	1:45:B:SER:C	2	3.04	0.53	3.04
(1,89)	1:99:A:LYS:C	1:100:A:LEU:N	1:100:A:LEU:CA	1:100:A:LEU:C	2	2.72	1.58	2.72
(1,151)	1:152:A:TYR:C	1:153:A:GLU:N	1:153:A:GLU:CA	1:153:A:GLU:C	2	2.34	0.39	2.34
(1,243)	1:85:A:GLN:N	1:85:A:GLN:CA	1:85:A:GLN:C	1:86:A:ALA:N	2	2.3	1.06	2.3
(1,119)	1:119:A:SER:C	1:120:A:PRO:N	1:120:A:PRO:CA	1:120:A:PRO:C	2	1.98	0.73	1.98
(1,244)	1:85:B:GLN:N	1:85:B:GLN:CA	1:85:B:GLN:C	1:86:B:ALA:N	2	1.9	0.57	1.9
(1,295)	1:118:A:LEU:N	1:118:A:LEU:CA	1:118:A:LEU:C	1:119:A:SER:N	2	1.85	0.57	1.85
(1,50)	1:74:B:ILE:C	1:75:B:ILE:N	1:75:B:ILE:CA	1:75:B:ILE:C	2	1.69	0.35	1.69
(1,19)	1:57:A:THR:C	1:58:A:TYR:N	1:58:A:TYR:CA	1:58:A:TYR:C	2	1.38	0.14	1.38
(1,90)	1:99:B:LYS:C	1:100:B:LEU:N	1:100:B:LEU:CA	1:100:B:LEU:C	2	1.23	0.16	1.23

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

10.5 All violated dihedral-angle restraints

10.5.1 Histogram : Distribution of violations

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



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

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

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,302)	1:125:B:VAL:N	1:125:B:VAL:CA	1:125:B:VAL:C	1:126:B:PRO:N	6	112.42
(1,301)	1:125:A:VAL:N	1:125:A:VAL:CA	1:125:A:VAL:C	1:126:A:PRO:N	6	112.26
(1,302)	1:125:B:VAL:N	1:125:B:VAL:CA	1:125:B:VAL:C	1:126:B:PRO:N	10	110.29
(1,301)	1:125:A:VAL:N	1:125:A:VAL:CA	1:125:A:VAL:C	1:126:A:PRO:N	10	110.06
(1,301)	1:125:A:VAL:N	1:125:A:VAL:CA	1:125:A:VAL:C	1:126:A:PRO:N	5	108.84
(1,302)	1:125:B:VAL:N	1:125:B:VAL:CA	1:125:B:VAL:C	1:126:B:PRO:N	5	108.82
(1,302)	1:125:B:VAL:N	1:125:B:VAL:CA	1:125:B:VAL:C	1:126:B:PRO:N	9	107.77
(1,301)	1:125:A:VAL:N	1:125:A:VAL:CA	1:125:A:VAL:C	1:126:A:PRO:N	9	107.53
(1,302)	1:125:B:VAL:N	1:125:B:VAL:CA	1:125:B:VAL:C	1:126:B:PRO:N	8	107.28
(1,302)	1:125:B:VAL:N	1:125:B:VAL:CA	1:125:B:VAL:C	1:126:B:PRO:N	2	107.18
(1,301)	1:125:A:VAL:N	1:125:A:VAL:CA	1:125:A:VAL:C	1:126:A:PRO:N	2	106.89
(1,302)	1:125:B:VAL:N	1:125:B:VAL:CA	1:125:B:VAL:C	1:126:B:PRO:N	1	106.8
(1,301)	1:125:A:VAL:N	1:125:A:VAL:CA	1:125:A:VAL:C	1:126:A:PRO:N	1	106.8
(1,301)	1:125:A:VAL:N	1:125:A:VAL:CA	1:125:A:VAL:C	1:126:A:PRO:N	8	106.49
(1,302)	1:125:B:VAL:N	1:125:B:VAL:CA	1:125:B:VAL:C	1:126:B:PRO:N	4	106.26
(1,301)	1:125:A:VAL:N	1:125:A:VAL:CA	1:125:A:VAL:C	1:126:A:PRO:N	4	106.03
(1,301)	1:125:A:VAL:N	1:125:A:VAL:CA	1:125:A:VAL:C	1:126:A:PRO:N	3	102.96
(1,302)	1:125:B:VAL:N	1:125:B:VAL:CA	1:125:B:VAL:C	1:126:B:PRO:N	7	102.91
(1,301)	1:125:A:VAL:N	1:125:A:VAL:CA	1:125:A:VAL:C	1:126:A:PRO:N	7	102.89
(1,302)	1:125:B:VAL:N	1:125:B:VAL:CA	1:125:B:VAL:C	1:126:B:PRO:N	3	102.65
(1,189)	1:46:A:ARG:N	1:46:A:ARG:CA	1:46:A:ARG:C	1:47:A:GLY:N	6	84.38

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,190)	1:46:B:ARG:N	1:46:B:ARG:CA	1:46:B:ARG:C	1:47:B:GLY:N	9	83.73
(1,189)	1:46:A:ARG:N	1:46:A:ARG:CA	1:46:A:ARG:C	1:47:A:GLY:N	7	73.86
(1,190)	1:46:B:ARG:N	1:46:B:ARG:CA	1:46:B:ARG:C	1:47:B:GLY:N	1	73.42
(1,190)	1:46:B:ARG:N	1:46:B:ARG:CA	1:46:B:ARG:C	1:47:B:GLY:N	7	66.46
(1,189)	1:46:A:ARG:N	1:46:A:ARG:CA	1:46:A:ARG:C	1:47:A:GLY:N	9	65.66
(1,190)	1:46:B:ARG:N	1:46:B:ARG:CA	1:46:B:ARG:C	1:47:B:GLY:N	6	65.29
(1,189)	1:46:A:ARG:N	1:46:A:ARG:CA	1:46:A:ARG:C	1:47:A:GLY:N	5	63.87
(1,189)	1:46:A:ARG:N	1:46:A:ARG:CA	1:46:A:ARG:C	1:47:A:GLY:N	10	62.02
(1,189)	1:46:A:ARG:N	1:46:A:ARG:CA	1:46:A:ARG:C	1:47:A:GLY:N	4	61.1
(1,189)	1:46:A:ARG:N	1:46:A:ARG:CA	1:46:A:ARG:C	1:47:A:GLY:N	3	61.06
(1,190)	1:46:B:ARG:N	1:46:B:ARG:CA	1:46:B:ARG:C	1:47:B:GLY:N	3	59.86
(1,297)	1:120:A:PRO:N	1:120:A:PRO:CA	1:120:A:PRO:C	1:121:A:ASP:N	9	54.55
(1,298)	1:120:B:PRO:N	1:120:B:PRO:CA	1:120:B:PRO:C	1:121:B:ASP:N	9	54.28
(1,190)	1:46:B:ARG:N	1:46:B:ARG:CA	1:46:B:ARG:C	1:47:B:GLY:N	5	53.64
(1,297)	1:120:A:PRO:N	1:120:A:PRO:CA	1:120:A:PRO:C	1:121:A:ASP:N	6	53.32
(1,298)	1:120:B:PRO:N	1:120:B:PRO:CA	1:120:B:PRO:C	1:121:B:ASP:N	6	52.87
(1,297)	1:120:A:PRO:N	1:120:A:PRO:CA	1:120:A:PRO:C	1:121:A:ASP:N	4	52.49
(1,298)	1:120:B:PRO:N	1:120:B:PRO:CA	1:120:B:PRO:C	1:121:B:ASP:N	4	52.25
(1,297)	1:120:A:PRO:N	1:120:A:PRO:CA	1:120:A:PRO:C	1:121:A:ASP:N	10	51.43
(1,297)	1:120:A:PRO:N	1:120:A:PRO:CA	1:120:A:PRO:C	1:121:A:ASP:N	5	51.36
(1,298)	1:120:B:PRO:N	1:120:B:PRO:CA	1:120:B:PRO:C	1:121:B:ASP:N	2	51.27
(1,14)	1:49:B:GLY:C	1:50:B:ASP:N	1:50:B:ASP:CA	1:50:B:ASP:C	8	51.25
(1,298)	1:120:B:PRO:N	1:120:B:PRO:CA	1:120:B:PRO:C	1:121:B:ASP:N	10	51.23
(1,297)	1:120:A:PRO:N	1:120:A:PRO:CA	1:120:A:PRO:C	1:121:A:ASP:N	2	51.21
(1,298)	1:120:B:PRO:N	1:120:B:PRO:CA	1:120:B:PRO:C	1:121:B:ASP:N	1	51.08
(1,298)	1:120:B:PRO:N	1:120:B:PRO:CA	1:120:B:PRO:C	1:121:B:ASP:N	5	50.84
(1,298)	1:120:B:PRO:N	1:120:B:PRO:CA	1:120:B:PRO:C	1:121:B:ASP:N	8	50.67
(1,298)	1:120:B:PRO:N	1:120:B:PRO:CA	1:120:B:PRO:C	1:121:B:ASP:N	7	50.54
(1,297)	1:120:A:PRO:N	1:120:A:PRO:CA	1:120:A:PRO:C	1:121:A:ASP:N	1	50.28
(1,326)	1:152:B:TYR:N	1:152:B:TYR:CA	1:152:B:TYR:C	1:153:B:GLU:N	9	50.04
(1,325)	1:152:A:TYR:N	1:152:A:TYR:CA	1:152:A:TYR:C	1:153:A:GLU:N	9	49.28
(1,326)	1:152:B:TYR:N	1:152:B:TYR:CA	1:152:B:TYR:C	1:153:B:GLU:N	6	49.21
(1,325)	1:152:A:TYR:N	1:152:A:TYR:CA	1:152:A:TYR:C	1:153:A:GLU:N	6	48.94
(1,325)	1:152:A:TYR:N	1:152:A:TYR:CA	1:152:A:TYR:C	1:153:A:GLU:N	10	48.09
(1,298)	1:120:B:PRO:N	1:120:B:PRO:CA	1:120:B:PRO:C	1:121:B:ASP:N	3	48.08
(1,326)	1:152:B:TYR:N	1:152:B:TYR:CA	1:152:B:TYR:C	1:153:B:GLU:N	10	47.93
(1,297)	1:120:A:PRO:N	1:120:A:PRO:CA	1:120:A:PRO:C	1:121:A:ASP:N	8	47.91
(1,326)	1:152:B:TYR:N	1:152:B:TYR:CA	1:152:B:TYR:C	1:153:B:GLU:N	4	47.51
(1,325)	1:152:A:TYR:N	1:152:A:TYR:CA	1:152:A:TYR:C	1:153:A:GLU:N	4	47.45
(1,297)	1:120:A:PRO:N	1:120:A:PRO:CA	1:120:A:PRO:C	1:121:A:ASP:N	3	47.33
(1,325)	1:152:A:TYR:N	1:152:A:TYR:CA	1:152:A:TYR:C	1:153:A:GLU:N	2	47.27
(1,326)	1:152:B:TYR:N	1:152:B:TYR:CA	1:152:B:TYR:C	1:153:B:GLU:N	2	46.96
(1,297)	1:120:A:PRO:N	1:120:A:PRO:CA	1:120:A:PRO:C	1:121:A:ASP:N	7	46.87
(1,326)	1:152:B:TYR:N	1:152:B:TYR:CA	1:152:B:TYR:C	1:153:B:GLU:N	1	46.83
(1,326)	1:152:B:TYR:N	1:152:B:TYR:CA	1:152:B:TYR:C	1:153:B:GLU:N	8	46.78
(1,325)	1:152:A:TYR:N	1:152:A:TYR:CA	1:152:A:TYR:C	1:153:A:GLU:N	8	46.47
(1,326)	1:152:B:TYR:N	1:152:B:TYR:CA	1:152:B:TYR:C	1:153:B:GLU:N	5	46.13
(1,325)	1:152:A:TYR:N	1:152:A:TYR:CA	1:152:A:TYR:C	1:153:A:GLU:N	1	45.94
(1,325)	1:152:A:TYR:N	1:152:A:TYR:CA	1:152:A:TYR:C	1:153:A:GLU:N	5	45.26
(1,190)	1:46:B:ARG:N	1:46:B:ARG:CA	1:46:B:ARG:C	1:47:B:GLY:N	4	44.54
(1,326)	1:152:B:TYR:N	1:152:B:TYR:CA	1:152:B:TYR:C	1:153:B:GLU:N	3	44.19

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,325)	1:152:A:TYR:N	1:152:A:TYR:CA	1:152:A:TYR:C	1:153:A:GLU:N	3	43.65
(1,326)	1:152:B:TYR:N	1:152:B:TYR:CA	1:152:B:TYR:C	1:153:B:GLU:N	7	43.49
(1,325)	1:152:A:TYR:N	1:152:A:TYR:CA	1:152:A:TYR:C	1:153:A:GLU:N	7	42.23
(1,183)	1:43:A:THR:N	1:43:A:THR:CA	1:43:A:THR:C	1:44:A:LEU:N	9	41.8
(1,184)	1:43:B:THR:N	1:43:B:THR:CA	1:43:B:THR:C	1:44:B:LEU:N	2	41.26
(1,184)	1:43:B:THR:N	1:43:B:THR:CA	1:43:B:THR:C	1:44:B:LEU:N	4	40.79
(1,184)	1:43:B:THR:N	1:43:B:THR:CA	1:43:B:THR:C	1:44:B:LEU:N	6	40.37
(1,184)	1:43:B:THR:N	1:43:B:THR:CA	1:43:B:THR:C	1:44:B:LEU:N	5	40.33
(1,183)	1:43:A:THR:N	1:43:A:THR:CA	1:43:A:THR:C	1:44:A:LEU:N	6	40.31
(1,183)	1:43:A:THR:N	1:43:A:THR:CA	1:43:A:THR:C	1:44:A:LEU:N	10	40.24
(1,184)	1:43:B:THR:N	1:43:B:THR:CA	1:43:B:THR:C	1:44:B:LEU:N	10	40.06
(1,183)	1:43:A:THR:N	1:43:A:THR:CA	1:43:A:THR:C	1:44:A:LEU:N	4	39.45
(1,184)	1:43:B:THR:N	1:43:B:THR:CA	1:43:B:THR:C	1:44:B:LEU:N	9	38.94
(1,183)	1:43:A:THR:N	1:43:A:THR:CA	1:43:A:THR:C	1:44:A:LEU:N	2	38.61
(1,190)	1:46:B:ARG:N	1:46:B:ARG:CA	1:46:B:ARG:C	1:47:B:GLY:N	2	37.98
(1,183)	1:43:A:THR:N	1:43:A:THR:CA	1:43:A:THR:C	1:44:A:LEU:N	8	37.91
(1,184)	1:43:B:THR:N	1:43:B:THR:CA	1:43:B:THR:C	1:44:B:LEU:N	1	37.35
(1,184)	1:43:B:THR:N	1:43:B:THR:CA	1:43:B:THR:C	1:44:B:LEU:N	7	36.83
(1,183)	1:43:A:THR:N	1:43:A:THR:CA	1:43:A:THR:C	1:44:A:LEU:N	1	36.72
(1,181)	1:42:A:GLN:N	1:42:A:GLN:CA	1:42:A:GLN:C	1:43:A:THR:N	1	36.64
(1,184)	1:43:B:THR:N	1:43:B:THR:CA	1:43:B:THR:C	1:44:B:LEU:N	8	36.51
(1,184)	1:43:B:THR:N	1:43:B:THR:CA	1:43:B:THR:C	1:44:B:LEU:N	3	36.18
(1,183)	1:43:A:THR:N	1:43:A:THR:CA	1:43:A:THR:C	1:44:A:LEU:N	7	34.46
(1,149)	1:151:A:ALA:C	1:152:A:TYR:N	1:152:A:TYR:CA	1:152:A:TYR:C	8	33.36
(1,149)	1:151:A:ALA:C	1:152:A:TYR:N	1:152:A:TYR:CA	1:152:A:TYR:C	1	33.3
(1,183)	1:43:A:THR:N	1:43:A:THR:CA	1:43:A:THR:C	1:44:A:LEU:N	5	33.28
(1,149)	1:151:A:ALA:C	1:152:A:TYR:N	1:152:A:TYR:CA	1:152:A:TYR:C	9	33.24
(1,183)	1:43:A:THR:N	1:43:A:THR:CA	1:43:A:THR:C	1:44:A:LEU:N	3	33.07
(1,12)	1:47:B:GLY:C	1:48:B:TRP:N	1:48:B:TRP:CA	1:48:B:TRP:C	2	32.51
(1,149)	1:151:A:ALA:C	1:152:A:TYR:N	1:152:A:TYR:CA	1:152:A:TYR:C	2	31.92
(1,12)	1:47:B:GLY:C	1:48:B:TRP:N	1:48:B:TRP:CA	1:48:B:TRP:C	3	31.62
(1,13)	1:49:A:GLY:C	1:50:A:ASP:N	1:50:A:ASP:CA	1:50:A:ASP:C	8	31.3
(1,150)	1:151:B:ALA:C	1:152:B:TYR:N	1:152:B:TYR:CA	1:152:B:TYR:C	2	31.16
(1,149)	1:151:A:ALA:C	1:152:A:TYR:N	1:152:A:TYR:CA	1:152:A:TYR:C	6	31.06
(1,150)	1:151:B:ALA:C	1:152:B:TYR:N	1:152:B:TYR:CA	1:152:B:TYR:C	9	30.98
(1,150)	1:151:B:ALA:C	1:152:B:TYR:N	1:152:B:TYR:CA	1:152:B:TYR:C	6	30.87
(1,150)	1:151:B:ALA:C	1:152:B:TYR:N	1:152:B:TYR:CA	1:152:B:TYR:C	10	30.39
(1,150)	1:151:B:ALA:C	1:152:B:TYR:N	1:152:B:TYR:CA	1:152:B:TYR:C	5	30.17
(1,149)	1:151:A:ALA:C	1:152:A:TYR:N	1:152:A:TYR:CA	1:152:A:TYR:C	7	30.06
(1,149)	1:151:A:ALA:C	1:152:A:TYR:N	1:152:A:TYR:CA	1:152:A:TYR:C	10	29.94
(1,150)	1:151:B:ALA:C	1:152:B:TYR:N	1:152:B:TYR:CA	1:152:B:TYR:C	1	29.93
(1,150)	1:151:B:ALA:C	1:152:B:TYR:N	1:152:B:TYR:CA	1:152:B:TYR:C	8	29.31
(1,149)	1:151:A:ALA:C	1:152:A:TYR:N	1:152:A:TYR:CA	1:152:A:TYR:C	4	29.26
(1,12)	1:47:B:GLY:C	1:48:B:TRP:N	1:48:B:TRP:CA	1:48:B:TRP:C	5	29.18
(1,150)	1:151:B:ALA:C	1:152:B:TYR:N	1:152:B:TYR:CA	1:152:B:TYR:C	4	29.12
(1,182)	1:42:B:GLN:N	1:42:B:GLN:CA	1:42:B:GLN:C	1:43:B:THR:N	10	28.82
(1,182)	1:42:B:GLN:N	1:42:B:GLN:CA	1:42:B:GLN:C	1:43:B:THR:N	8	28.47
(1,149)	1:151:A:ALA:C	1:152:A:TYR:N	1:152:A:TYR:CA	1:152:A:TYR:C	5	28.44
(1,150)	1:151:B:ALA:C	1:152:B:TYR:N	1:152:B:TYR:CA	1:152:B:TYR:C	3	27.94
(1,13)	1:49:A:GLY:C	1:50:A:ASP:N	1:50:A:ASP:CA	1:50:A:ASP:C	7	27.77
(1,181)	1:42:A:GLN:N	1:42:A:GLN:CA	1:42:A:GLN:C	1:43:A:THR:N	10	27.59

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,150)	1:151:B:ALA:C	1:152:B:TYR:N	1:152:B:TYR:CA	1:152:B:TYR:C	7	27.41
(1,149)	1:151:A:ALA:C	1:152:A:TYR:N	1:152:A:TYR:CA	1:152:A:TYR:C	3	27.21
(1,182)	1:42:B:GLN:N	1:42:B:GLN:CA	1:42:B:GLN:C	1:43:B:THR:N	4	26.95
(1,182)	1:42:B:GLN:N	1:42:B:GLN:CA	1:42:B:GLN:C	1:43:B:THR:N	5	26.92
(1,115)	1:116:A:LYS:C	1:117:A:HIS:N	1:117:A:HIS:CA	1:117:A:HIS:C	8	26.28
(1,21)	1:58:A:TYR:C	1:59:A:GLU:N	1:59:A:GLU:CA	1:59:A:GLU:C	3	25.76
(1,185)	1:44:A:LEU:N	1:44:A:LEU:CA	1:44:A:LEU:C	1:45:A:SER:N	3	25.68
(1,116)	1:116:B:LYS:C	1:117:B:HIS:N	1:117:B:HIS:CA	1:117:B:HIS:C	10	25.68
(1,13)	1:49:A:GLY:C	1:50:A:ASP:N	1:50:A:ASP:CA	1:50:A:ASP:C	9	25.33
(1,181)	1:42:A:GLN:N	1:42:A:GLN:CA	1:42:A:GLN:C	1:43:A:THR:N	2	25.3
(1,283)	1:109:A:LEU:N	1:109:A:LEU:CA	1:109:A:LEU:C	1:110:A:VAL:N	6	25.26
(1,156)	1:154:B:PRO:C	1:155:B:ALA:N	1:155:B:ALA:CA	1:155:B:ALA:C	6	24.57
(1,24)	1:59:B:GLU:C	1:60:B:GLU:N	1:60:B:GLU:CA	1:60:B:GLU:C	10	24.46
(1,115)	1:116:A:LYS:C	1:117:A:HIS:N	1:117:A:HIS:CA	1:117:A:HIS:C	6	24.35
(1,116)	1:116:B:LYS:C	1:117:B:HIS:N	1:117:B:HIS:CA	1:117:B:HIS:C	6	24.25
(1,23)	1:59:A:GLU:C	1:60:A:GLU:N	1:60:A:GLU:CA	1:60:A:GLU:C	10	23.96
(1,156)	1:154:B:PRO:C	1:155:B:ALA:N	1:155:B:ALA:CA	1:155:B:ALA:C	10	23.92
(1,23)	1:59:A:GLU:C	1:60:A:GLU:N	1:60:A:GLU:CA	1:60:A:GLU:C	3	23.83
(1,156)	1:154:B:PRO:C	1:155:B:ALA:N	1:155:B:ALA:CA	1:155:B:ALA:C	2	23.79
(1,22)	1:58:B:TYR:C	1:59:B:GLU:N	1:59:B:GLU:CA	1:59:B:GLU:C	2	23.78
(1,155)	1:154:A:PRO:C	1:155:A:ALA:N	1:155:A:ALA:CA	1:155:A:ALA:C	2	23.7
(1,21)	1:58:A:TYR:C	1:59:A:GLU:N	1:59:A:GLU:CA	1:59:A:GLU:C	7	23.69
(1,23)	1:59:A:GLU:C	1:60:A:GLU:N	1:60:A:GLU:CA	1:60:A:GLU:C	7	23.66
(1,182)	1:42:B:GLN:N	1:42:B:GLN:CA	1:42:B:GLN:C	1:43:B:THR:N	1	23.48
(1,249)	1:89:A:LYS:N	1:89:A:LYS:CA	1:89:A:LYS:C	1:90:A:VAL:N	3	23.35
(1,181)	1:42:A:GLN:N	1:42:A:GLN:CA	1:42:A:GLN:C	1:43:A:THR:N	8	23.35
(1,160)	1:157:B:THR:C	1:158:B:ALA:N	1:158:B:ALA:CA	1:158:B:ALA:C	3	23.23
(1,156)	1:154:B:PRO:C	1:155:B:ALA:N	1:155:B:ALA:CA	1:155:B:ALA:C	8	23.22
(1,155)	1:154:A:PRO:C	1:155:A:ALA:N	1:155:A:ALA:CA	1:155:A:ALA:C	4	23.11
(1,21)	1:58:A:TYR:C	1:59:A:GLU:N	1:59:A:GLU:CA	1:59:A:GLU:C	1	23.11
(1,146)	1:146:B:SER:C	1:147:B:ASN:N	1:147:B:ASN:CA	1:147:B:ASN:C	6	23.08
(1,182)	1:42:B:GLN:N	1:42:B:GLN:CA	1:42:B:GLN:C	1:43:B:THR:N	2	23.03
(1,238)	1:80:B:GLU:N	1:80:B:GLU:CA	1:80:B:GLU:C	1:81:B:CYS:N	3	23.0
(1,115)	1:116:A:LYS:C	1:117:A:HIS:N	1:117:A:HIS:CA	1:117:A:HIS:C	9	22.93
(1,155)	1:154:A:PRO:C	1:155:A:ALA:N	1:155:A:ALA:CA	1:155:A:ALA:C	8	22.79
(1,284)	1:109:B:LEU:N	1:109:B:LEU:CA	1:109:B:LEU:C	1:110:B:VAL:N	2	22.77
(1,155)	1:154:A:PRO:C	1:155:A:ALA:N	1:155:A:ALA:CA	1:155:A:ALA:C	5	22.75
(1,194)	1:50:B:ASP:N	1:50:B:ASP:CA	1:50:B:ASP:C	1:51:B:GLN:N	3	22.74
(1,155)	1:154:A:PRO:C	1:155:A:ALA:N	1:155:A:ALA:CA	1:155:A:ALA:C	1	22.69
(1,116)	1:116:B:LYS:C	1:117:B:HIS:N	1:117:B:HIS:CA	1:117:B:HIS:C	2	22.67
(1,23)	1:59:A:GLU:C	1:60:A:GLU:N	1:60:A:GLU:CA	1:60:A:GLU:C	4	22.66
(1,181)	1:42:A:GLN:N	1:42:A:GLN:CA	1:42:A:GLN:C	1:43:A:THR:N	3	22.65
(1,22)	1:58:B:TYR:C	1:59:B:GLU:N	1:59:B:GLU:CA	1:59:B:GLU:C	4	22.64
(1,156)	1:154:B:PRO:C	1:155:B:ALA:N	1:155:B:ALA:CA	1:155:B:ALA:C	5	22.62
(1,284)	1:109:B:LEU:N	1:109:B:LEU:CA	1:109:B:LEU:C	1:110:B:VAL:N	9	22.6
(1,156)	1:154:B:PRO:C	1:155:B:ALA:N	1:155:B:ALA:CA	1:155:B:ALA:C	1	22.6
(1,284)	1:109:B:LEU:N	1:109:B:LEU:CA	1:109:B:LEU:C	1:110:B:VAL:N	10	22.5
(1,14)	1:49:B:GLY:C	1:50:B:ASP:N	1:50:B:ASP:CA	1:50:B:ASP:C	4	22.44
(1,283)	1:109:A:LEU:N	1:109:A:LEU:CA	1:109:A:LEU:C	1:110:A:VAL:N	4	22.41
(1,24)	1:59:B:GLU:C	1:60:B:GLU:N	1:60:B:GLU:CA	1:60:B:GLU:C	8	22.32
(1,23)	1:59:A:GLU:C	1:60:A:GLU:N	1:60:A:GLU:CA	1:60:A:GLU:C	1	22.23

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,250)	1:89:B:LYS:N	1:89:B:LYS:CA	1:89:B:LYS:C	1:90:B:VAL:N	3	22.21
(1,284)	1:109:B:LEU:N	1:109:B:LEU:CA	1:109:B:LEU:C	1:110:B:VAL:N	5	22.12
(1,291)	1:116:A:LYS:N	1:116:A:LYS:CA	1:116:A:LYS:C	1:117:A:HIS:N	8	21.98
(1,283)	1:109:A:LEU:N	1:109:A:LEU:CA	1:109:A:LEU:C	1:110:A:VAL:N	2	21.91
(1,21)	1:58:A:TYR:C	1:59:A:GLU:N	1:59:A:GLU:CA	1:59:A:GLU:C	9	21.88
(1,283)	1:109:A:LEU:N	1:109:A:LEU:CA	1:109:A:LEU:C	1:110:A:VAL:N	8	21.85
(1,237)	1:80:A:GLU:N	1:80:A:GLU:CA	1:80:A:GLU:C	1:81:A:CYS:N	3	21.85
(1,116)	1:116:B:LYS:C	1:117:B:HIS:N	1:117:B:HIS:CA	1:117:B:HIS:C	4	21.81
(1,21)	1:58:A:TYR:C	1:59:A:GLU:N	1:59:A:GLU:CA	1:59:A:GLU:C	4	21.72
(1,22)	1:58:B:TYR:C	1:59:B:GLU:N	1:59:B:GLU:CA	1:59:B:GLU:C	5	21.69
(1,115)	1:116:A:LYS:C	1:117:A:HIS:N	1:117:A:HIS:CA	1:117:A:HIS:C	2	21.68
(1,155)	1:154:A:PRO:C	1:155:A:ALA:N	1:155:A:ALA:CA	1:155:A:ALA:C	3	21.67
(1,23)	1:59:A:GLU:C	1:60:A:GLU:N	1:60:A:GLU:CA	1:60:A:GLU:C	9	21.67
(1,292)	1:116:B:LYS:N	1:116:B:LYS:CA	1:116:B:LYS:C	1:117:B:HIS:N	6	21.49
(1,24)	1:59:B:GLU:C	1:60:B:GLU:N	1:60:B:GLU:CA	1:60:B:GLU:C	9	21.48
(1,155)	1:154:A:PRO:C	1:155:A:ALA:N	1:155:A:ALA:CA	1:155:A:ALA:C	9	21.45
(1,283)	1:109:A:LEU:N	1:109:A:LEU:CA	1:109:A:LEU:C	1:110:A:VAL:N	1	21.43
(1,24)	1:59:B:GLU:C	1:60:B:GLU:N	1:60:B:GLU:CA	1:60:B:GLU:C	7	21.42
(1,313)	1:137:A:VAL:N	1:137:A:VAL:CA	1:137:A:VAL:C	1:138:A:ARG:N	9	21.41
(1,115)	1:116:A:LYS:C	1:117:A:HIS:N	1:117:A:HIS:CA	1:117:A:HIS:C	1	21.41
(1,23)	1:59:A:GLU:C	1:60:A:GLU:N	1:60:A:GLU:CA	1:60:A:GLU:C	2	21.41
(1,23)	1:59:A:GLU:C	1:60:A:GLU:N	1:60:A:GLU:CA	1:60:A:GLU:C	8	21.35
(1,283)	1:109:A:LEU:N	1:109:A:LEU:CA	1:109:A:LEU:C	1:110:A:VAL:N	9	21.34
(1,24)	1:59:B:GLU:C	1:60:B:GLU:N	1:60:B:GLU:CA	1:60:B:GLU:C	6	21.33
(1,24)	1:59:B:GLU:C	1:60:B:GLU:N	1:60:B:GLU:CA	1:60:B:GLU:C	4	21.3
(1,111)	1:114:A:THR:C	1:115:A:ASP:N	1:115:A:ASP:CA	1:115:A:ASP:C	5	21.29
(1,313)	1:137:A:VAL:N	1:137:A:VAL:CA	1:137:A:VAL:C	1:138:A:ARG:N	2	21.21
(1,155)	1:154:A:PRO:C	1:155:A:ALA:N	1:155:A:ALA:CA	1:155:A:ALA:C	7	21.21
(1,24)	1:59:B:GLU:C	1:60:B:GLU:N	1:60:B:GLU:CA	1:60:B:GLU:C	1	21.21
(1,155)	1:154:A:PRO:C	1:155:A:ALA:N	1:155:A:ALA:CA	1:155:A:ALA:C	6	21.19
(1,156)	1:154:B:PRO:C	1:155:B:ALA:N	1:155:B:ALA:CA	1:155:B:ALA:C	9	21.17
(1,292)	1:116:B:LYS:N	1:116:B:LYS:CA	1:116:B:LYS:C	1:117:B:HIS:N	10	21.16
(1,246)	1:86:B:ALA:N	1:86:B:ALA:CA	1:86:B:ALA:C	1:87:B:LEU:N	3	21.14
(1,284)	1:109:B:LEU:N	1:109:B:LEU:CA	1:109:B:LEU:C	1:110:B:VAL:N	7	21.11
(1,283)	1:109:A:LEU:N	1:109:A:LEU:CA	1:109:A:LEU:C	1:110:A:VAL:N	10	21.1
(1,186)	1:44:B:LEU:N	1:44:B:LEU:CA	1:44:B:LEU:C	1:45:B:SER:N	10	21.09
(1,115)	1:116:A:LYS:C	1:117:A:HIS:N	1:117:A:HIS:CA	1:117:A:HIS:C	10	21.09
(1,112)	1:114:B:THR:C	1:115:B:ASP:N	1:115:B:ASP:CA	1:115:B:ASP:C	9	20.99
(1,314)	1:137:B:VAL:N	1:137:B:VAL:CA	1:137:B:VAL:C	1:138:B:ARG:N	10	20.98
(1,23)	1:59:A:GLU:C	1:60:A:GLU:N	1:60:A:GLU:CA	1:60:A:GLU:C	6	20.96
(1,283)	1:109:A:LEU:N	1:109:A:LEU:CA	1:109:A:LEU:C	1:110:A:VAL:N	7	20.92
(1,24)	1:59:B:GLU:C	1:60:B:GLU:N	1:60:B:GLU:CA	1:60:B:GLU:C	2	20.84
(1,284)	1:109:B:LEU:N	1:109:B:LEU:CA	1:109:B:LEU:C	1:110:B:VAL:N	4	20.83
(1,22)	1:58:B:TYR:C	1:59:B:GLU:N	1:59:B:GLU:CA	1:59:B:GLU:C	6	20.83
(1,24)	1:59:B:GLU:C	1:60:B:GLU:N	1:60:B:GLU:CA	1:60:B:GLU:C	5	20.8
(1,314)	1:137:B:VAL:N	1:137:B:VAL:CA	1:137:B:VAL:C	1:138:B:ARG:N	8	20.77
(1,13)	1:49:A:GLY:C	1:50:A:ASP:N	1:50:A:ASP:CA	1:50:A:ASP:C	1	20.77
(1,156)	1:154:B:PRO:C	1:155:B:ALA:N	1:155:B:ALA:CA	1:155:B:ALA:C	7	20.76
(1,284)	1:109:B:LEU:N	1:109:B:LEU:CA	1:109:B:LEU:C	1:110:B:VAL:N	1	20.7
(1,22)	1:58:B:TYR:C	1:59:B:GLU:N	1:59:B:GLU:CA	1:59:B:GLU:C	8	20.69
(1,291)	1:116:A:LYS:N	1:116:A:LYS:CA	1:116:A:LYS:C	1:117:A:HIS:N	6	20.66

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,250)	1:89:B:LYS:N	1:89:B:LYS:CA	1:89:B:LYS:C	1:90:B:VAL:N	6	20.64
(1,155)	1:154:A:PRO:C	1:155:A:ALA:N	1:155:A:ALA:CA	1:155:A:ALA:C	10	20.62
(1,313)	1:137:A:VAL:N	1:137:A:VAL:CA	1:137:A:VAL:C	1:138:A:ARG:N	6	20.6
(1,21)	1:58:A:TYR:C	1:59:A:GLU:N	1:59:A:GLU:CA	1:59:A:GLU:C	6	20.48
(1,21)	1:58:A:TYR:C	1:59:A:GLU:N	1:59:A:GLU:CA	1:59:A:GLU:C	2	20.43
(1,313)	1:137:A:VAL:N	1:137:A:VAL:CA	1:137:A:VAL:C	1:138:A:ARG:N	4	20.4
(1,21)	1:58:A:TYR:C	1:59:A:GLU:N	1:59:A:GLU:CA	1:59:A:GLU:C	5	20.37
(1,314)	1:137:B:VAL:N	1:137:B:VAL:CA	1:137:B:VAL:C	1:138:B:ARG:N	9	20.34
(1,245)	1:86:A:ALA:N	1:86:A:ALA:CA	1:86:A:ALA:C	1:87:A:LEU:N	3	20.33
(1,283)	1:109:A:LEU:N	1:109:A:LEU:CA	1:109:A:LEU:C	1:110:A:VAL:N	3	20.31
(1,284)	1:109:B:LEU:N	1:109:B:LEU:CA	1:109:B:LEU:C	1:110:B:VAL:N	6	20.26
(1,199)	1:58:A:TYR:N	1:58:A:TYR:CA	1:58:A:TYR:C	1:59:A:GLU:N	3	20.25
(1,283)	1:109:A:LEU:N	1:109:A:LEU:CA	1:109:A:LEU:C	1:110:A:VAL:N	5	20.18
(1,115)	1:116:A:LYS:C	1:117:A:HIS:N	1:117:A:HIS:CA	1:117:A:HIS:C	7	20.18
(1,115)	1:116:A:LYS:C	1:117:A:HIS:N	1:117:A:HIS:CA	1:117:A:HIS:C	5	20.15
(1,23)	1:59:A:GLU:C	1:60:A:GLU:N	1:60:A:GLU:CA	1:60:A:GLU:C	5	20.15
(1,314)	1:137:B:VAL:N	1:137:B:VAL:CA	1:137:B:VAL:C	1:138:B:ARG:N	7	20.12
(1,313)	1:137:A:VAL:N	1:137:A:VAL:CA	1:137:A:VAL:C	1:138:A:ARG:N	7	20.11
(1,145)	1:146:A:SER:C	1:147:A:ASN:N	1:147:A:ASN:CA	1:147:A:ASN:C	6	20.11
(1,195)	1:54:A:TRP:N	1:54:A:TRP:CA	1:54:A:TRP:C	1:55:A:THR:N	8	20.07
(1,292)	1:116:B:LYS:N	1:116:B:LYS:CA	1:116:B:LYS:C	1:117:B:HIS:N	2	20.05
(1,22)	1:58:B:TYR:C	1:59:B:GLU:N	1:59:B:GLU:CA	1:59:B:GLU:C	1	20.01
(1,249)	1:89:A:LYS:N	1:89:A:LYS:CA	1:89:A:LYS:C	1:90:A:VAL:N	6	19.99
(1,112)	1:114:B:THR:C	1:115:B:ASP:N	1:115:B:ASP:CA	1:115:B:ASP:C	2	19.98
(1,313)	1:137:A:VAL:N	1:137:A:VAL:CA	1:137:A:VAL:C	1:138:A:ARG:N	3	19.97
(1,186)	1:44:B:LEU:N	1:44:B:LEU:CA	1:44:B:LEU:C	1:45:B:SER:N	6	19.96
(1,291)	1:116:A:LYS:N	1:116:A:LYS:CA	1:116:A:LYS:C	1:117:A:HIS:N	9	19.94
(1,116)	1:116:B:LYS:C	1:117:B:HIS:N	1:117:B:HIS:CA	1:117:B:HIS:C	9	19.88
(1,115)	1:116:A:LYS:C	1:117:A:HIS:N	1:117:A:HIS:CA	1:117:A:HIS:C	4	19.88
(1,21)	1:58:A:TYR:C	1:59:A:GLU:N	1:59:A:GLU:CA	1:59:A:GLU:C	10	19.84
(1,116)	1:116:B:LYS:C	1:117:B:HIS:N	1:117:B:HIS:CA	1:117:B:HIS:C	1	19.8
(1,116)	1:116:B:LYS:C	1:117:B:HIS:N	1:117:B:HIS:CA	1:117:B:HIS:C	5	19.71
(1,284)	1:109:B:LEU:N	1:109:B:LEU:CA	1:109:B:LEU:C	1:110:B:VAL:N	8	19.7
(1,185)	1:44:A:LEU:N	1:44:A:LEU:CA	1:44:A:LEU:C	1:45:A:SER:N	8	19.65
(1,186)	1:44:B:LEU:N	1:44:B:LEU:CA	1:44:B:LEU:C	1:45:B:SER:N	1	19.62
(1,160)	1:157:B:THR:C	1:158:B:ALA:N	1:158:B:ALA:CA	1:158:B:ALA:C	4	19.62
(1,182)	1:42:B:GLN:N	1:42:B:GLN:CA	1:42:B:GLN:C	1:43:B:THR:N	6	19.56
(1,314)	1:137:B:VAL:N	1:137:B:VAL:CA	1:137:B:VAL:C	1:138:B:ARG:N	5	19.43
(1,88)	1:98:B:GLN:C	1:99:B:LYS:N	1:99:B:LYS:CA	1:99:B:LYS:C	6	19.43
(1,88)	1:98:B:GLN:C	1:99:B:LYS:N	1:99:B:LYS:CA	1:99:B:LYS:C	10	19.38
(1,292)	1:116:B:LYS:N	1:116:B:LYS:CA	1:116:B:LYS:C	1:117:B:HIS:N	9	19.34
(1,130)	1:131:B:VAL:C	1:132:B:ASP:N	1:132:B:ASP:CA	1:132:B:ASP:C	2	19.31
(1,156)	1:154:B:PRO:C	1:155:B:ALA:N	1:155:B:ALA:CA	1:155:B:ALA:C	4	19.13
(1,13)	1:49:A:GLY:C	1:50:A:ASP:N	1:50:A:ASP:CA	1:50:A:ASP:C	6	19.11
(1,250)	1:89:B:LYS:N	1:89:B:LYS:CA	1:89:B:LYS:C	1:90:B:VAL:N	10	19.08
(1,112)	1:114:B:THR:C	1:115:B:ASP:N	1:115:B:ASP:CA	1:115:B:ASP:C	5	19.04
(1,87)	1:98:A:GLN:C	1:99:A:LYS:N	1:99:A:LYS:CA	1:99:A:LYS:C	7	19.04
(1,112)	1:114:B:THR:C	1:115:B:ASP:N	1:115:B:ASP:CA	1:115:B:ASP:C	8	19.01
(1,249)	1:89:A:LYS:N	1:89:A:LYS:CA	1:89:A:LYS:C	1:90:A:VAL:N	10	18.9
(1,88)	1:98:B:GLN:C	1:99:B:LYS:N	1:99:B:LYS:CA	1:99:B:LYS:C	2	18.9
(1,111)	1:114:A:THR:C	1:115:A:ASP:N	1:115:A:ASP:CA	1:115:A:ASP:C	4	18.88

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,249)	1:89:A:LYS:N	1:89:A:LYS:CA	1:89:A:LYS:C	1:90:A:VAL:N	9	18.84
(1,88)	1:98:B:GLN:C	1:99:B:LYS:N	1:99:B:LYS:CA	1:99:B:LYS:C	3	18.82
(1,116)	1:116:B:LYS:C	1:117:B:HIS:N	1:117:B:HIS:CA	1:117:B:HIS:C	7	18.8
(1,291)	1:116:A:LYS:N	1:116:A:LYS:CA	1:116:A:LYS:C	1:117:A:HIS:N	2	18.78
(1,112)	1:114:B:THR:C	1:115:B:ASP:N	1:115:B:ASP:CA	1:115:B:ASP:C	6	18.78
(1,87)	1:98:A:GLN:C	1:99:A:LYS:N	1:99:A:LYS:CA	1:99:A:LYS:C	6	18.71
(1,111)	1:114:A:THR:C	1:115:A:ASP:N	1:115:A:ASP:CA	1:115:A:ASP:C	7	18.7
(1,111)	1:114:A:THR:C	1:115:A:ASP:N	1:115:A:ASP:CA	1:115:A:ASP:C	9	18.7
(1,14)	1:49:B:GLY:C	1:50:B:ASP:N	1:50:B:ASP:CA	1:50:B:ASP:C	1	18.68
(1,130)	1:131:B:VAL:C	1:132:B:ASP:N	1:132:B:ASP:CA	1:132:B:ASP:C	6	18.65
(1,181)	1:42:A:GLN:N	1:42:A:GLN:CA	1:42:A:GLN:C	1:43:A:THR:N	4	18.63
(1,87)	1:98:A:GLN:C	1:99:A:LYS:N	1:99:A:LYS:CA	1:99:A:LYS:C	1	18.61
(1,145)	1:146:A:SER:C	1:147:A:ASN:N	1:147:A:ASN:CA	1:147:A:ASN:C	5	18.58
(1,250)	1:89:B:LYS:N	1:89:B:LYS:CA	1:89:B:LYS:C	1:90:B:VAL:N	1	18.44
(1,250)	1:89:B:LYS:N	1:89:B:LYS:CA	1:89:B:LYS:C	1:90:B:VAL:N	9	18.4
(1,88)	1:98:B:GLN:C	1:99:B:LYS:N	1:99:B:LYS:CA	1:99:B:LYS:C	1	18.37
(1,58)	1:79:B:ASP:C	1:80:B:GLU:N	1:80:B:GLU:CA	1:80:B:GLU:C	3	18.34
(1,24)	1:59:B:GLU:C	1:60:B:GLU:N	1:60:B:GLU:CA	1:60:B:GLU:C	3	18.32
(1,250)	1:89:B:LYS:N	1:89:B:LYS:CA	1:89:B:LYS:C	1:90:B:VAL:N	8	18.28
(1,115)	1:116:A:LYS:C	1:117:A:HIS:N	1:117:A:HIS:CA	1:117:A:HIS:C	3	18.28
(1,22)	1:58:B:TYR:C	1:59:B:GLU:N	1:59:B:GLU:CA	1:59:B:GLU:C	3	18.22
(1,22)	1:58:B:TYR:C	1:59:B:GLU:N	1:59:B:GLU:CA	1:59:B:GLU:C	9	18.22
(1,116)	1:116:B:LYS:C	1:117:B:HIS:N	1:117:B:HIS:CA	1:117:B:HIS:C	8	18.17
(1,249)	1:89:A:LYS:N	1:89:A:LYS:CA	1:89:A:LYS:C	1:90:A:VAL:N	4	18.14
(1,13)	1:49:A:GLY:C	1:50:A:ASP:N	1:50:A:ASP:CA	1:50:A:ASP:C	3	18.09
(1,250)	1:89:B:LYS:N	1:89:B:LYS:CA	1:89:B:LYS:C	1:90:B:VAL:N	2	18.04
(1,57)	1:79:A:ASP:C	1:80:A:GLU:N	1:80:A:GLU:CA	1:80:A:GLU:C	3	17.99
(1,111)	1:114:A:THR:C	1:115:A:ASP:N	1:115:A:ASP:CA	1:115:A:ASP:C	2	17.98
(1,111)	1:114:A:THR:C	1:115:A:ASP:N	1:115:A:ASP:CA	1:115:A:ASP:C	6	17.98
(1,291)	1:116:A:LYS:N	1:116:A:LYS:CA	1:116:A:LYS:C	1:117:A:HIS:N	5	17.92
(1,284)	1:109:B:LEU:N	1:109:B:LEU:CA	1:109:B:LEU:C	1:110:B:VAL:N	3	17.9
(1,249)	1:89:A:LYS:N	1:89:A:LYS:CA	1:89:A:LYS:C	1:90:A:VAL:N	8	17.9
(1,249)	1:89:A:LYS:N	1:89:A:LYS:CA	1:89:A:LYS:C	1:90:A:VAL:N	2	17.85
(1,12)	1:47:B:GLY:C	1:48:B:TRP:N	1:48:B:TRP:CA	1:48:B:TRP:C	10	17.8
(1,181)	1:42:A:GLN:N	1:42:A:GLN:CA	1:42:A:GLN:C	1:43:A:THR:N	5	17.77
(1,87)	1:98:A:GLN:C	1:99:A:LYS:N	1:99:A:LYS:CA	1:99:A:LYS:C	2	17.74
(1,201)	1:59:A:GLU:N	1:59:A:GLU:CA	1:59:A:GLU:C	1:60:A:GLU:N	7	17.73
(1,88)	1:98:B:GLN:C	1:99:B:LYS:N	1:99:B:LYS:CA	1:99:B:LYS:C	9	17.71
(1,88)	1:98:B:GLN:C	1:99:B:LYS:N	1:99:B:LYS:CA	1:99:B:LYS:C	7	17.69
(1,314)	1:137:B:VAL:N	1:137:B:VAL:CA	1:137:B:VAL:C	1:138:B:ARG:N	3	17.63
(1,88)	1:98:B:GLN:C	1:99:B:LYS:N	1:99:B:LYS:CA	1:99:B:LYS:C	5	17.6
(1,249)	1:89:A:LYS:N	1:89:A:LYS:CA	1:89:A:LYS:C	1:90:A:VAL:N	1	17.58
(1,292)	1:116:B:LYS:N	1:116:B:LYS:CA	1:116:B:LYS:C	1:117:B:HIS:N	4	17.54
(1,87)	1:98:A:GLN:C	1:99:A:LYS:N	1:99:A:LYS:CA	1:99:A:LYS:C	10	17.53
(1,250)	1:89:B:LYS:N	1:89:B:LYS:CA	1:89:B:LYS:C	1:90:B:VAL:N	4	17.41
(1,112)	1:114:B:THR:C	1:115:B:ASP:N	1:115:B:ASP:CA	1:115:B:ASP:C	7	17.4
(1,129)	1:131:A:VAL:C	1:132:A:ASP:N	1:132:A:ASP:CA	1:132:A:ASP:C	5	17.39
(1,291)	1:116:A:LYS:N	1:116:A:LYS:CA	1:116:A:LYS:C	1:117:A:HIS:N	1	17.36
(1,291)	1:116:A:LYS:N	1:116:A:LYS:CA	1:116:A:LYS:C	1:117:A:HIS:N	7	17.36
(1,58)	1:79:B:ASP:C	1:80:B:GLU:N	1:80:B:GLU:CA	1:80:B:GLU:C	9	17.35
(1,3)	1:42:A:GLN:C	1:43:A:THR:N	1:43:A:THR:CA	1:43:A:THR:C	1	17.34

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,87)	1:98:A:GLN:C	1:99:A:LYS:N	1:99:A:LYS:CA	1:99:A:LYS:C	9	17.31
(1,249)	1:89:A:LYS:N	1:89:A:LYS:CA	1:89:A:LYS:C	1:90:A:VAL:N	5	17.25
(1,22)	1:58:B:TYR:C	1:59:B:GLU:N	1:59:B:GLU:CA	1:59:B:GLU:C	10	17.19
(1,111)	1:114:A:THR:C	1:115:A:ASP:N	1:115:A:ASP:CA	1:115:A:ASP:C	8	17.16
(1,156)	1:154:B:PRO:C	1:155:B:ALA:N	1:155:B:ALA:CA	1:155:B:ALA:C	3	17.14
(1,57)	1:79:A:ASP:C	1:80:A:GLU:N	1:80:A:GLU:CA	1:80:A:GLU:C	9	17.12
(1,313)	1:137:A:VAL:N	1:137:A:VAL:CA	1:137:A:VAL:C	1:138:A:ARG:N	1	17.0
(1,292)	1:116:B:LYS:N	1:116:B:LYS:CA	1:116:B:LYS:C	1:117:B:HIS:N	5	17.0
(1,314)	1:137:B:VAL:N	1:137:B:VAL:CA	1:137:B:VAL:C	1:138:B:ARG:N	6	16.92
(1,291)	1:116:A:LYS:N	1:116:A:LYS:CA	1:116:A:LYS:C	1:117:A:HIS:N	10	16.87
(1,87)	1:98:A:GLN:C	1:99:A:LYS:N	1:99:A:LYS:CA	1:99:A:LYS:C	5	16.87
(1,202)	1:59:B:GLU:N	1:59:B:GLU:CA	1:59:B:GLU:C	1:60:B:GLU:N	6	16.85
(1,291)	1:116:A:LYS:N	1:116:A:LYS:CA	1:116:A:LYS:C	1:117:A:HIS:N	4	16.82
(1,111)	1:114:A:THR:C	1:115:A:ASP:N	1:115:A:ASP:CA	1:115:A:ASP:C	10	16.81
(1,175)	1:165:A:LYS:C	1:166:A:LYS:N	1:166:A:LYS:CA	1:166:A:LYS:C	3	16.8
(1,175)	1:165:A:LYS:C	1:166:A:LYS:N	1:166:A:LYS:CA	1:166:A:LYS:C	7	16.74
(1,14)	1:49:B:GLY:C	1:50:B:ASP:N	1:50:B:ASP:CA	1:50:B:ASP:C	6	16.74
(1,22)	1:58:B:TYR:C	1:59:B:GLU:N	1:59:B:GLU:CA	1:59:B:GLU:C	7	16.7
(1,21)	1:58:A:TYR:C	1:59:A:GLU:N	1:59:A:GLU:CA	1:59:A:GLU:C	8	16.7
(1,250)	1:89:B:LYS:N	1:89:B:LYS:CA	1:89:B:LYS:C	1:90:B:VAL:N	5	16.61
(1,186)	1:44:B:LEU:N	1:44:B:LEU:CA	1:44:B:LEU:C	1:45:B:SER:N	7	16.61
(1,130)	1:131:B:VAL:C	1:132:B:ASP:N	1:132:B:ASP:CA	1:132:B:ASP:C	4	16.61
(1,130)	1:131:B:VAL:C	1:132:B:ASP:N	1:132:B:ASP:CA	1:132:B:ASP:C	3	16.59
(1,159)	1:157:A:THR:C	1:158:A:ALA:N	1:158:A:ALA:CA	1:158:A:ALA:C	6	16.54
(1,202)	1:59:B:GLU:N	1:59:B:GLU:CA	1:59:B:GLU:C	1:60:B:GLU:N	4	16.52
(1,159)	1:157:A:THR:C	1:158:A:ALA:N	1:158:A:ALA:CA	1:158:A:ALA:C	9	16.52
(1,185)	1:44:A:LEU:N	1:44:A:LEU:CA	1:44:A:LEU:C	1:45:A:SER:N	5	16.45
(1,292)	1:116:B:LYS:N	1:116:B:LYS:CA	1:116:B:LYS:C	1:117:B:HIS:N	8	16.44
(1,176)	1:165:B:LYS:C	1:166:B:LYS:N	1:166:B:LYS:CA	1:166:B:LYS:C	8	16.36
(1,175)	1:165:A:LYS:C	1:166:A:LYS:N	1:166:A:LYS:CA	1:166:A:LYS:C	1	16.33
(1,129)	1:131:A:VAL:C	1:132:A:ASP:N	1:132:A:ASP:CA	1:132:A:ASP:C	10	16.31
(1,249)	1:89:A:LYS:N	1:89:A:LYS:CA	1:89:A:LYS:C	1:90:A:VAL:N	7	16.28
(1,324)	1:149:B:LEU:N	1:149:B:LEU:CA	1:149:B:LEU:C	1:150:B:TYR:N	9	16.27
(1,176)	1:165:B:LYS:C	1:166:B:LYS:N	1:166:B:LYS:CA	1:166:B:LYS:C	1	16.27
(1,201)	1:59:A:GLU:N	1:59:A:GLU:CA	1:59:A:GLU:C	1:60:A:GLU:N	1	16.25
(1,116)	1:116:B:LYS:C	1:117:B:HIS:N	1:117:B:HIS:CA	1:117:B:HIS:C	3	16.21
(1,14)	1:49:B:GLY:C	1:50:B:ASP:N	1:50:B:ASP:CA	1:50:B:ASP:C	9	16.2
(1,176)	1:165:B:LYS:C	1:166:B:LYS:N	1:166:B:LYS:CA	1:166:B:LYS:C	7	16.16
(1,175)	1:165:A:LYS:C	1:166:A:LYS:N	1:166:A:LYS:CA	1:166:A:LYS:C	8	16.16
(1,175)	1:165:A:LYS:C	1:166:A:LYS:N	1:166:A:LYS:CA	1:166:A:LYS:C	2	16.09
(1,175)	1:165:A:LYS:C	1:166:A:LYS:N	1:166:A:LYS:CA	1:166:A:LYS:C	4	16.07
(1,250)	1:89:B:LYS:N	1:89:B:LYS:CA	1:89:B:LYS:C	1:90:B:VAL:N	7	15.99
(1,88)	1:98:B:GLN:C	1:99:B:LYS:N	1:99:B:LYS:CA	1:99:B:LYS:C	8	15.99
(1,112)	1:114:B:THR:C	1:115:B:ASP:N	1:115:B:ASP:CA	1:115:B:ASP:C	3	15.95
(1,130)	1:131:B:VAL:C	1:132:B:ASP:N	1:132:B:ASP:CA	1:132:B:ASP:C	7	15.9
(1,48)	1:73:B:MET:C	1:74:B:ILE:N	1:74:B:ILE:CA	1:74:B:ILE:C	3	15.81
(1,176)	1:165:B:LYS:C	1:166:B:LYS:N	1:166:B:LYS:CA	1:166:B:LYS:C	2	15.76
(1,130)	1:131:B:VAL:C	1:132:B:ASP:N	1:132:B:ASP:CA	1:132:B:ASP:C	1	15.75
(1,182)	1:42:B:GLN:N	1:42:B:GLN:CA	1:42:B:GLN:C	1:43:B:THR:N	3	15.63
(1,292)	1:116:B:LYS:N	1:116:B:LYS:CA	1:116:B:LYS:C	1:117:B:HIS:N	1	15.61
(1,291)	1:116:A:LYS:N	1:116:A:LYS:CA	1:116:A:LYS:C	1:117:A:HIS:N	3	15.59

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,175)	1:165:A:LYS:C	1:166:A:LYS:N	1:166:A:LYS:CA	1:166:A:LYS:C	10	15.57
(1,175)	1:165:A:LYS:C	1:166:A:LYS:N	1:166:A:LYS:CA	1:166:A:LYS:C	5	15.55
(1,181)	1:42:A:GLN:N	1:42:A:GLN:CA	1:42:A:GLN:C	1:43:A:THR:N	9	15.44
(1,176)	1:165:B:LYS:C	1:166:B:LYS:N	1:166:B:LYS:CA	1:166:B:LYS:C	3	15.43
(1,175)	1:165:A:LYS:C	1:166:A:LYS:N	1:166:A:LYS:CA	1:166:A:LYS:C	9	15.39
(1,112)	1:114:B:THR:C	1:115:B:ASP:N	1:115:B:ASP:CA	1:115:B:ASP:C	10	15.37
(1,111)	1:114:A:THR:C	1:115:A:ASP:N	1:115:A:ASP:CA	1:115:A:ASP:C	3	15.36
(1,176)	1:165:B:LYS:C	1:166:B:LYS:N	1:166:B:LYS:CA	1:166:B:LYS:C	5	15.32
(1,292)	1:116:B:LYS:N	1:116:B:LYS:CA	1:116:B:LYS:C	1:117:B:HIS:N	7	15.29
(1,111)	1:114:A:THR:C	1:115:A:ASP:N	1:115:A:ASP:CA	1:115:A:ASP:C	1	15.26
(1,13)	1:49:A:GLY:C	1:50:A:ASP:N	1:50:A:ASP:CA	1:50:A:ASP:C	2	15.26
(1,112)	1:114:B:THR:C	1:115:B:ASP:N	1:115:B:ASP:CA	1:115:B:ASP:C	1	15.25
(1,186)	1:44:B:LEU:N	1:44:B:LEU:CA	1:44:B:LEU:C	1:45:B:SER:N	2	15.21
(1,58)	1:79:B:ASP:C	1:80:B:GLU:N	1:80:B:GLU:CA	1:80:B:GLU:C	2	15.18
(1,202)	1:59:B:GLU:N	1:59:B:GLU:CA	1:59:B:GLU:C	1:60:B:GLU:N	5	15.17
(1,112)	1:114:B:THR:C	1:115:B:ASP:N	1:115:B:ASP:CA	1:115:B:ASP:C	4	15.16
(1,176)	1:165:B:LYS:C	1:166:B:LYS:N	1:166:B:LYS:CA	1:166:B:LYS:C	10	15.1
(1,313)	1:137:A:VAL:N	1:137:A:VAL:CA	1:137:A:VAL:C	1:138:A:ARG:N	8	15.08
(1,181)	1:42:A:GLN:N	1:42:A:GLN:CA	1:42:A:GLN:C	1:43:A:THR:N	7	15.08
(1,87)	1:98:A:GLN:C	1:99:A:LYS:N	1:99:A:LYS:CA	1:99:A:LYS:C	4	14.96
(1,129)	1:131:A:VAL:C	1:132:A:ASP:N	1:132:A:ASP:CA	1:132:A:ASP:C	3	14.95
(1,282)	1:108:B:ASN:N	1:108:B:ASN:CA	1:108:B:ASN:C	1:109:B:LEU:N	7	14.93
(1,58)	1:79:B:ASP:C	1:80:B:GLU:N	1:80:B:GLU:CA	1:80:B:GLU:C	10	14.87
(1,57)	1:79:A:ASP:C	1:80:A:GLU:N	1:80:A:GLU:CA	1:80:A:GLU:C	6	14.81
(1,201)	1:59:A:GLU:N	1:59:A:GLU:CA	1:59:A:GLU:C	1:60:A:GLU:N	8	14.8
(1,176)	1:165:B:LYS:C	1:166:B:LYS:N	1:166:B:LYS:CA	1:166:B:LYS:C	9	14.8
(1,57)	1:79:A:ASP:C	1:80:A:GLU:N	1:80:A:GLU:CA	1:80:A:GLU:C	8	14.8
(1,201)	1:59:A:GLU:N	1:59:A:GLU:CA	1:59:A:GLU:C	1:60:A:GLU:N	4	14.78
(1,186)	1:44:B:LEU:N	1:44:B:LEU:CA	1:44:B:LEU:C	1:45:B:SER:N	5	14.75
(1,160)	1:157:B:THR:C	1:158:B:ALA:N	1:158:B:ALA:CA	1:158:B:ALA:C	9	14.75
(1,209)	1:63:A:TYR:N	1:63:A:TYR:CA	1:63:A:TYR:C	1:64:A:LYS:N	4	14.73
(1,193)	1:50:A:ASP:N	1:50:A:ASP:CA	1:50:A:ASP:C	1:51:A:GLN:N	10	14.73
(1,87)	1:98:A:GLN:C	1:99:A:LYS:N	1:99:A:LYS:CA	1:99:A:LYS:C	8	14.73
(1,129)	1:131:A:VAL:C	1:132:A:ASP:N	1:132:A:ASP:CA	1:132:A:ASP:C	8	14.69
(1,314)	1:137:B:VAL:N	1:137:B:VAL:CA	1:137:B:VAL:C	1:138:B:ARG:N	4	14.68
(1,176)	1:165:B:LYS:C	1:166:B:LYS:N	1:166:B:LYS:CA	1:166:B:LYS:C	4	14.64
(1,175)	1:165:A:LYS:C	1:166:A:LYS:N	1:166:A:LYS:CA	1:166:A:LYS:C	6	14.64
(1,58)	1:79:B:ASP:C	1:80:B:GLU:N	1:80:B:GLU:CA	1:80:B:GLU:C	6	14.62
(1,314)	1:137:B:VAL:N	1:137:B:VAL:CA	1:137:B:VAL:C	1:138:B:ARG:N	1	14.51
(1,48)	1:73:B:MET:C	1:74:B:ILE:N	1:74:B:ILE:CA	1:74:B:ILE:C	4	14.46
(1,57)	1:79:A:ASP:C	1:80:A:GLU:N	1:80:A:GLU:CA	1:80:A:GLU:C	4	14.37
(1,130)	1:131:B:VAL:C	1:132:B:ASP:N	1:132:B:ASP:CA	1:132:B:ASP:C	9	14.34
(1,57)	1:79:A:ASP:C	1:80:A:GLU:N	1:80:A:GLU:CA	1:80:A:GLU:C	2	14.31
(1,129)	1:131:A:VAL:C	1:132:A:ASP:N	1:132:A:ASP:CA	1:132:A:ASP:C	6	14.3
(1,186)	1:44:B:LEU:N	1:44:B:LEU:CA	1:44:B:LEU:C	1:45:B:SER:N	3	14.26
(1,57)	1:79:A:ASP:C	1:80:A:GLU:N	1:80:A:GLU:CA	1:80:A:GLU:C	1	14.23
(1,199)	1:58:A:TYR:N	1:58:A:TYR:CA	1:58:A:TYR:C	1:59:A:GLU:N	7	14.2
(1,88)	1:98:B:GLN:C	1:99:B:LYS:N	1:99:B:LYS:CA	1:99:B:LYS:C	4	14.12
(1,129)	1:131:A:VAL:C	1:132:A:ASP:N	1:132:A:ASP:CA	1:132:A:ASP:C	4	14.11
(1,48)	1:73:B:MET:C	1:74:B:ILE:N	1:74:B:ILE:CA	1:74:B:ILE:C	6	14.08
(1,200)	1:58:B:TYR:N	1:58:B:TYR:CA	1:58:B:TYR:C	1:59:B:GLU:N	2	13.97

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,181)	1:42:A:GLN:N	1:42:A:GLN:CA	1:42:A:GLN:C	1:43:A:THR:N	6	13.81
(1,217)	1:67:A:THR:N	1:67:A:THR:CA	1:67:A:THR:C	1:68:A:SER:N	3	13.8
(1,130)	1:131:B:VAL:C	1:132:B:ASP:N	1:132:B:ASP:CA	1:132:B:ASP:C	10	13.8
(1,129)	1:131:A:VAL:C	1:132:A:ASP:N	1:132:A:ASP:CA	1:132:A:ASP:C	9	13.76
(1,182)	1:42:B:GLN:N	1:42:B:GLN:CA	1:42:B:GLN:C	1:43:B:THR:N	9	13.74
(1,201)	1:59:A:GLU:N	1:59:A:GLU:CA	1:59:A:GLU:C	1:60:A:GLU:N	10	13.72
(1,176)	1:165:B:LYS:C	1:166:B:LYS:N	1:166:B:LYS:CA	1:166:B:LYS:C	6	13.7
(1,36)	1:65:B:SER:C	1:66:B:LYS:N	1:66:B:LYS:CA	1:66:B:LYS:C	3	13.69
(1,292)	1:116:B:LYS:N	1:116:B:LYS:CA	1:116:B:LYS:C	1:117:B:HIS:N	3	13.66
(1,246)	1:86:B:ALA:N	1:86:B:ALA:CA	1:86:B:ALA:C	1:87:B:LEU:N	1	13.49
(1,201)	1:59:A:GLU:N	1:59:A:GLU:CA	1:59:A:GLU:C	1:60:A:GLU:N	5	13.49
(1,186)	1:44:B:LEU:N	1:44:B:LEU:CA	1:44:B:LEU:C	1:45:B:SER:N	9	13.49
(1,200)	1:58:B:TYR:N	1:58:B:TYR:CA	1:58:B:TYR:C	1:59:B:GLU:N	1	13.48
(1,201)	1:59:A:GLU:N	1:59:A:GLU:CA	1:59:A:GLU:C	1:60:A:GLU:N	3	13.44
(1,196)	1:54:B:TRP:N	1:54:B:TRP:CA	1:54:B:TRP:C	1:55:B:THR:N	1	13.44
(1,202)	1:59:B:GLU:N	1:59:B:GLU:CA	1:59:B:GLU:C	1:60:B:GLU:N	3	13.42
(1,185)	1:44:A:LEU:N	1:44:A:LEU:CA	1:44:A:LEU:C	1:45:A:SER:N	1	13.41
(1,199)	1:58:A:TYR:N	1:58:A:TYR:CA	1:58:A:TYR:C	1:59:A:GLU:N	1	13.34
(1,324)	1:149:B:LEU:N	1:149:B:LEU:CA	1:149:B:LEU:C	1:150:B:TYR:N	4	13.3
(1,246)	1:86:B:ALA:N	1:86:B:ALA:CA	1:86:B:ALA:C	1:87:B:LEU:N	6	13.29
(1,202)	1:59:B:GLU:N	1:59:B:GLU:CA	1:59:B:GLU:C	1:60:B:GLU:N	8	13.29
(1,190)	1:46:B:ARG:N	1:46:B:ARG:CA	1:46:B:ARG:C	1:47:B:GLY:N	10	13.27
(1,324)	1:149:B:LEU:N	1:149:B:LEU:CA	1:149:B:LEU:C	1:150:B:TYR:N	6	13.25
(1,201)	1:59:A:GLU:N	1:59:A:GLU:CA	1:59:A:GLU:C	1:60:A:GLU:N	9	13.25
(1,201)	1:59:A:GLU:N	1:59:A:GLU:CA	1:59:A:GLU:C	1:60:A:GLU:N	6	13.21
(1,58)	1:79:B:ASP:C	1:80:B:GLU:N	1:80:B:GLU:CA	1:80:B:GLU:C	4	13.17
(1,58)	1:79:B:ASP:C	1:80:B:GLU:N	1:80:B:GLU:CA	1:80:B:GLU:C	8	13.16
(1,202)	1:59:B:GLU:N	1:59:B:GLU:CA	1:59:B:GLU:C	1:60:B:GLU:N	7	13.14
(1,200)	1:58:B:TYR:N	1:58:B:TYR:CA	1:58:B:TYR:C	1:59:B:GLU:N	4	13.14
(1,202)	1:59:B:GLU:N	1:59:B:GLU:CA	1:59:B:GLU:C	1:60:B:GLU:N	1	13.13
(1,245)	1:86:A:ALA:N	1:86:A:ALA:CA	1:86:A:ALA:C	1:87:A:LEU:N	10	13.07
(1,202)	1:59:B:GLU:N	1:59:B:GLU:CA	1:59:B:GLU:C	1:60:B:GLU:N	2	13.06
(1,48)	1:73:B:MET:C	1:74:B:ILE:N	1:74:B:ILE:CA	1:74:B:ILE:C	8	13.05
(1,130)	1:131:B:VAL:C	1:132:B:ASP:N	1:132:B:ASP:CA	1:132:B:ASP:C	5	13.04
(1,246)	1:86:B:ALA:N	1:86:B:ALA:CA	1:86:B:ALA:C	1:87:B:LEU:N	10	12.93
(1,3)	1:42:A:GLN:C	1:43:A:THR:N	1:43:A:THR:CA	1:43:A:THR:C	10	12.93
(1,200)	1:58:B:TYR:N	1:58:B:TYR:CA	1:58:B:TYR:C	1:59:B:GLU:N	9	12.91
(1,202)	1:59:B:GLU:N	1:59:B:GLU:CA	1:59:B:GLU:C	1:60:B:GLU:N	9	12.9
(1,324)	1:149:B:LEU:N	1:149:B:LEU:CA	1:149:B:LEU:C	1:150:B:TYR:N	10	12.87
(1,313)	1:137:A:VAL:N	1:137:A:VAL:CA	1:137:A:VAL:C	1:138:A:ARG:N	5	12.87
(1,323)	1:149:A:LEU:N	1:149:A:LEU:CA	1:149:A:LEU:C	1:150:A:TYR:N	4	12.82
(1,199)	1:58:A:TYR:N	1:58:A:TYR:CA	1:58:A:TYR:C	1:59:A:GLU:N	6	12.8
(1,245)	1:86:A:ALA:N	1:86:A:ALA:CA	1:86:A:ALA:C	1:87:A:LEU:N	6	12.79
(1,313)	1:137:A:VAL:N	1:137:A:VAL:CA	1:137:A:VAL:C	1:138:A:ARG:N	10	12.78
(1,91)	1:100:A:LEU:C	1:101:A:ALA:N	1:101:A:ALA:CA	1:101:A:ALA:C	3	12.78
(1,57)	1:79:A:ASP:C	1:80:A:GLU:N	1:80:A:GLU:CA	1:80:A:GLU:C	10	12.75
(1,209)	1:63:A:TYR:N	1:63:A:TYR:CA	1:63:A:TYR:C	1:64:A:LYS:N	5	12.7
(1,199)	1:58:A:TYR:N	1:58:A:TYR:CA	1:58:A:TYR:C	1:59:A:GLU:N	5	12.7
(1,4)	1:42:B:GLN:C	1:43:B:THR:N	1:43:B:THR:CA	1:43:B:THR:C	4	12.64
(1,201)	1:59:A:GLU:N	1:59:A:GLU:CA	1:59:A:GLU:C	1:60:A:GLU:N	2	12.63
(1,159)	1:157:A:THR:C	1:158:A:ALA:N	1:158:A:ALA:CA	1:158:A:ALA:C	10	12.6

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,202)	1:59:B:GLU:N	1:59:B:GLU:CA	1:59:B:GLU:C	1:60:B:GLU:N	10	12.55
(1,246)	1:86:B:ALA:N	1:86:B:ALA:CA	1:86:B:ALA:C	1:87:B:LEU:N	8	12.52
(1,186)	1:44:B:LEU:N	1:44:B:LEU:CA	1:44:B:LEU:C	1:45:B:SER:N	8	12.51
(1,58)	1:79:B:ASP:C	1:80:B:GLU:N	1:80:B:GLU:CA	1:80:B:GLU:C	1	12.49
(1,185)	1:44:A:LEU:N	1:44:A:LEU:CA	1:44:A:LEU:C	1:45:A:SER:N	4	12.47
(1,314)	1:137:B:VAL:N	1:137:B:VAL:CA	1:137:B:VAL:C	1:138:B:ARG:N	2	12.46
(1,246)	1:86:B:ALA:N	1:86:B:ALA:CA	1:86:B:ALA:C	1:87:B:LEU:N	4	12.39
(1,129)	1:131:A:VAL:C	1:132:A:ASP:N	1:132:A:ASP:CA	1:132:A:ASP:C	2	12.37
(1,129)	1:131:A:VAL:C	1:132:A:ASP:N	1:132:A:ASP:CA	1:132:A:ASP:C	7	12.37
(1,4)	1:42:B:GLN:C	1:43:B:THR:N	1:43:B:THR:CA	1:43:B:THR:C	10	12.36
(1,195)	1:54:A:TRP:N	1:54:A:TRP:CA	1:54:A:TRP:C	1:55:A:THR:N	1	12.33
(1,185)	1:44:A:LEU:N	1:44:A:LEU:CA	1:44:A:LEU:C	1:45:A:SER:N	10	12.28
(1,48)	1:73:B:MET:C	1:74:B:ILE:N	1:74:B:ILE:CA	1:74:B:ILE:C	1	12.27
(1,182)	1:42:B:GLN:N	1:42:B:GLN:CA	1:42:B:GLN:C	1:43:B:THR:N	7	12.23
(1,130)	1:131:B:VAL:C	1:132:B:ASP:N	1:132:B:ASP:CA	1:132:B:ASP:C	8	12.22
(1,245)	1:86:A:ALA:N	1:86:A:ALA:CA	1:86:A:ALA:C	1:87:A:LEU:N	1	12.18
(1,323)	1:149:A:LEU:N	1:149:A:LEU:CA	1:149:A:LEU:C	1:150:A:TYR:N	10	12.15
(1,218)	1:67:B:THR:N	1:67:B:THR:CA	1:67:B:THR:C	1:68:B:SER:N	3	12.1
(1,185)	1:44:A:LEU:N	1:44:A:LEU:CA	1:44:A:LEU:C	1:45:A:SER:N	6	12.1
(1,196)	1:54:B:TRP:N	1:54:B:TRP:CA	1:54:B:TRP:C	1:55:B:THR:N	10	12.09
(1,58)	1:79:B:ASP:C	1:80:B:GLU:N	1:80:B:GLU:CA	1:80:B:GLU:C	5	12.08
(1,245)	1:86:A:ALA:N	1:86:A:ALA:CA	1:86:A:ALA:C	1:87:A:LEU:N	4	12.06
(1,199)	1:58:A:TYR:N	1:58:A:TYR:CA	1:58:A:TYR:C	1:59:A:GLU:N	9	12.01
(1,245)	1:86:A:ALA:N	1:86:A:ALA:CA	1:86:A:ALA:C	1:87:A:LEU:N	8	12.0
(1,199)	1:58:A:TYR:N	1:58:A:TYR:CA	1:58:A:TYR:C	1:59:A:GLU:N	2	11.99
(1,323)	1:149:A:LEU:N	1:149:A:LEU:CA	1:149:A:LEU:C	1:150:A:TYR:N	9	11.96
(1,199)	1:58:A:TYR:N	1:58:A:TYR:CA	1:58:A:TYR:C	1:59:A:GLU:N	4	11.96
(1,129)	1:131:A:VAL:C	1:132:A:ASP:N	1:132:A:ASP:CA	1:132:A:ASP:C	1	11.9
(1,281)	1:108:A:ASN:N	1:108:A:ASN:CA	1:108:A:ASN:C	1:109:A:LEU:N	7	11.89
(1,4)	1:42:B:GLN:C	1:43:B:THR:N	1:43:B:THR:CA	1:43:B:THR:C	5	11.76
(1,324)	1:149:B:LEU:N	1:149:B:LEU:CA	1:149:B:LEU:C	1:150:B:TYR:N	8	11.75
(1,48)	1:73:B:MET:C	1:74:B:ILE:N	1:74:B:ILE:CA	1:74:B:ILE:C	2	11.75
(1,16)	1:53:B:ILE:C	1:54:B:TRP:N	1:54:B:TRP:CA	1:54:B:TRP:C	6	11.75
(1,186)	1:44:B:LEU:N	1:44:B:LEU:CA	1:44:B:LEU:C	1:45:B:SER:N	4	11.69
(1,57)	1:79:A:ASP:C	1:80:A:GLU:N	1:80:A:GLU:CA	1:80:A:GLU:C	5	11.69
(1,33)	1:64:A:LYS:C	1:65:A:SER:N	1:65:A:SER:CA	1:65:A:SER:C	4	11.67
(1,246)	1:86:B:ALA:N	1:86:B:ALA:CA	1:86:B:ALA:C	1:87:B:LEU:N	2	11.61
(1,200)	1:58:B:TYR:N	1:58:B:TYR:CA	1:58:B:TYR:C	1:59:B:GLU:N	5	11.57
(1,58)	1:79:B:ASP:C	1:80:B:GLU:N	1:80:B:GLU:CA	1:80:B:GLU:C	7	11.57
(1,200)	1:58:B:TYR:N	1:58:B:TYR:CA	1:58:B:TYR:C	1:59:B:GLU:N	6	11.55
(1,47)	1:73:A:MET:C	1:74:A:ILE:N	1:74:A:ILE:CA	1:74:A:ILE:C	9	11.48
(1,4)	1:42:B:GLN:C	1:43:B:THR:N	1:43:B:THR:CA	1:43:B:THR:C	8	11.43
(1,199)	1:58:A:TYR:N	1:58:A:TYR:CA	1:58:A:TYR:C	1:59:A:GLU:N	10	11.32
(1,47)	1:73:A:MET:C	1:74:A:ILE:N	1:74:A:ILE:CA	1:74:A:ILE:C	8	11.31
(1,72)	1:88:B:LYS:C	1:89:B:LYS:N	1:89:B:LYS:CA	1:89:B:LYS:C	3	11.3
(1,323)	1:149:A:LEU:N	1:149:A:LEU:CA	1:149:A:LEU:C	1:150:A:TYR:N	5	11.2
(1,47)	1:73:A:MET:C	1:74:A:ILE:N	1:74:A:ILE:CA	1:74:A:ILE:C	10	11.13
(1,246)	1:86:B:ALA:N	1:86:B:ALA:CA	1:86:B:ALA:C	1:87:B:LEU:N	9	11.1
(1,245)	1:86:A:ALA:N	1:86:A:ALA:CA	1:86:A:ALA:C	1:87:A:LEU:N	7	11.05
(1,200)	1:58:B:TYR:N	1:58:B:TYR:CA	1:58:B:TYR:C	1:59:B:GLU:N	10	10.95
(1,14)	1:49:B:GLY:C	1:50:B:ASP:N	1:50:B:ASP:CA	1:50:B:ASP:C	10	10.91

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,48)	1:73:B:MET:C	1:74:B:ILE:N	1:74:B:ILE:CA	1:74:B:ILE:C	7	10.79
(1,324)	1:149:B:LEU:N	1:149:B:LEU:CA	1:149:B:LEU:C	1:150:B:TYR:N	3	10.78
(1,47)	1:73:A:MET:C	1:74:A:ILE:N	1:74:A:ILE:CA	1:74:A:ILE:C	4	10.76
(1,210)	1:63:B:TYR:N	1:63:B:TYR:CA	1:63:B:TYR:C	1:64:B:LYS:N	5	10.71
(1,47)	1:73:A:MET:C	1:74:A:ILE:N	1:74:A:ILE:CA	1:74:A:ILE:C	2	10.63
(1,199)	1:58:A:TYR:N	1:58:A:TYR:CA	1:58:A:TYR:C	1:59:A:GLU:N	8	10.6
(1,47)	1:73:A:MET:C	1:74:A:ILE:N	1:74:A:ILE:CA	1:74:A:ILE:C	5	10.57
(1,324)	1:149:B:LEU:N	1:149:B:LEU:CA	1:149:B:LEU:C	1:150:B:TYR:N	5	10.55
(1,3)	1:42:A:GLN:C	1:43:A:THR:N	1:43:A:THR:CA	1:43:A:THR:C	2	10.52
(1,245)	1:86:A:ALA:N	1:86:A:ALA:CA	1:86:A:ALA:C	1:87:A:LEU:N	9	10.48
(1,324)	1:149:B:LEU:N	1:149:B:LEU:CA	1:149:B:LEU:C	1:150:B:TYR:N	1	10.45
(1,191)	1:48:A:TRP:N	1:48:A:TRP:CA	1:48:A:TRP:C	1:49:A:GLY:N	1	10.41
(1,47)	1:73:A:MET:C	1:74:A:ILE:N	1:74:A:ILE:CA	1:74:A:ILE:C	3	10.33
(1,245)	1:86:A:ALA:N	1:86:A:ALA:CA	1:86:A:ALA:C	1:87:A:LEU:N	2	10.29
(1,4)	1:42:B:GLN:C	1:43:B:THR:N	1:43:B:THR:CA	1:43:B:THR:C	1	10.29
(1,282)	1:108:B:ASN:N	1:108:B:ASN:CA	1:108:B:ASN:C	1:109:B:LEU:N	4	10.27
(1,245)	1:86:A:ALA:N	1:86:A:ALA:CA	1:86:A:ALA:C	1:87:A:LEU:N	5	10.18
(1,31)	1:63:A:TYR:C	1:64:A:LYS:N	1:64:A:LYS:CA	1:64:A:LYS:C	9	10.09
(1,332)	1:155:B:ALA:N	1:155:B:ALA:CA	1:155:B:ALA:C	1:156:B:ASP:N	2	10.03
(1,323)	1:149:A:LEU:N	1:149:A:LEU:CA	1:149:A:LEU:C	1:150:A:TYR:N	6	9.96
(1,209)	1:63:A:TYR:N	1:63:A:TYR:CA	1:63:A:TYR:C	1:64:A:LYS:N	2	9.92
(1,332)	1:155:B:ALA:N	1:155:B:ALA:CA	1:155:B:ALA:C	1:156:B:ASP:N	8	9.88
(1,185)	1:44:A:LEU:N	1:44:A:LEU:CA	1:44:A:LEU:C	1:45:A:SER:N	2	9.87
(1,57)	1:79:A:ASP:C	1:80:A:GLU:N	1:80:A:GLU:CA	1:80:A:GLU:C	7	9.83
(1,48)	1:73:B:MET:C	1:74:B:ILE:N	1:74:B:ILE:CA	1:74:B:ILE:C	9	9.74
(1,47)	1:73:A:MET:C	1:74:A:ILE:N	1:74:A:ILE:CA	1:74:A:ILE:C	1	9.72
(1,34)	1:64:B:LYS:C	1:65:B:SER:N	1:65:B:SER:CA	1:65:B:SER:C	5	9.68
(1,323)	1:149:A:LEU:N	1:149:A:LEU:CA	1:149:A:LEU:C	1:150:A:TYR:N	3	9.63
(1,332)	1:155:B:ALA:N	1:155:B:ALA:CA	1:155:B:ALA:C	1:156:B:ASP:N	6	9.59
(1,47)	1:73:A:MET:C	1:74:A:ILE:N	1:74:A:ILE:CA	1:74:A:ILE:C	6	9.59
(1,331)	1:155:A:ALA:N	1:155:A:ALA:CA	1:155:A:ALA:C	1:156:A:ASP:N	2	9.58
(1,47)	1:73:A:MET:C	1:74:A:ILE:N	1:74:A:ILE:CA	1:74:A:ILE:C	7	9.58
(1,332)	1:155:B:ALA:N	1:155:B:ALA:CA	1:155:B:ALA:C	1:156:B:ASP:N	7	9.57
(1,246)	1:86:B:ALA:N	1:86:B:ALA:CA	1:86:B:ALA:C	1:87:B:LEU:N	5	9.57
(1,324)	1:149:B:LEU:N	1:149:B:LEU:CA	1:149:B:LEU:C	1:150:B:TYR:N	2	9.53
(1,332)	1:155:B:ALA:N	1:155:B:ALA:CA	1:155:B:ALA:C	1:156:B:ASP:N	10	9.52
(1,324)	1:149:B:LEU:N	1:149:B:LEU:CA	1:149:B:LEU:C	1:150:B:TYR:N	7	9.51
(1,15)	1:53:A:ILE:C	1:54:A:TRP:N	1:54:A:TRP:CA	1:54:A:TRP:C	6	9.44
(1,331)	1:155:A:ALA:N	1:155:A:ALA:CA	1:155:A:ALA:C	1:156:A:ASP:N	3	9.4
(1,331)	1:155:A:ALA:N	1:155:A:ALA:CA	1:155:A:ALA:C	1:156:A:ASP:N	1	9.34
(1,323)	1:149:A:LEU:N	1:149:A:LEU:CA	1:149:A:LEU:C	1:150:A:TYR:N	2	9.32
(1,196)	1:54:B:TRP:N	1:54:B:TRP:CA	1:54:B:TRP:C	1:55:B:THR:N	9	9.32
(1,200)	1:58:B:TYR:N	1:58:B:TYR:CA	1:58:B:TYR:C	1:59:B:GLU:N	8	9.31
(1,246)	1:86:B:ALA:N	1:86:B:ALA:CA	1:86:B:ALA:C	1:87:B:LEU:N	7	9.28
(1,332)	1:155:B:ALA:N	1:155:B:ALA:CA	1:155:B:ALA:C	1:156:B:ASP:N	1	9.23
(1,336)	1:157:B:THR:N	1:157:B:THR:CA	1:157:B:THR:C	1:158:B:ALA:N	3	9.22
(1,331)	1:155:A:ALA:N	1:155:A:ALA:CA	1:155:A:ALA:C	1:156:A:ASP:N	8	9.21
(1,331)	1:155:A:ALA:N	1:155:A:ALA:CA	1:155:A:ALA:C	1:156:A:ASP:N	4	9.19
(1,195)	1:54:A:TRP:N	1:54:A:TRP:CA	1:54:A:TRP:C	1:55:A:THR:N	6	9.15
(1,331)	1:155:A:ALA:N	1:155:A:ALA:CA	1:155:A:ALA:C	1:156:A:ASP:N	7	9.13
(1,332)	1:155:B:ALA:N	1:155:B:ALA:CA	1:155:B:ALA:C	1:156:B:ASP:N	5	9.02

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,16)	1:53:B:ILE:C	1:54:B:TRP:N	1:54:B:TRP:CA	1:54:B:TRP:C	7	9.02
(1,210)	1:63:B:TYR:N	1:63:B:TYR:CA	1:63:B:TYR:C	1:64:B:LYS:N	10	8.94
(1,110)	1:111:B:TYR:C	1:112:B:GLU:N	1:112:B:GLU:CA	1:112:B:GLU:C	7	8.81
(1,109)	1:111:A:TYR:C	1:112:A:GLU:N	1:112:A:GLU:CA	1:112:A:GLU:C	7	8.74
(1,71)	1:88:A:LYS:C	1:89:A:LYS:N	1:89:A:LYS:CA	1:89:A:LYS:C	3	8.73
(1,110)	1:111:B:TYR:C	1:112:B:GLU:N	1:112:B:GLU:CA	1:112:B:GLU:C	4	8.7
(1,331)	1:155:A:ALA:N	1:155:A:ALA:CA	1:155:A:ALA:C	1:156:A:ASP:N	5	8.65
(1,237)	1:80:A:GLU:N	1:80:A:GLU:CA	1:80:A:GLU:C	1:81:A:CYS:N	2	8.6
(1,48)	1:73:B:MET:C	1:74:B:ILE:N	1:74:B:ILE:CA	1:74:B:ILE:C	10	8.58
(1,200)	1:58:B:TYR:N	1:58:B:TYR:CA	1:58:B:TYR:C	1:59:B:GLU:N	7	8.55
(1,282)	1:108:B:ASN:N	1:108:B:ASN:CA	1:108:B:ASN:C	1:109:B:LEU:N	6	8.53
(1,260)	1:96:B:GLU:N	1:96:B:GLU:CA	1:96:B:GLU:C	1:97:B:ILE:N	3	8.51
(1,287)	1:112:A:GLU:N	1:112:A:GLU:CA	1:112:A:GLU:C	1:113:A:THR:N	5	8.47
(1,4)	1:42:B:GLN:C	1:43:B:THR:N	1:43:B:THR:CA	1:43:B:THR:C	2	8.47
(1,238)	1:80:B:GLU:N	1:80:B:GLU:CA	1:80:B:GLU:C	1:81:B:CYS:N	2	8.46
(1,110)	1:111:B:TYR:C	1:112:B:GLU:N	1:112:B:GLU:CA	1:112:B:GLU:C	6	8.46
(1,195)	1:54:A:TRP:N	1:54:A:TRP:CA	1:54:A:TRP:C	1:55:A:THR:N	10	8.41
(1,237)	1:80:A:GLU:N	1:80:A:GLU:CA	1:80:A:GLU:C	1:81:A:CYS:N	4	8.36
(1,209)	1:63:A:TYR:N	1:63:A:TYR:CA	1:63:A:TYR:C	1:64:A:LYS:N	10	8.2
(1,196)	1:54:B:TRP:N	1:54:B:TRP:CA	1:54:B:TRP:C	1:55:B:THR:N	4	8.2
(1,195)	1:54:A:TRP:N	1:54:A:TRP:CA	1:54:A:TRP:C	1:55:A:THR:N	4	8.19
(1,210)	1:63:B:TYR:N	1:63:B:TYR:CA	1:63:B:TYR:C	1:64:B:LYS:N	9	8.17
(1,209)	1:63:A:TYR:N	1:63:A:TYR:CA	1:63:A:TYR:C	1:64:A:LYS:N	7	8.13
(1,3)	1:42:A:GLN:C	1:43:A:THR:N	1:43:A:THR:CA	1:43:A:THR:C	3	8.13
(1,109)	1:111:A:TYR:C	1:112:A:GLU:N	1:112:A:GLU:CA	1:112:A:GLU:C	8	8.11
(1,101)	1:106:A:LEU:C	1:107:A:LEU:N	1:107:A:LEU:CA	1:107:A:LEU:C	3	8.06
(1,31)	1:63:A:TYR:C	1:64:A:LYS:N	1:64:A:LYS:CA	1:64:A:LYS:C	4	7.95
(1,282)	1:108:B:ASN:N	1:108:B:ASN:CA	1:108:B:ASN:C	1:109:B:LEU:N	9	7.94
(1,109)	1:111:A:TYR:C	1:112:A:GLU:N	1:112:A:GLU:CA	1:112:A:GLU:C	1	7.92
(1,311)	1:136:A:THR:N	1:136:A:THR:CA	1:136:A:THR:C	1:137:A:VAL:N	8	7.78
(1,210)	1:63:B:TYR:N	1:63:B:TYR:CA	1:63:B:TYR:C	1:64:B:LYS:N	6	7.68
(1,36)	1:65:B:SER:C	1:66:B:LYS:N	1:66:B:LYS:CA	1:66:B:LYS:C	8	7.63
(1,281)	1:108:A:ASN:N	1:108:A:ASN:CA	1:108:A:ASN:C	1:109:A:LEU:N	5	7.62
(1,87)	1:98:A:GLN:C	1:99:A:LYS:N	1:99:A:LYS:CA	1:99:A:LYS:C	3	7.6
(1,48)	1:73:B:MET:C	1:74:B:ILE:N	1:74:B:ILE:CA	1:74:B:ILE:C	5	7.54
(1,272)	1:102:B:GLU:N	1:102:B:GLU:CA	1:102:B:GLU:C	1:103:B:GLN:N	3	7.43
(1,275)	1:105:A:VAL:N	1:105:A:VAL:CA	1:105:A:VAL:C	1:106:A:LEU:N	3	7.42
(1,312)	1:136:B:THR:N	1:136:B:THR:CA	1:136:B:THR:C	1:137:B:VAL:N	6	7.34
(1,274)	1:103:B:GLN:N	1:103:B:GLN:CA	1:103:B:GLN:C	1:104:B:PHE:N	3	7.34
(1,109)	1:111:A:TYR:C	1:112:A:GLU:N	1:112:A:GLU:CA	1:112:A:GLU:C	3	7.3
(1,276)	1:105:B:VAL:N	1:105:B:VAL:CA	1:105:B:VAL:C	1:106:B:LEU:N	8	7.28
(1,3)	1:42:A:GLN:C	1:43:A:THR:N	1:43:A:THR:CA	1:43:A:THR:C	8	7.25
(1,210)	1:63:B:TYR:N	1:63:B:TYR:CA	1:63:B:TYR:C	1:64:B:LYS:N	2	7.21
(1,14)	1:49:B:GLY:C	1:50:B:ASP:N	1:50:B:ASP:CA	1:50:B:ASP:C	7	7.19
(1,196)	1:54:B:TRP:N	1:54:B:TRP:CA	1:54:B:TRP:C	1:55:B:THR:N	8	7.18
(1,110)	1:111:B:TYR:C	1:112:B:GLU:N	1:112:B:GLU:CA	1:112:B:GLU:C	1	7.13
(1,273)	1:103:A:GLN:N	1:103:A:GLN:CA	1:103:A:GLN:C	1:104:A:PHE:N	3	7.11
(1,194)	1:50:B:ASP:N	1:50:B:ASP:CA	1:50:B:ASP:C	1:51:B:GLN:N	8	6.95
(1,6)	1:43:B:THR:C	1:44:B:LEU:N	1:44:B:LEU:CA	1:44:B:LEU:C	6	6.95
(1,237)	1:80:A:GLU:N	1:80:A:GLU:CA	1:80:A:GLU:C	1:81:A:CYS:N	6	6.93
(1,132)	1:132:B:ASP:C	1:133:B:PRO:N	1:133:B:PRO:CA	1:133:B:PRO:C	4	6.93

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,32)	1:63:B:TYR:C	1:64:B:LYS:N	1:64:B:LYS:CA	1:64:B:LYS:C	9	6.93
(1,323)	1:149:A:LEU:N	1:149:A:LEU:CA	1:149:A:LEU:C	1:150:A:TYR:N	7	6.88
(1,110)	1:111:B:TYR:C	1:112:B:GLU:N	1:112:B:GLU:CA	1:112:B:GLU:C	3	6.86
(1,67)	1:86:A:ALA:C	1:87:A:LEU:N	1:87:A:LEU:CA	1:87:A:LEU:C	3	6.83
(1,238)	1:80:B:GLU:N	1:80:B:GLU:CA	1:80:B:GLU:C	1:81:B:CYS:N	9	6.81
(1,32)	1:63:B:TYR:C	1:64:B:LYS:N	1:64:B:LYS:CA	1:64:B:LYS:C	1	6.68
(1,288)	1:112:B:GLU:N	1:112:B:GLU:CA	1:112:B:GLU:C	1:113:B:THR:N	2	6.64
(1,311)	1:136:A:THR:N	1:136:A:THR:CA	1:136:A:THR:C	1:137:A:VAL:N	6	6.6
(1,282)	1:108:B:ASN:N	1:108:B:ASN:CA	1:108:B:ASN:C	1:109:B:LEU:N	1	6.59
(1,262)	1:97:B:ILE:N	1:97:B:ILE:CA	1:97:B:ILE:C	1:98:B:GLN:N	6	6.56
(1,11)	1:47:A:GLY:C	1:48:A:TRP:N	1:48:A:TRP:CA	1:48:A:TRP:C	10	6.56
(1,261)	1:97:A:ILE:N	1:97:A:ILE:CA	1:97:A:ILE:C	1:98:A:GLN:N	9	6.55
(1,6)	1:43:B:THR:C	1:44:B:LEU:N	1:44:B:LEU:CA	1:44:B:LEU:C	10	6.54
(1,311)	1:136:A:THR:N	1:136:A:THR:CA	1:136:A:THR:C	1:137:A:VAL:N	1	6.49
(1,262)	1:97:B:ILE:N	1:97:B:ILE:CA	1:97:B:ILE:C	1:98:B:GLN:N	10	6.48
(1,31)	1:63:A:TYR:C	1:64:A:LYS:N	1:64:A:LYS:CA	1:64:A:LYS:C	2	6.43
(1,195)	1:54:A:TRP:N	1:54:A:TRP:CA	1:54:A:TRP:C	1:55:A:THR:N	2	6.39
(1,192)	1:48:B:TRP:N	1:48:B:TRP:CA	1:48:B:TRP:C	1:49:B:GLY:N	8	6.39
(1,262)	1:97:B:ILE:N	1:97:B:ILE:CA	1:97:B:ILE:C	1:98:B:GLN:N	9	6.35
(1,213)	1:65:A:SER:N	1:65:A:SER:CA	1:65:A:SER:C	1:66:A:LYS:N	2	6.34
(1,31)	1:63:A:TYR:C	1:64:A:LYS:N	1:64:A:LYS:CA	1:64:A:LYS:C	5	6.34
(1,260)	1:96:B:GLU:N	1:96:B:GLU:CA	1:96:B:GLU:C	1:97:B:ILE:N	4	6.24
(1,31)	1:63:A:TYR:C	1:64:A:LYS:N	1:64:A:LYS:CA	1:64:A:LYS:C	7	6.24
(1,323)	1:149:A:LEU:N	1:149:A:LEU:CA	1:149:A:LEU:C	1:150:A:TYR:N	8	6.23
(1,338)	1:158:B:ALA:N	1:158:B:ALA:CA	1:158:B:ALA:C	1:159:B:LEU:N	3	6.19
(1,188)	1:45:B:SER:N	1:45:B:SER:CA	1:45:B:SER:C	1:46:B:ARG:N	4	6.19
(1,3)	1:42:A:GLN:C	1:43:A:THR:N	1:43:A:THR:CA	1:43:A:THR:C	5	6.12
(1,68)	1:86:B:ALA:C	1:87:B:LEU:N	1:87:B:LEU:CA	1:87:B:LEU:C	3	6.11
(1,12)	1:47:B:GLY:C	1:48:B:TRP:N	1:48:B:TRP:CA	1:48:B:TRP:C	7	6.1
(1,214)	1:65:B:SER:N	1:65:B:SER:CA	1:65:B:SER:C	1:66:B:LYS:N	3	6.04
(1,110)	1:111:B:TYR:C	1:112:B:GLU:N	1:112:B:GLU:CA	1:112:B:GLU:C	10	5.96
(1,209)	1:63:A:TYR:N	1:63:A:TYR:CA	1:63:A:TYR:C	1:64:A:LYS:N	1	5.95
(1,312)	1:136:B:THR:N	1:136:B:THR:CA	1:136:B:THR:C	1:137:B:VAL:N	7	5.94
(1,336)	1:157:B:THR:N	1:157:B:THR:CA	1:157:B:THR:C	1:158:B:ALA:N	4	5.92
(1,312)	1:136:B:THR:N	1:136:B:THR:CA	1:136:B:THR:C	1:137:B:VAL:N	8	5.92
(1,281)	1:108:A:ASN:N	1:108:A:ASN:CA	1:108:A:ASN:C	1:109:A:LEU:N	1	5.88
(1,11)	1:47:A:GLY:C	1:48:A:TRP:N	1:48:A:TRP:CA	1:48:A:TRP:C	8	5.75
(1,348)	1:163:B:ASN:N	1:163:B:ASN:CA	1:163:B:ASN:C	1:164:B:MET:N	3	5.74
(1,262)	1:97:B:ILE:N	1:97:B:ILE:CA	1:97:B:ILE:C	1:98:B:GLN:N	5	5.57
(1,84)	1:96:B:GLU:C	1:97:B:ILE:N	1:97:B:ILE:CA	1:97:B:ILE:C	3	5.5
(1,261)	1:97:A:ILE:N	1:97:A:ILE:CA	1:97:A:ILE:C	1:98:A:GLN:N	6	5.47
(1,323)	1:149:A:LEU:N	1:149:A:LEU:CA	1:149:A:LEU:C	1:150:A:TYR:N	1	5.45
(1,102)	1:106:B:LEU:C	1:107:B:LEU:N	1:107:B:LEU:CA	1:107:B:LEU:C	7	5.45
(1,213)	1:65:A:SER:N	1:65:A:SER:CA	1:65:A:SER:C	1:66:A:LYS:N	1	5.43
(1,63)	1:84:A:SER:C	1:85:A:GLN:N	1:85:A:GLN:CA	1:85:A:GLN:C	9	5.41
(1,33)	1:64:A:LYS:C	1:65:A:SER:N	1:65:A:SER:CA	1:65:A:SER:C	10	5.4
(1,311)	1:136:A:THR:N	1:136:A:THR:CA	1:136:A:THR:C	1:137:A:VAL:N	5	5.36
(1,348)	1:163:B:ASN:N	1:163:B:ASN:CA	1:163:B:ASN:C	1:164:B:MET:N	4	5.32
(1,33)	1:64:A:LYS:C	1:65:A:SER:N	1:65:A:SER:CA	1:65:A:SER:C	3	5.25
(1,347)	1:163:A:ASN:N	1:163:A:ASN:CA	1:163:A:ASN:C	1:164:A:MET:N	10	5.24
(1,347)	1:163:A:ASN:N	1:163:A:ASN:CA	1:163:A:ASN:C	1:164:A:MET:N	3	5.23

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,189)	1:46:A:ARG:N	1:46:A:ARG:CA	1:46:A:ARG:C	1:47:A:GLY:N	2	5.21
(1,187)	1:45:A:SER:N	1:45:A:SER:CA	1:45:A:SER:C	1:46:A:ARG:N	4	5.21
(1,34)	1:64:B:LYS:C	1:65:B:SER:N	1:65:B:SER:CA	1:65:B:SER:C	7	5.2
(1,311)	1:136:A:THR:N	1:136:A:THR:CA	1:136:A:THR:C	1:137:A:VAL:N	4	5.19
(1,312)	1:136:B:THR:N	1:136:B:THR:CA	1:136:B:THR:C	1:137:B:VAL:N	10	5.18
(1,312)	1:136:B:THR:N	1:136:B:THR:CA	1:136:B:THR:C	1:137:B:VAL:N	9	5.15
(1,32)	1:63:B:TYR:C	1:64:B:LYS:N	1:64:B:LYS:CA	1:64:B:LYS:C	6	5.14
(1,213)	1:65:A:SER:N	1:65:A:SER:CA	1:65:A:SER:C	1:66:A:LYS:N	4	5.12
(1,262)	1:97:B:ILE:N	1:97:B:ILE:CA	1:97:B:ILE:C	1:98:B:GLN:N	2	5.07
(1,261)	1:97:A:ILE:N	1:97:A:ILE:CA	1:97:A:ILE:C	1:98:A:GLN:N	1	5.02
(1,203)	1:60:A:GLU:N	1:60:A:GLU:CA	1:60:A:GLU:C	1:61:A:ALA:N	6	4.99
(1,311)	1:136:A:THR:N	1:136:A:THR:CA	1:136:A:THR:C	1:137:A:VAL:N	10	4.98
(1,261)	1:97:A:ILE:N	1:97:A:ILE:CA	1:97:A:ILE:C	1:98:A:GLN:N	2	4.97
(1,262)	1:97:B:ILE:N	1:97:B:ILE:CA	1:97:B:ILE:C	1:98:B:GLN:N	1	4.92
(1,338)	1:158:B:ALA:N	1:158:B:ALA:CA	1:158:B:ALA:C	1:159:B:LEU:N	4	4.91
(1,261)	1:97:A:ILE:N	1:97:A:ILE:CA	1:97:A:ILE:C	1:98:A:GLN:N	10	4.91
(1,348)	1:163:B:ASN:N	1:163:B:ASN:CA	1:163:B:ASN:C	1:164:B:MET:N	8	4.89
(1,34)	1:64:B:LYS:C	1:65:B:SER:N	1:65:B:SER:CA	1:65:B:SER:C	4	4.88
(1,5)	1:43:A:THR:C	1:44:A:LEU:N	1:44:A:LEU:CA	1:44:A:LEU:C	6	4.86
(1,348)	1:163:B:ASN:N	1:163:B:ASN:CA	1:163:B:ASN:C	1:164:B:MET:N	1	4.84
(1,217)	1:67:A:THR:N	1:67:A:THR:CA	1:67:A:THR:C	1:68:A:SER:N	6	4.84
(1,347)	1:163:A:ASN:N	1:163:A:ASN:CA	1:163:A:ASN:C	1:164:A:MET:N	8	4.82
(1,132)	1:132:B:ASP:C	1:133:B:PRO:N	1:133:B:PRO:CA	1:133:B:PRO:C	1	4.77
(1,347)	1:163:A:ASN:N	1:163:A:ASN:CA	1:163:A:ASN:C	1:164:A:MET:N	1	4.75
(1,132)	1:132:B:ASP:C	1:133:B:PRO:N	1:133:B:PRO:CA	1:133:B:PRO:C	2	4.7
(1,276)	1:105:B:VAL:N	1:105:B:VAL:CA	1:105:B:VAL:C	1:106:B:LEU:N	4	4.57
(1,214)	1:65:B:SER:N	1:65:B:SER:CA	1:65:B:SER:C	1:66:B:LYS:N	8	4.57
(1,311)	1:136:A:THR:N	1:136:A:THR:CA	1:136:A:THR:C	1:137:A:VAL:N	7	4.52
(1,312)	1:136:B:THR:N	1:136:B:THR:CA	1:136:B:THR:C	1:137:B:VAL:N	4	4.5
(1,311)	1:136:A:THR:N	1:136:A:THR:CA	1:136:A:THR:C	1:137:A:VAL:N	9	4.5
(1,347)	1:163:A:ASN:N	1:163:A:ASN:CA	1:163:A:ASN:C	1:164:A:MET:N	2	4.48
(1,347)	1:163:A:ASN:N	1:163:A:ASN:CA	1:163:A:ASN:C	1:164:A:MET:N	5	4.48
(1,262)	1:97:B:ILE:N	1:97:B:ILE:CA	1:97:B:ILE:C	1:98:B:GLN:N	7	4.47
(1,204)	1:60:B:GLU:N	1:60:B:GLU:CA	1:60:B:GLU:C	1:61:B:ALA:N	7	4.44
(1,35)	1:65:A:SER:C	1:66:A:LYS:N	1:66:A:LYS:CA	1:66:A:LYS:C	3	4.43
(1,348)	1:163:B:ASN:N	1:163:B:ASN:CA	1:163:B:ASN:C	1:164:B:MET:N	10	4.41
(1,84)	1:96:B:GLU:C	1:97:B:ILE:N	1:97:B:ILE:CA	1:97:B:ILE:C	4	4.4
(1,347)	1:163:A:ASN:N	1:163:A:ASN:CA	1:163:A:ASN:C	1:164:A:MET:N	4	4.38
(1,281)	1:108:A:ASN:N	1:108:A:ASN:CA	1:108:A:ASN:C	1:109:A:LEU:N	8	4.37
(1,203)	1:60:A:GLU:N	1:60:A:GLU:CA	1:60:A:GLU:C	1:61:A:ALA:N	9	4.37
(1,200)	1:58:B:TYR:N	1:58:B:TYR:CA	1:58:B:TYR:C	1:59:B:GLU:N	3	4.37
(1,213)	1:65:A:SER:N	1:65:A:SER:CA	1:65:A:SER:C	1:66:A:LYS:N	3	4.33
(1,20)	1:57:B:THR:C	1:58:B:TYR:N	1:58:B:TYR:CA	1:58:B:TYR:C	6	4.32
(1,89)	1:99:A:LYS:C	1:100:A:LEU:N	1:100:A:LEU:CA	1:100:A:LEU:C	3	4.3
(1,132)	1:132:B:ASP:C	1:133:B:PRO:N	1:133:B:PRO:CA	1:133:B:PRO:C	3	4.28
(1,348)	1:163:B:ASN:N	1:163:B:ASN:CA	1:163:B:ASN:C	1:164:B:MET:N	9	4.26
(1,162)	1:158:B:ALA:C	1:159:B:LEU:N	1:159:B:LEU:CA	1:159:B:LEU:C	6	4.26
(1,4)	1:42:B:GLN:C	1:43:B:THR:N	1:43:B:THR:CA	1:43:B:THR:C	6	4.25
(1,163)	1:159:A:LEU:C	1:160:A:LEU:N	1:160:A:LEU:CA	1:160:A:LEU:C	9	4.21
(1,34)	1:64:B:LYS:C	1:65:B:SER:N	1:65:B:SER:CA	1:65:B:SER:C	1	4.15
(1,352)	1:165:B:LYS:N	1:165:B:LYS:CA	1:165:B:LYS:C	1:166:B:LYS:N	1	4.14

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,348)	1:163:B:ASN:N	1:163:B:ASN:CA	1:163:B:ASN:C	1:164:B:MET:N	2	4.1
(1,347)	1:163:A:ASN:N	1:163:A:ASN:CA	1:163:A:ASN:C	1:164:A:MET:N	7	4.1
(1,64)	1:84:B:SER:C	1:85:B:GLN:N	1:85:B:GLN:CA	1:85:B:GLN:C	9	4.1
(1,84)	1:96:B:GLU:C	1:97:B:ILE:N	1:97:B:ILE:CA	1:97:B:ILE:C	8	4.09
(1,214)	1:65:B:SER:N	1:65:B:SER:CA	1:65:B:SER:C	1:66:B:LYS:N	2	4.08
(1,312)	1:136:B:THR:N	1:136:B:THR:CA	1:136:B:THR:C	1:137:B:VAL:N	5	4.07
(1,347)	1:163:A:ASN:N	1:163:A:ASN:CA	1:163:A:ASN:C	1:164:A:MET:N	6	4.06
(1,261)	1:97:A:ILE:N	1:97:A:ILE:CA	1:97:A:ILE:C	1:98:A:GLN:N	5	4.05
(1,348)	1:163:B:ASN:N	1:163:B:ASN:CA	1:163:B:ASN:C	1:164:B:MET:N	7	4.04
(1,262)	1:97:B:ILE:N	1:97:B:ILE:CA	1:97:B:ILE:C	1:98:B:GLN:N	8	4.04
(1,11)	1:47:A:GLY:C	1:48:A:TRP:N	1:48:A:TRP:CA	1:48:A:TRP:C	9	4.04
(1,351)	1:165:A:LYS:N	1:165:A:LYS:CA	1:165:A:LYS:C	1:166:A:LYS:N	7	4.01
(1,351)	1:165:A:LYS:N	1:165:A:LYS:CA	1:165:A:LYS:C	1:166:A:LYS:N	1	4.0
(1,351)	1:165:A:LYS:N	1:165:A:LYS:CA	1:165:A:LYS:C	1:166:A:LYS:N	3	3.97
(1,211)	1:64:A:LYS:N	1:64:A:LYS:CA	1:64:A:LYS:C	1:65:A:SER:N	4	3.96
(1,83)	1:96:A:GLU:C	1:97:A:ILE:N	1:97:A:ILE:CA	1:97:A:ILE:C	7	3.95
(1,188)	1:45:B:SER:N	1:45:B:SER:CA	1:45:B:SER:C	1:46:B:ARG:N	6	3.94
(1,348)	1:163:B:ASN:N	1:163:B:ASN:CA	1:163:B:ASN:C	1:164:B:MET:N	5	3.93
(1,311)	1:136:A:THR:N	1:136:A:THR:CA	1:136:A:THR:C	1:137:A:VAL:N	2	3.92
(1,163)	1:159:A:LEU:C	1:160:A:LEU:N	1:160:A:LEU:CA	1:160:A:LEU:C	6	3.92
(1,261)	1:97:A:ILE:N	1:97:A:ILE:CA	1:97:A:ILE:C	1:98:A:GLN:N	8	3.86
(1,351)	1:165:A:LYS:N	1:165:A:LYS:CA	1:165:A:LYS:C	1:166:A:LYS:N	8	3.85
(1,131)	1:132:A:ASP:C	1:133:A:PRO:N	1:133:A:PRO:CA	1:133:A:PRO:C	8	3.85
(1,7)	1:44:A:LEU:C	1:45:A:SER:N	1:45:A:SER:CA	1:45:A:SER:C	3	3.85
(1,5)	1:43:A:THR:C	1:44:A:LEU:N	1:44:A:LEU:CA	1:44:A:LEU:C	8	3.81
(1,312)	1:136:B:THR:N	1:136:B:THR:CA	1:136:B:THR:C	1:137:B:VAL:N	1	3.79
(1,351)	1:165:A:LYS:N	1:165:A:LYS:CA	1:165:A:LYS:C	1:166:A:LYS:N	2	3.77
(1,347)	1:163:A:ASN:N	1:163:A:ASN:CA	1:163:A:ASN:C	1:164:A:MET:N	9	3.76
(1,261)	1:97:A:ILE:N	1:97:A:ILE:CA	1:97:A:ILE:C	1:98:A:GLN:N	7	3.76
(1,213)	1:65:A:SER:N	1:65:A:SER:CA	1:65:A:SER:C	1:66:A:LYS:N	10	3.75
(1,261)	1:97:A:ILE:N	1:97:A:ILE:CA	1:97:A:ILE:C	1:98:A:GLN:N	4	3.74
(1,164)	1:159:B:LEU:C	1:160:B:LEU:N	1:160:B:LEU:CA	1:160:B:LEU:C	6	3.73
(1,32)	1:63:B:TYR:C	1:64:B:LYS:N	1:64:B:LYS:CA	1:64:B:LYS:C	8	3.71
(1,351)	1:165:A:LYS:N	1:165:A:LYS:CA	1:165:A:LYS:C	1:166:A:LYS:N	4	3.68
(1,6)	1:43:B:THR:C	1:44:B:LEU:N	1:44:B:LEU:CA	1:44:B:LEU:C	4	3.67
(1,32)	1:63:B:TYR:C	1:64:B:LYS:N	1:64:B:LYS:CA	1:64:B:LYS:C	5	3.66
(1,352)	1:165:B:LYS:N	1:165:B:LYS:CA	1:165:B:LYS:C	1:166:B:LYS:N	7	3.63
(1,335)	1:157:A:THR:N	1:157:A:THR:CA	1:157:A:THR:C	1:158:A:ALA:N	9	3.63
(1,348)	1:163:B:ASN:N	1:163:B:ASN:CA	1:163:B:ASN:C	1:164:B:MET:N	6	3.61
(1,282)	1:108:B:ASN:N	1:108:B:ASN:CA	1:108:B:ASN:C	1:109:B:LEU:N	8	3.57
(1,8)	1:44:B:LEU:C	1:45:B:SER:N	1:45:B:SER:CA	1:45:B:SER:C	6	3.57
(1,351)	1:165:A:LYS:N	1:165:A:LYS:CA	1:165:A:LYS:C	1:166:A:LYS:N	10	3.56
(1,308)	1:133:B:PRO:N	1:133:B:PRO:CA	1:133:B:PRO:C	1:134:B:SER:N	2	3.53
(1,352)	1:165:B:LYS:N	1:165:B:LYS:CA	1:165:B:LYS:C	1:166:B:LYS:N	8	3.51
(1,164)	1:159:B:LEU:C	1:160:B:LEU:N	1:160:B:LEU:CA	1:160:B:LEU:C	9	3.51
(1,68)	1:86:B:ALA:C	1:87:B:LEU:N	1:87:B:LEU:CA	1:87:B:LEU:C	8	3.51
(1,152)	1:152:B:TYR:C	1:153:B:GLU:N	1:153:B:GLU:CA	1:153:B:GLU:C	9	3.5
(1,192)	1:48:B:TRP:N	1:48:B:TRP:CA	1:48:B:TRP:C	1:49:B:GLY:N	6	3.49
(1,352)	1:165:B:LYS:N	1:165:B:LYS:CA	1:165:B:LYS:C	1:166:B:LYS:N	3	3.48
(1,3)	1:42:A:GLN:C	1:43:A:THR:N	1:43:A:THR:CA	1:43:A:THR:C	7	3.47
(1,192)	1:48:B:TRP:N	1:48:B:TRP:CA	1:48:B:TRP:C	1:49:B:GLY:N	7	3.45

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,68)	1:86:B:ALA:C	1:87:B:LEU:N	1:87:B:LEU:CA	1:87:B:LEU:C	4	3.45
(1,68)	1:86:B:ALA:C	1:87:B:LEU:N	1:87:B:LEU:CA	1:87:B:LEU:C	10	3.42
(1,75)	1:90:A:VAL:C	1:91:A:PHE:N	1:91:A:PHE:CA	1:91:A:PHE:C	4	3.41
(1,352)	1:165:B:LYS:N	1:165:B:LYS:CA	1:165:B:LYS:C	1:166:B:LYS:N	2	3.4
(1,237)	1:80:A:GLU:N	1:80:A:GLU:CA	1:80:A:GLU:C	1:81:A:CYS:N	1	3.39
(1,196)	1:54:B:TRP:N	1:54:B:TRP:CA	1:54:B:TRP:C	1:55:B:THR:N	6	3.39
(1,145)	1:146:A:SER:C	1:147:A:ASN:N	1:147:A:ASN:CA	1:147:A:ASN:C	10	3.36
(1,67)	1:86:A:ALA:C	1:87:A:LEU:N	1:87:A:LEU:CA	1:87:A:LEU:C	1	3.36
(1,243)	1:85:A:GLN:N	1:85:A:GLN:CA	1:85:A:GLN:C	1:86:A:ALA:N	3	3.35
(1,162)	1:158:B:ALA:C	1:159:B:LEU:N	1:159:B:LEU:CA	1:159:B:LEU:C	2	3.34
(1,67)	1:86:A:ALA:C	1:87:A:LEU:N	1:87:A:LEU:CA	1:87:A:LEU:C	4	3.33
(1,164)	1:159:B:LEU:C	1:160:B:LEU:N	1:160:B:LEU:CA	1:160:B:LEU:C	8	3.3
(1,75)	1:90:A:VAL:C	1:91:A:PHE:N	1:91:A:PHE:CA	1:91:A:PHE:C	2	3.29
(1,31)	1:63:A:TYR:C	1:64:A:LYS:N	1:64:A:LYS:CA	1:64:A:LYS:C	8	3.28
(1,76)	1:90:B:VAL:C	1:91:B:PHE:N	1:91:B:PHE:CA	1:91:B:PHE:C	10	3.27
(1,281)	1:108:A:ASN:N	1:108:A:ASN:CA	1:108:A:ASN:C	1:109:A:LEU:N	2	3.25
(1,67)	1:86:A:ALA:C	1:87:A:LEU:N	1:87:A:LEU:CA	1:87:A:LEU:C	8	3.24
(1,163)	1:159:A:LEU:C	1:160:A:LEU:N	1:160:A:LEU:CA	1:160:A:LEU:C	2	3.23
(1,84)	1:96:B:GLU:C	1:97:B:ILE:N	1:97:B:ILE:CA	1:97:B:ILE:C	7	3.23
(1,11)	1:47:A:GLY:C	1:48:A:TRP:N	1:48:A:TRP:CA	1:48:A:TRP:C	4	3.23
(1,75)	1:90:A:VAL:C	1:91:A:PHE:N	1:91:A:PHE:CA	1:91:A:PHE:C	1	3.21
(1,288)	1:112:B:GLU:N	1:112:B:GLU:CA	1:112:B:GLU:C	1:113:B:THR:N	9	3.2
(1,9)	1:45:A:SER:C	1:46:A:ARG:N	1:46:A:ARG:CA	1:46:A:ARG:C	4	3.2
(1,83)	1:96:A:GLU:C	1:97:A:ILE:N	1:97:A:ILE:CA	1:97:A:ILE:C	5	3.19
(1,75)	1:90:A:VAL:C	1:91:A:PHE:N	1:91:A:PHE:CA	1:91:A:PHE:C	8	3.19
(1,75)	1:90:A:VAL:C	1:91:A:PHE:N	1:91:A:PHE:CA	1:91:A:PHE:C	5	3.17
(1,76)	1:90:B:VAL:C	1:91:B:PHE:N	1:91:B:PHE:CA	1:91:B:PHE:C	1	3.16
(1,75)	1:90:A:VAL:C	1:91:A:PHE:N	1:91:A:PHE:CA	1:91:A:PHE:C	3	3.16
(1,352)	1:165:B:LYS:N	1:165:B:LYS:CA	1:165:B:LYS:C	1:166:B:LYS:N	5	3.14
(1,164)	1:159:B:LEU:C	1:160:B:LEU:N	1:160:B:LEU:CA	1:160:B:LEU:C	10	3.14
(1,282)	1:108:B:ASN:N	1:108:B:ASN:CA	1:108:B:ASN:C	1:109:B:LEU:N	5	3.13
(1,164)	1:159:B:LEU:C	1:160:B:LEU:N	1:160:B:LEU:CA	1:160:B:LEU:C	2	3.13
(1,209)	1:63:A:TYR:N	1:63:A:TYR:CA	1:63:A:TYR:C	1:64:A:LYS:N	9	3.12
(1,5)	1:43:A:THR:C	1:44:A:LEU:N	1:44:A:LEU:CA	1:44:A:LEU:C	4	3.12
(1,335)	1:157:A:THR:N	1:157:A:THR:CA	1:157:A:THR:C	1:158:A:ALA:N	6	3.11
(1,63)	1:84:A:SER:C	1:85:A:GLN:N	1:85:A:GLN:CA	1:85:A:GLN:C	2	3.11
(1,7)	1:44:A:LEU:C	1:45:A:SER:N	1:45:A:SER:CA	1:45:A:SER:C	8	3.11
(1,83)	1:96:A:GLU:C	1:97:A:ILE:N	1:97:A:ILE:CA	1:97:A:ILE:C	1	3.08
(1,76)	1:90:B:VAL:C	1:91:B:PHE:N	1:91:B:PHE:CA	1:91:B:PHE:C	2	3.07
(1,163)	1:159:A:LEU:C	1:160:A:LEU:N	1:160:A:LEU:CA	1:160:A:LEU:C	5	3.06
(1,281)	1:108:A:ASN:N	1:108:A:ASN:CA	1:108:A:ASN:C	1:109:A:LEU:N	10	3.05
(1,84)	1:96:B:GLU:C	1:97:B:ILE:N	1:97:B:ILE:CA	1:97:B:ILE:C	1	3.03
(1,68)	1:86:B:ALA:C	1:87:B:LEU:N	1:87:B:LEU:CA	1:87:B:LEU:C	2	3.03
(1,3)	1:42:A:GLN:C	1:43:A:THR:N	1:43:A:THR:CA	1:43:A:THR:C	4	3.02
(1,163)	1:159:A:LEU:C	1:160:A:LEU:N	1:160:A:LEU:CA	1:160:A:LEU:C	10	2.98
(1,63)	1:84:A:SER:C	1:85:A:GLN:N	1:85:A:GLN:CA	1:85:A:GLN:C	6	2.95
(1,13)	1:49:A:GLY:C	1:50:A:ASP:N	1:50:A:ASP:CA	1:50:A:ASP:C	4	2.95
(1,75)	1:90:A:VAL:C	1:91:A:PHE:N	1:91:A:PHE:CA	1:91:A:PHE:C	7	2.94
(1,163)	1:159:A:LEU:C	1:160:A:LEU:N	1:160:A:LEU:CA	1:160:A:LEU:C	8	2.93
(1,36)	1:65:B:SER:C	1:66:B:LYS:N	1:66:B:LYS:CA	1:66:B:LYS:C	1	2.92
(1,193)	1:50:A:ASP:N	1:50:A:ASP:CA	1:50:A:ASP:C	1:51:A:GLN:N	5	2.91

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,163)	1:159:A:LEU:C	1:160:A:LEU:N	1:160:A:LEU:CA	1:160:A:LEU:C	4	2.91
(1,275)	1:105:A:VAL:N	1:105:A:VAL:CA	1:105:A:VAL:C	1:106:A:LEU:N	5	2.9
(1,83)	1:96:A:GLU:C	1:97:A:ILE:N	1:97:A:ILE:CA	1:97:A:ILE:C	2	2.9
(1,12)	1:47:B:GLY:C	1:48:B:TRP:N	1:48:B:TRP:CA	1:48:B:TRP:C	1	2.9
(1,76)	1:90:B:VAL:C	1:91:B:PHE:N	1:91:B:PHE:CA	1:91:B:PHE:C	7	2.89
(1,204)	1:60:B:GLU:N	1:60:B:GLU:CA	1:60:B:GLU:C	1:61:B:ALA:N	1	2.88
(1,351)	1:165:A:LYS:N	1:165:A:LYS:CA	1:165:A:LYS:C	1:166:A:LYS:N	9	2.86
(1,351)	1:165:A:LYS:N	1:165:A:LYS:CA	1:165:A:LYS:C	1:166:A:LYS:N	5	2.85
(1,164)	1:159:B:LEU:C	1:160:B:LEU:N	1:160:B:LEU:CA	1:160:B:LEU:C	5	2.84
(1,172)	1:163:B:ASN:C	1:164:B:MET:N	1:164:B:MET:CA	1:164:B:MET:C	3	2.83
(1,161)	1:158:A:ALA:C	1:159:A:LEU:N	1:159:A:LEU:CA	1:159:A:LEU:C	2	2.83
(1,6)	1:43:B:THR:C	1:44:B:LEU:N	1:44:B:LEU:CA	1:44:B:LEU:C	5	2.82
(1,68)	1:86:B:ALA:C	1:87:B:LEU:N	1:87:B:LEU:CA	1:87:B:LEU:C	1	2.81
(1,20)	1:57:B:THR:C	1:58:B:TYR:N	1:58:B:TYR:CA	1:58:B:TYR:C	4	2.81
(1,163)	1:159:A:LEU:C	1:160:A:LEU:N	1:160:A:LEU:CA	1:160:A:LEU:C	1	2.78
(1,163)	1:159:A:LEU:C	1:160:A:LEU:N	1:160:A:LEU:CA	1:160:A:LEU:C	7	2.78
(1,162)	1:158:B:ALA:C	1:159:B:LEU:N	1:159:B:LEU:CA	1:159:B:LEU:C	5	2.76
(1,212)	1:64:B:LYS:N	1:64:B:LYS:CA	1:64:B:LYS:C	1:65:B:SER:N	7	2.75
(1,195)	1:54:A:TRP:N	1:54:A:TRP:CA	1:54:A:TRP:C	1:55:A:THR:N	9	2.75
(1,83)	1:96:A:GLU:C	1:97:A:ILE:N	1:97:A:ILE:CA	1:97:A:ILE:C	3	2.74
(1,352)	1:165:B:LYS:N	1:165:B:LYS:CA	1:165:B:LYS:C	1:166:B:LYS:N	4	2.72
(1,171)	1:163:A:ASN:C	1:164:A:MET:N	1:164:A:MET:CA	1:164:A:MET:C	10	2.72
(1,151)	1:152:A:TYR:C	1:153:A:GLU:N	1:153:A:GLU:CA	1:153:A:GLU:C	9	2.72
(1,352)	1:165:B:LYS:N	1:165:B:LYS:CA	1:165:B:LYS:C	1:166:B:LYS:N	10	2.7
(1,164)	1:159:B:LEU:C	1:160:B:LEU:N	1:160:B:LEU:CA	1:160:B:LEU:C	7	2.7
(1,119)	1:119:A:SER:C	1:120:A:PRO:N	1:120:A:PRO:CA	1:120:A:PRO:C	6	2.7
(1,76)	1:90:B:VAL:C	1:91:B:PHE:N	1:91:B:PHE:CA	1:91:B:PHE:C	9	2.69
(1,262)	1:97:B:ILE:N	1:97:B:ILE:CA	1:97:B:ILE:C	1:98:B:GLN:N	4	2.67
(1,276)	1:105:B:VAL:N	1:105:B:VAL:CA	1:105:B:VAL:C	1:106:B:LEU:N	6	2.66
(1,204)	1:60:B:GLU:N	1:60:B:GLU:CA	1:60:B:GLU:C	1:61:B:ALA:N	4	2.65
(1,101)	1:106:A:LEU:C	1:107:A:LEU:N	1:107:A:LEU:CA	1:107:A:LEU:C	7	2.63
(1,76)	1:90:B:VAL:C	1:91:B:PHE:N	1:91:B:PHE:CA	1:91:B:PHE:C	5	2.6
(1,16)	1:53:B:ILE:C	1:54:B:TRP:N	1:54:B:TRP:CA	1:54:B:TRP:C	10	2.6
(1,76)	1:90:B:VAL:C	1:91:B:PHE:N	1:91:B:PHE:CA	1:91:B:PHE:C	8	2.59
(1,3)	1:42:A:GLN:C	1:43:A:THR:N	1:43:A:THR:CA	1:43:A:THR:C	9	2.59
(1,311)	1:136:A:THR:N	1:136:A:THR:CA	1:136:A:THR:C	1:137:A:VAL:N	3	2.58
(1,276)	1:105:B:VAL:N	1:105:B:VAL:CA	1:105:B:VAL:C	1:106:B:LEU:N	7	2.58
(1,196)	1:54:B:TRP:N	1:54:B:TRP:CA	1:54:B:TRP:C	1:55:B:THR:N	2	2.58
(1,131)	1:132:A:ASP:C	1:133:A:PRO:N	1:133:A:PRO:CA	1:133:A:PRO:C	6	2.56
(1,83)	1:96:A:GLU:C	1:97:A:ILE:N	1:97:A:ILE:CA	1:97:A:ILE:C	8	2.54
(1,5)	1:43:A:THR:C	1:44:A:LEU:N	1:44:A:LEU:CA	1:44:A:LEU:C	10	2.54
(1,84)	1:96:B:GLU:C	1:97:B:ILE:N	1:97:B:ILE:CA	1:97:B:ILE:C	9	2.53
(1,6)	1:43:B:THR:C	1:44:B:LEU:N	1:44:B:LEU:CA	1:44:B:LEU:C	3	2.53
(1,83)	1:96:A:GLU:C	1:97:A:ILE:N	1:97:A:ILE:CA	1:97:A:ILE:C	9	2.52
(1,8)	1:44:B:LEU:C	1:45:B:SER:N	1:45:B:SER:CA	1:45:B:SER:C	10	2.5
(1,172)	1:163:B:ASN:C	1:164:B:MET:N	1:164:B:MET:CA	1:164:B:MET:C	10	2.49
(1,64)	1:84:B:SER:C	1:85:B:GLN:N	1:85:B:GLN:CA	1:85:B:GLN:C	5	2.49
(1,213)	1:65:A:SER:N	1:65:A:SER:CA	1:65:A:SER:C	1:66:A:LYS:N	7	2.48
(1,6)	1:43:B:THR:C	1:44:B:LEU:N	1:44:B:LEU:CA	1:44:B:LEU:C	9	2.48
(1,352)	1:165:B:LYS:N	1:165:B:LYS:CA	1:165:B:LYS:C	1:166:B:LYS:N	9	2.47
(1,244)	1:85:B:GLN:N	1:85:B:GLN:CA	1:85:B:GLN:C	1:86:B:ALA:N	6	2.47

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,164)	1:159:B:LEU:C	1:160:B:LEU:N	1:160:B:LEU:CA	1:160:B:LEU:C	1	2.46
(1,172)	1:163:B:ASN:C	1:164:B:MET:N	1:164:B:MET:CA	1:164:B:MET:C	4	2.45
(1,6)	1:43:B:THR:C	1:44:B:LEU:N	1:44:B:LEU:CA	1:44:B:LEU:C	7	2.44
(1,161)	1:158:A:ALA:C	1:159:A:LEU:N	1:159:A:LEU:CA	1:159:A:LEU:C	7	2.43
(1,191)	1:48:A:TRP:N	1:48:A:TRP:CA	1:48:A:TRP:C	1:49:A:GLY:N	2	2.42
(1,295)	1:118:A:LEU:N	1:118:A:LEU:CA	1:118:A:LEU:C	1:119:A:SER:N	9	2.41
(1,84)	1:96:B:GLU:C	1:97:B:ILE:N	1:97:B:ILE:CA	1:97:B:ILE:C	2	2.38
(1,191)	1:48:A:TRP:N	1:48:A:TRP:CA	1:48:A:TRP:C	1:49:A:GLY:N	9	2.37
(1,275)	1:105:A:VAL:N	1:105:A:VAL:CA	1:105:A:VAL:C	1:106:A:LEU:N	8	2.36
(1,75)	1:90:A:VAL:C	1:91:A:PHE:N	1:91:A:PHE:CA	1:91:A:PHE:C	10	2.36
(1,172)	1:163:B:ASN:C	1:164:B:MET:N	1:164:B:MET:CA	1:164:B:MET:C	8	2.35
(1,131)	1:132:A:ASP:C	1:133:A:PRO:N	1:133:A:PRO:CA	1:133:A:PRO:C	5	2.34
(1,67)	1:86:A:ALA:C	1:87:A:LEU:N	1:87:A:LEU:CA	1:87:A:LEU:C	10	2.34
(1,83)	1:96:A:GLU:C	1:97:A:ILE:N	1:97:A:ILE:CA	1:97:A:ILE:C	4	2.33
(1,9)	1:45:A:SER:C	1:46:A:ARG:N	1:46:A:ARG:CA	1:46:A:ARG:C	3	2.32
(1,214)	1:65:B:SER:N	1:65:B:SER:CA	1:65:B:SER:C	1:66:B:LYS:N	10	2.28
(1,171)	1:163:A:ASN:C	1:164:A:MET:N	1:164:A:MET:CA	1:164:A:MET:C	1	2.28
(1,84)	1:96:B:GLU:C	1:97:B:ILE:N	1:97:B:ILE:CA	1:97:B:ILE:C	5	2.28
(1,351)	1:165:A:LYS:N	1:165:A:LYS:CA	1:165:A:LYS:C	1:166:A:LYS:N	6	2.27
(1,67)	1:86:A:ALA:C	1:87:A:LEU:N	1:87:A:LEU:CA	1:87:A:LEU:C	2	2.27
(1,312)	1:136:B:THR:N	1:136:B:THR:CA	1:136:B:THR:C	1:137:B:VAL:N	3	2.26
(1,6)	1:43:B:THR:C	1:44:B:LEU:N	1:44:B:LEU:CA	1:44:B:LEU:C	8	2.25
(1,76)	1:90:B:VAL:C	1:91:B:PHE:N	1:91:B:PHE:CA	1:91:B:PHE:C	3	2.24
(1,75)	1:90:A:VAL:C	1:91:A:PHE:N	1:91:A:PHE:CA	1:91:A:PHE:C	9	2.24
(1,337)	1:158:A:ALA:N	1:158:A:ALA:CA	1:158:A:ALA:C	1:159:A:LEU:N	3	2.22
(1,32)	1:63:B:TYR:C	1:64:B:LYS:N	1:64:B:LYS:CA	1:64:B:LYS:C	10	2.2
(1,5)	1:43:A:THR:C	1:44:A:LEU:N	1:44:A:LEU:CA	1:44:A:LEU:C	2	2.19
(1,188)	1:45:B:SER:N	1:45:B:SER:CA	1:45:B:SER:C	1:46:B:ARG:N	8	2.18
(1,162)	1:158:B:ALA:C	1:159:B:LEU:N	1:159:B:LEU:CA	1:159:B:LEU:C	10	2.18
(1,161)	1:158:A:ALA:C	1:159:A:LEU:N	1:159:A:LEU:CA	1:159:A:LEU:C	5	2.17
(1,9)	1:45:A:SER:C	1:46:A:ARG:N	1:46:A:ARG:CA	1:46:A:ARG:C	10	2.17
(1,75)	1:90:A:VAL:C	1:91:A:PHE:N	1:91:A:PHE:CA	1:91:A:PHE:C	6	2.15
(1,32)	1:63:B:TYR:C	1:64:B:LYS:N	1:64:B:LYS:CA	1:64:B:LYS:C	7	2.15
(1,296)	1:118:B:LEU:N	1:118:B:LEU:CA	1:118:B:LEU:C	1:119:B:SER:N	2	2.13
(1,172)	1:163:B:ASN:C	1:164:B:MET:N	1:164:B:MET:CA	1:164:B:MET:C	1	2.11
(1,161)	1:158:A:ALA:C	1:159:A:LEU:N	1:159:A:LEU:CA	1:159:A:LEU:C	1	2.11
(1,32)	1:63:B:TYR:C	1:64:B:LYS:N	1:64:B:LYS:CA	1:64:B:LYS:C	2	2.1
(1,171)	1:163:A:ASN:C	1:164:A:MET:N	1:164:A:MET:CA	1:164:A:MET:C	8	2.09
(1,10)	1:45:B:SER:C	1:46:B:ARG:N	1:46:B:ARG:CA	1:46:B:ARG:C	3	2.09
(1,171)	1:163:A:ASN:C	1:164:A:MET:N	1:164:A:MET:CA	1:164:A:MET:C	2	2.07
(1,68)	1:86:B:ALA:C	1:87:B:LEU:N	1:87:B:LEU:CA	1:87:B:LEU:C	6	2.06
(1,230)	1:75:B:ILE:N	1:75:B:ILE:CA	1:75:B:ILE:C	1:76:B:HIS:N	6	2.04
(1,161)	1:158:A:ALA:C	1:159:A:LEU:N	1:159:A:LEU:CA	1:159:A:LEU:C	8	2.04
(1,50)	1:74:B:ILE:C	1:75:B:ILE:N	1:75:B:ILE:CA	1:75:B:ILE:C	8	2.04
(1,275)	1:105:A:VAL:N	1:105:A:VAL:CA	1:105:A:VAL:C	1:106:A:LEU:N	9	1.99
(1,172)	1:163:B:ASN:C	1:164:B:MET:N	1:164:B:MET:CA	1:164:B:MET:C	2	1.99
(1,3)	1:42:A:GLN:C	1:43:A:THR:N	1:43:A:THR:CA	1:43:A:THR:C	6	1.99
(1,63)	1:84:A:SER:C	1:85:A:GLN:N	1:85:A:GLN:CA	1:85:A:GLN:C	10	1.97
(1,14)	1:49:B:GLY:C	1:50:B:ASP:N	1:50:B:ASP:CA	1:50:B:ASP:C	3	1.97
(1,213)	1:65:A:SER:N	1:65:A:SER:CA	1:65:A:SER:C	1:66:A:LYS:N	5	1.96
(1,64)	1:84:B:SER:C	1:85:B:GLN:N	1:85:B:GLN:CA	1:85:B:GLN:C	6	1.96

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,151)	1:152:A:TYR:C	1:153:A:GLU:N	1:153:A:GLU:CA	1:153:A:GLU:C	6	1.95
(1,35)	1:65:A:SER:C	1:66:A:LYS:N	1:66:A:LYS:CA	1:66:A:LYS:C	2	1.95
(1,34)	1:64:B:LYS:C	1:65:B:SER:N	1:65:B:SER:CA	1:65:B:SER:C	10	1.95
(1,282)	1:108:B:ASN:N	1:108:B:ASN:CA	1:108:B:ASN:C	1:109:B:LEU:N	10	1.94
(1,68)	1:86:B:ALA:C	1:87:B:LEU:N	1:87:B:LEU:CA	1:87:B:LEU:C	7	1.93
(1,64)	1:84:B:SER:C	1:85:B:GLN:N	1:85:B:GLN:CA	1:85:B:GLN:C	4	1.93
(1,63)	1:84:A:SER:C	1:85:A:GLN:N	1:85:A:GLN:CA	1:85:A:GLN:C	8	1.93
(1,162)	1:158:B:ALA:C	1:159:B:LEU:N	1:159:B:LEU:CA	1:159:B:LEU:C	8	1.92
(1,204)	1:60:B:GLU:N	1:60:B:GLU:CA	1:60:B:GLU:C	1:61:B:ALA:N	8	1.91
(1,196)	1:54:B:TRP:N	1:54:B:TRP:CA	1:54:B:TRP:C	1:55:B:THR:N	5	1.91
(1,187)	1:45:A:SER:N	1:45:A:SER:CA	1:45:A:SER:C	1:46:A:ARG:N	1	1.86
(1,172)	1:163:B:ASN:C	1:164:B:MET:N	1:164:B:MET:CA	1:164:B:MET:C	6	1.86
(1,164)	1:159:B:LEU:C	1:160:B:LEU:N	1:160:B:LEU:CA	1:160:B:LEU:C	4	1.86
(1,337)	1:158:A:ALA:N	1:158:A:ALA:CA	1:158:A:ALA:C	1:159:A:LEU:N	10	1.85
(1,281)	1:108:A:ASN:N	1:108:A:ASN:CA	1:108:A:ASN:C	1:109:A:LEU:N	4	1.84
(1,275)	1:105:A:VAL:N	1:105:A:VAL:CA	1:105:A:VAL:C	1:106:A:LEU:N	1	1.84
(1,338)	1:158:B:ALA:N	1:158:B:ALA:CA	1:158:B:ALA:C	1:159:B:LEU:N	7	1.83
(1,214)	1:65:B:SER:N	1:65:B:SER:CA	1:65:B:SER:C	1:66:B:LYS:N	5	1.83
(1,36)	1:65:B:SER:C	1:66:B:LYS:N	1:66:B:LYS:CA	1:66:B:LYS:C	2	1.83
(1,6)	1:43:B:THR:C	1:44:B:LEU:N	1:44:B:LEU:CA	1:44:B:LEU:C	2	1.82
(1,11)	1:47:A:GLY:C	1:48:A:TRP:N	1:48:A:TRP:CA	1:48:A:TRP:C	1	1.76
(1,203)	1:60:A:GLU:N	1:60:A:GLU:CA	1:60:A:GLU:C	1:61:A:ALA:N	3	1.75
(1,120)	1:119:B:SER:C	1:120:B:PRO:N	1:120:B:PRO:CA	1:120:B:PRO:C	3	1.73
(1,67)	1:86:A:ALA:C	1:87:A:LEU:N	1:87:A:LEU:CA	1:87:A:LEU:C	7	1.7
(1,276)	1:105:B:VAL:N	1:105:B:VAL:CA	1:105:B:VAL:C	1:106:B:LEU:N	9	1.66
(1,171)	1:163:A:ASN:C	1:164:A:MET:N	1:164:A:MET:CA	1:164:A:MET:C	4	1.65
(1,163)	1:159:A:LEU:C	1:160:A:LEU:N	1:160:A:LEU:CA	1:160:A:LEU:C	3	1.64
(1,32)	1:63:B:TYR:C	1:64:B:LYS:N	1:64:B:LYS:CA	1:64:B:LYS:C	4	1.64
(1,63)	1:84:A:SER:C	1:85:A:GLN:N	1:85:A:GLN:CA	1:85:A:GLN:C	5	1.63
(1,64)	1:84:B:SER:C	1:85:B:GLN:N	1:85:B:GLN:CA	1:85:B:GLN:C	7	1.62
(1,171)	1:163:A:ASN:C	1:164:A:MET:N	1:164:A:MET:CA	1:164:A:MET:C	3	1.61
(1,5)	1:43:A:THR:C	1:44:A:LEU:N	1:44:A:LEU:CA	1:44:A:LEU:C	1	1.61
(1,67)	1:86:A:ALA:C	1:87:A:LEU:N	1:87:A:LEU:CA	1:87:A:LEU:C	9	1.59
(1,187)	1:45:A:SER:N	1:45:A:SER:CA	1:45:A:SER:C	1:46:A:ARG:N	10	1.58
(1,171)	1:163:A:ASN:C	1:164:A:MET:N	1:164:A:MET:CA	1:164:A:MET:C	6	1.55
(1,336)	1:157:B:THR:N	1:157:B:THR:CA	1:157:B:THR:C	1:158:B:ALA:N	9	1.52
(1,19)	1:57:A:THR:C	1:58:A:TYR:N	1:58:A:TYR:CA	1:58:A:TYR:C	7	1.52
(1,281)	1:108:A:ASN:N	1:108:A:ASN:CA	1:108:A:ASN:C	1:109:A:LEU:N	9	1.48
(1,162)	1:158:B:ALA:C	1:159:B:LEU:N	1:159:B:LEU:CA	1:159:B:LEU:C	1	1.46
(1,63)	1:84:A:SER:C	1:85:A:GLN:N	1:85:A:GLN:CA	1:85:A:GLN:C	4	1.46
(1,64)	1:84:B:SER:C	1:85:B:GLN:N	1:85:B:GLN:CA	1:85:B:GLN:C	2	1.44
(1,161)	1:158:A:ALA:C	1:159:A:LEU:N	1:159:A:LEU:CA	1:159:A:LEU:C	4	1.43
(1,338)	1:158:B:ALA:N	1:158:B:ALA:CA	1:158:B:ALA:C	1:159:B:LEU:N	9	1.42
(1,67)	1:86:A:ALA:C	1:87:A:LEU:N	1:87:A:LEU:CA	1:87:A:LEU:C	6	1.42
(1,132)	1:132:B:ASP:C	1:133:B:PRO:N	1:133:B:PRO:CA	1:133:B:PRO:C	6	1.4
(1,90)	1:99:B:LYS:C	1:100:B:LEU:N	1:100:B:LEU:CA	1:100:B:LEU:C	10	1.4
(1,83)	1:96:A:GLU:C	1:97:A:ILE:N	1:97:A:ILE:CA	1:97:A:ILE:C	10	1.4
(1,337)	1:158:A:ALA:N	1:158:A:ALA:CA	1:158:A:ALA:C	1:159:A:LEU:N	9	1.35
(1,209)	1:63:A:TYR:N	1:63:A:TYR:CA	1:63:A:TYR:C	1:64:A:LYS:N	8	1.35
(1,68)	1:86:B:ALA:C	1:87:B:LEU:N	1:87:B:LEU:CA	1:87:B:LEU:C	9	1.34
(1,50)	1:74:B:ILE:C	1:75:B:ILE:N	1:75:B:ILE:CA	1:75:B:ILE:C	3	1.34

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,244)	1:85:B:GLN:N	1:85:B:GLN:CA	1:85:B:GLN:C	1:86:B:ALA:N	3	1.33
(1,352)	1:165:B:LYS:N	1:165:B:LYS:CA	1:165:B:LYS:C	1:166:B:LYS:N	6	1.32
(1,162)	1:158:B:ALA:C	1:159:B:LEU:N	1:159:B:LEU:CA	1:159:B:LEU:C	7	1.29
(1,295)	1:118:A:LEU:N	1:118:A:LEU:CA	1:118:A:LEU:C	1:119:A:SER:N	8	1.28
(1,64)	1:84:B:SER:C	1:85:B:GLN:N	1:85:B:GLN:CA	1:85:B:GLN:C	10	1.28
(1,172)	1:163:B:ASN:C	1:164:B:MET:N	1:164:B:MET:CA	1:164:B:MET:C	7	1.27
(1,10)	1:45:B:SER:C	1:46:B:ARG:N	1:46:B:ARG:CA	1:46:B:ARG:C	6	1.27
(1,5)	1:43:A:THR:C	1:44:A:LEU:N	1:44:A:LEU:CA	1:44:A:LEU:C	9	1.27
(1,119)	1:119:A:SER:C	1:120:A:PRO:N	1:120:A:PRO:CA	1:120:A:PRO:C	10	1.25
(1,19)	1:57:A:THR:C	1:58:A:TYR:N	1:58:A:TYR:CA	1:58:A:TYR:C	1	1.25
(1,243)	1:85:A:GLN:N	1:85:A:GLN:CA	1:85:A:GLN:C	1:86:A:ALA:N	6	1.24
(1,76)	1:90:B:VAL:C	1:91:B:PHE:N	1:91:B:PHE:CA	1:91:B:PHE:C	6	1.24
(1,20)	1:57:B:THR:C	1:58:B:TYR:N	1:58:B:TYR:CA	1:58:B:TYR:C	9	1.24
(1,171)	1:163:A:ASN:C	1:164:A:MET:N	1:164:A:MET:CA	1:164:A:MET:C	5	1.23
(1,35)	1:65:A:SER:C	1:66:A:LYS:N	1:66:A:LYS:CA	1:66:A:LYS:C	8	1.22
(1,67)	1:86:A:ALA:C	1:87:A:LEU:N	1:87:A:LEU:CA	1:87:A:LEU:C	5	1.19
(1,213)	1:65:A:SER:N	1:65:A:SER:CA	1:65:A:SER:C	1:66:A:LYS:N	6	1.18
(1,64)	1:84:B:SER:C	1:85:B:GLN:N	1:85:B:GLN:CA	1:85:B:GLN:C	1	1.17
(1,10)	1:45:B:SER:C	1:46:B:ARG:N	1:46:B:ARG:CA	1:46:B:ARG:C	5	1.17
(1,172)	1:163:B:ASN:C	1:164:B:MET:N	1:164:B:MET:CA	1:164:B:MET:C	9	1.16
(1,89)	1:99:A:LYS:C	1:100:A:LEU:N	1:100:A:LEU:CA	1:100:A:LEU:C	9	1.13
(1,4)	1:42:B:GLN:C	1:43:B:THR:N	1:43:B:THR:CA	1:43:B:THR:C	3	1.13
(1,334)	1:156:B:ASP:N	1:156:B:ASP:CA	1:156:B:ASP:C	1:157:B:THR:N	6	1.12
(1,172)	1:163:B:ASN:C	1:164:B:MET:N	1:164:B:MET:CA	1:164:B:MET:C	5	1.1
(1,131)	1:132:A:ASP:C	1:133:A:PRO:N	1:133:A:PRO:CA	1:133:A:PRO:C	10	1.09
(1,187)	1:45:A:SER:N	1:45:A:SER:CA	1:45:A:SER:C	1:46:A:ARG:N	9	1.07
(1,90)	1:99:B:LYS:C	1:100:B:LEU:N	1:100:B:LEU:CA	1:100:B:LEU:C	5	1.07