



Full wwPDB NMR Structure Validation Report ⓘ

Mar 9, 2026 – 02:12 AM UTC

PDB ID : 1QVX / pdb_00001qvz
BMRB ID : 5924
Title : SOLUTION STRUCTURE OF THE FAT DOMAIN OF FOCAL ADHESION KINASE
Authors : Gao, G.; Prutzman, K.C.; King, M.L.; DeRose, E.F.; London, R.E.; Schaller, M.D.; Campbell, S.L.
Deposited on : 2003-08-29

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

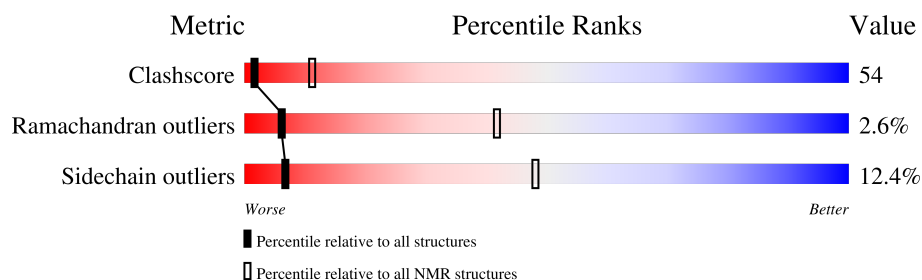
1 Overall quality at a glance

The following experimental techniques were used to determine the structure:

SOLUTION NMR

The overall completeness of chemical shifts assignment is 69%.

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	134	28% 59% 6% 7%

2 Ensemble composition and analysis

This entry contains 25 models. Model 13 is the overall representative, medoid model (most similar to other models). The authors have identified model 1 as representative, based on the following criterion: *closest to the average*.

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:920-A:1008, A:1014-A:1049 (125)	0.63	13

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

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

The models can be grouped into 3 clusters and 2 single-model clusters were found.

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

3 Entry composition [i](#)

There is only 1 type of molecule in this entry. The entry contains 2148 atoms, of which 1101 are hydrogens and 0 are deuteriums.

- Molecule 1 is a protein called Focal adhesion kinase 1.

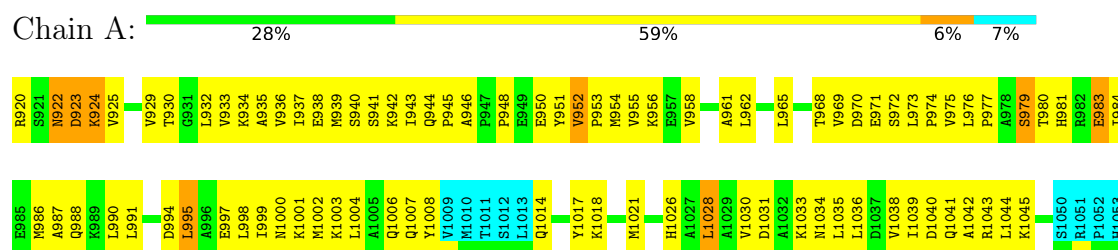
Mol	Chain	Residues	Atoms						Trace
1	A	134	Total	C	H	N	O	S	0
			2148	660	1101	180	200	7	

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: Focal adhesion kinase 1

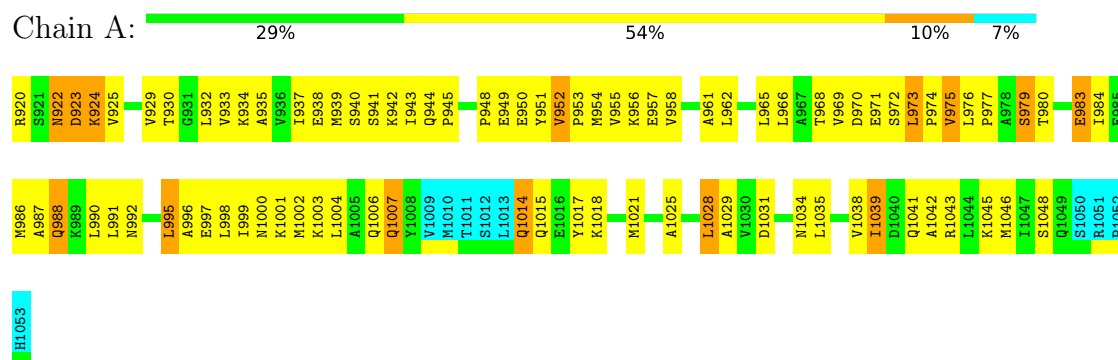


4.2 Scores per residue for each member of the ensemble

Colouring as in section 4.1 above.

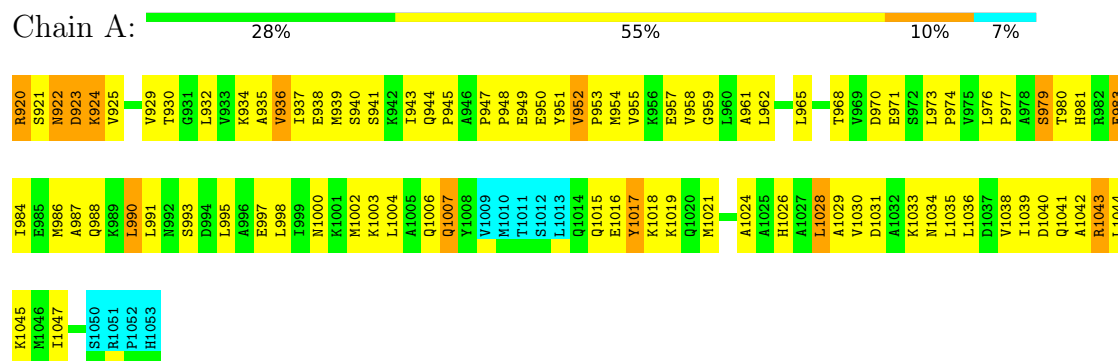
4.2.1 Score per residue for model 1

- Molecule 1: Focal adhesion kinase 1



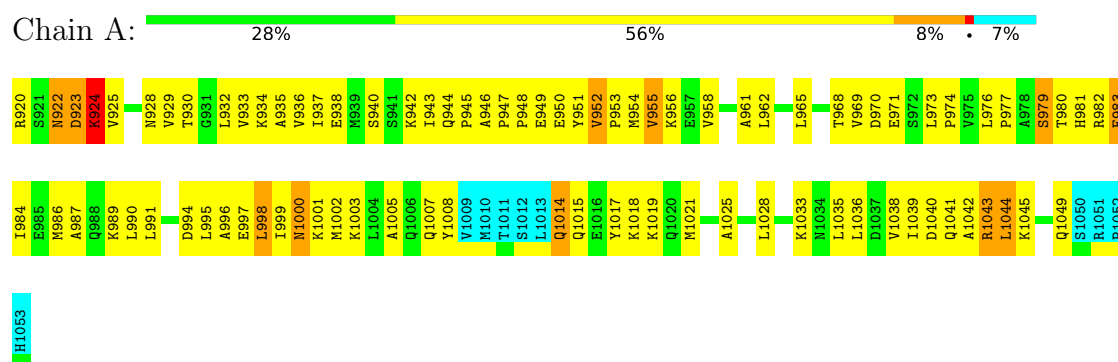
4.2.2 Score per residue for model 2

- Molecule 1: Focal adhesion kinase 1



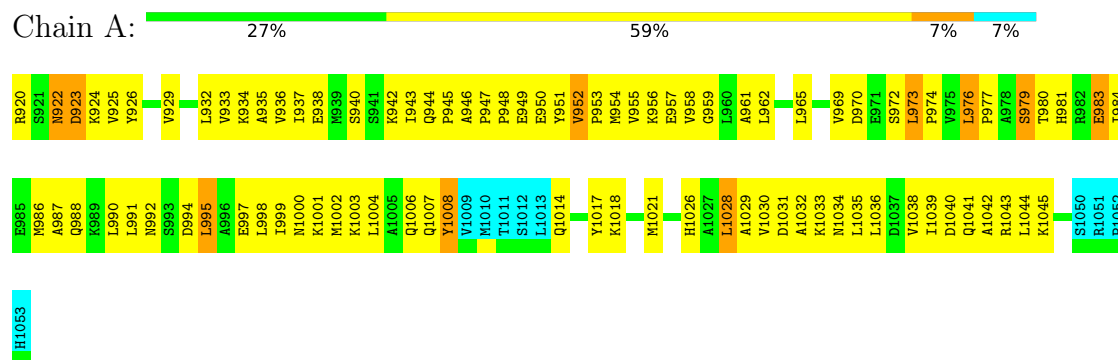
4.2.3 Score per residue for model 3

- Molecule 1: Focal adhesion kinase 1



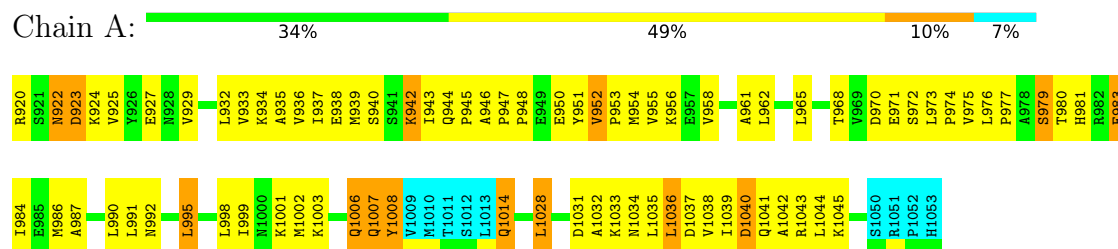
4.2.4 Score per residue for model 4

- Molecule 1: Focal adhesion kinase 1



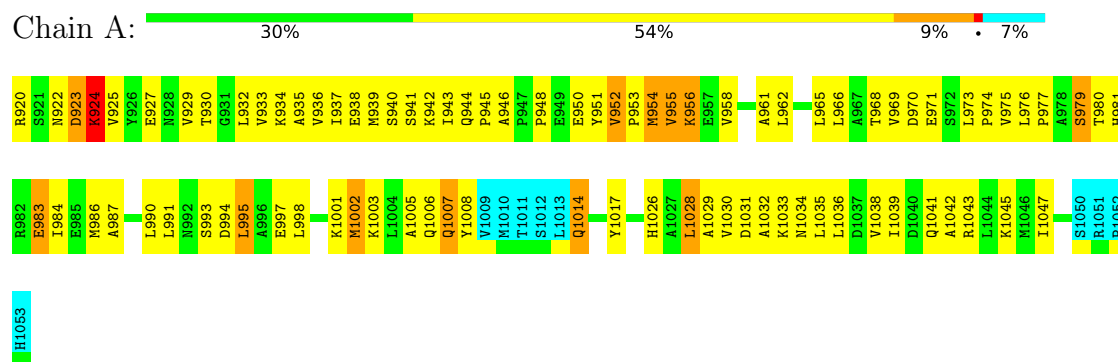
4.2.5 Score per residue for model 5

- Molecule 1: Focal adhesion kinase 1



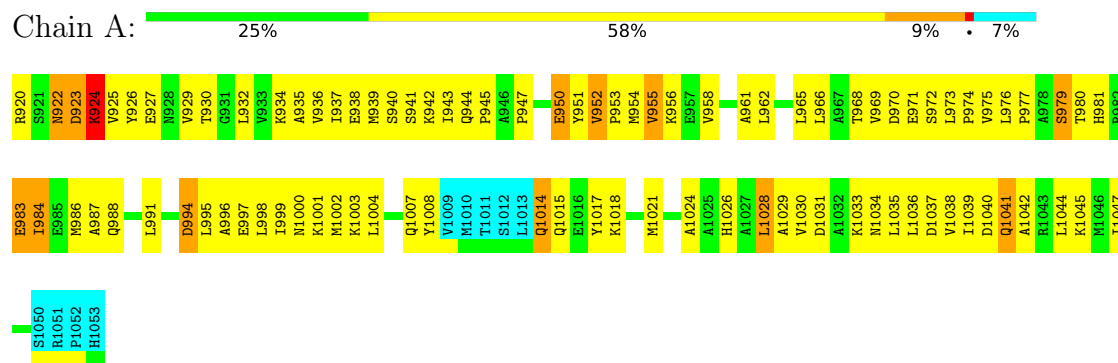
4.2.6 Score per residue for model 6

- Molecule 1: Focal adhesion kinase 1



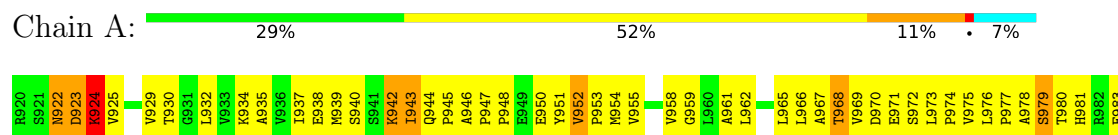
4.2.7 Score per residue for model 7

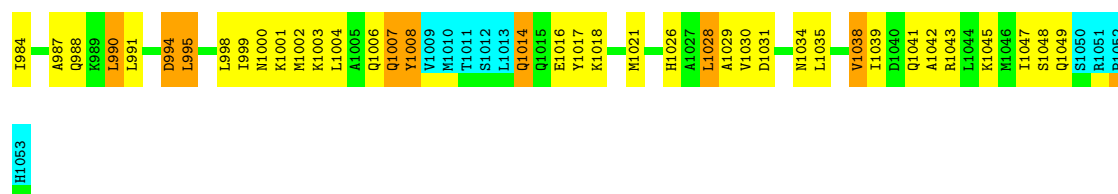
- Molecule 1: Focal adhesion kinase 1



4.2.8 Score per residue for model 8

- Molecule 1: Focal adhesion kinase 1

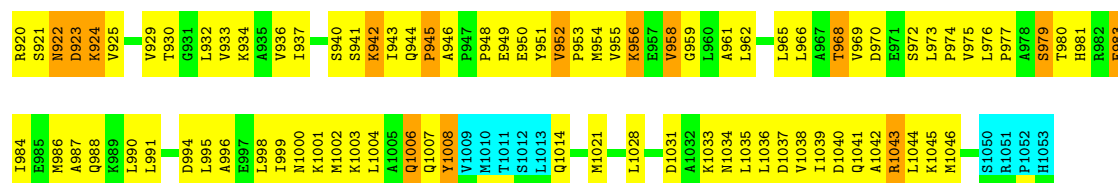




4.2.9 Score per residue for model 9

- Molecule 1: Focal adhesion kinase 1

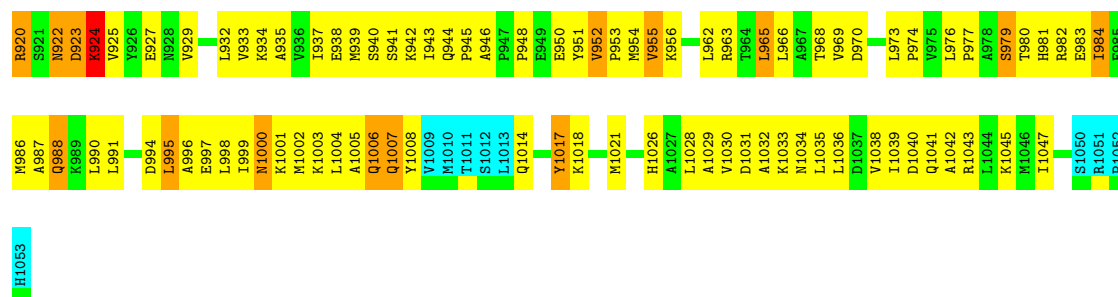
Chain A:



4.2.10 Score per residue for model 10

- Molecule 1: Focal adhesion kinase 1

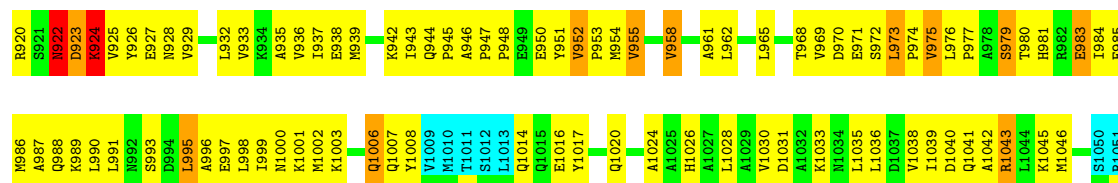
Chain A:



4.2.11 Score per residue for model 11

- Molecule 1: Focal adhesion kinase 1

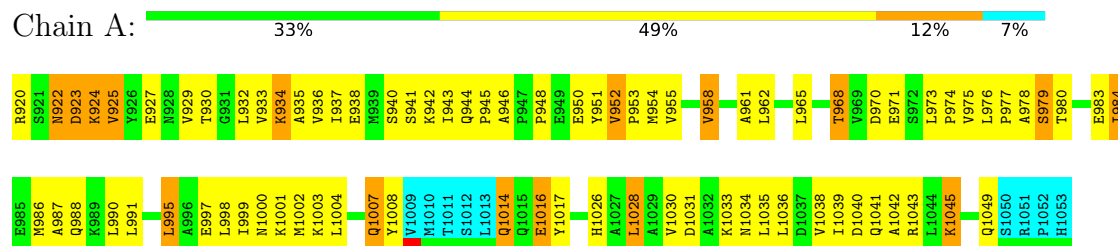
Chain A:



P1052
H1053

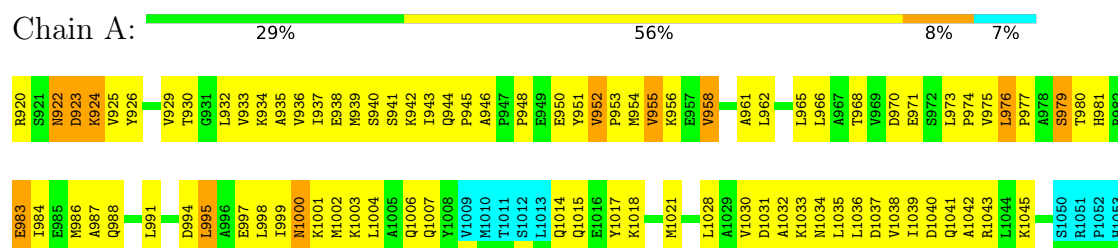
4.2.12 Score per residue for model 12

- Molecule 1: Focal adhesion kinase 1



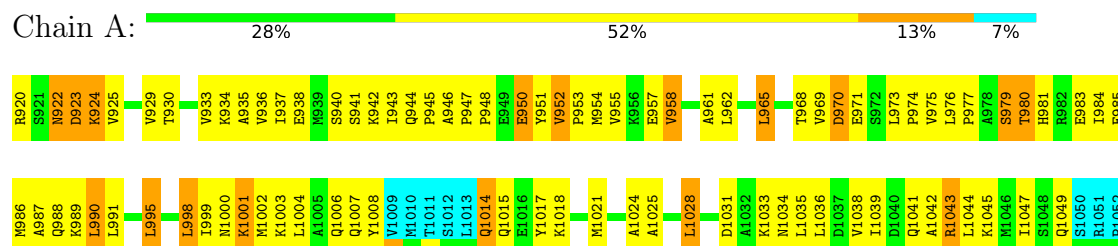
4.2.13 Score per residue for model 13 (medoid)

- Molecule 1: Focal adhesion kinase 1



4.2.14 Score per residue for model 14

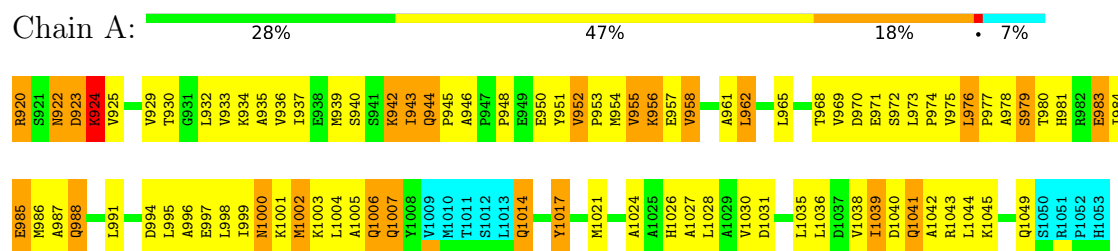
- Molecule 1: Focal adhesion kinase 1



H1053

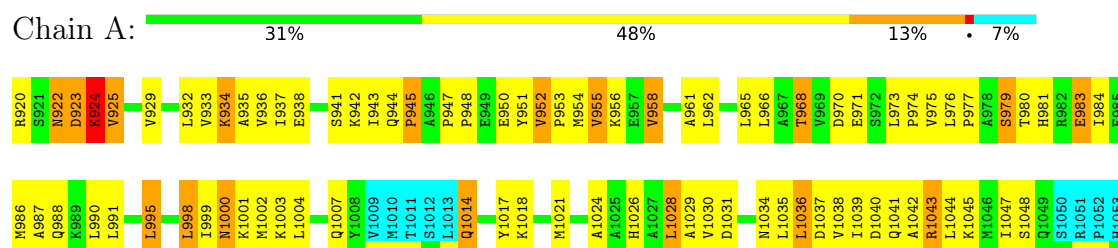
4.2.15 Score per residue for model 15

- Molecule 1: Focal adhesion kinase 1



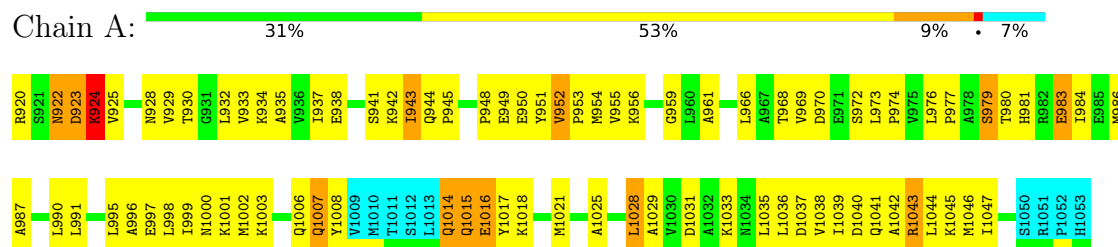
4.2.16 Score per residue for model 16

- Molecule 1: Focal adhesion kinase 1



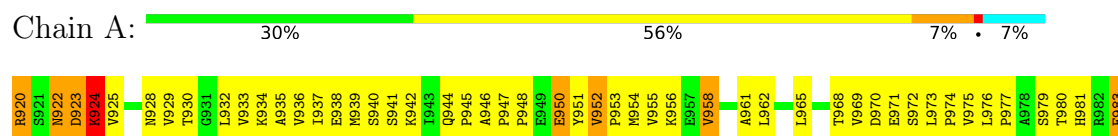
4.2.17 Score per residue for model 17

- Molecule 1: Focal adhesion kinase 1



4.2.18 Score per residue for model 18

- Molecule 1: Focal adhesion kinase 1

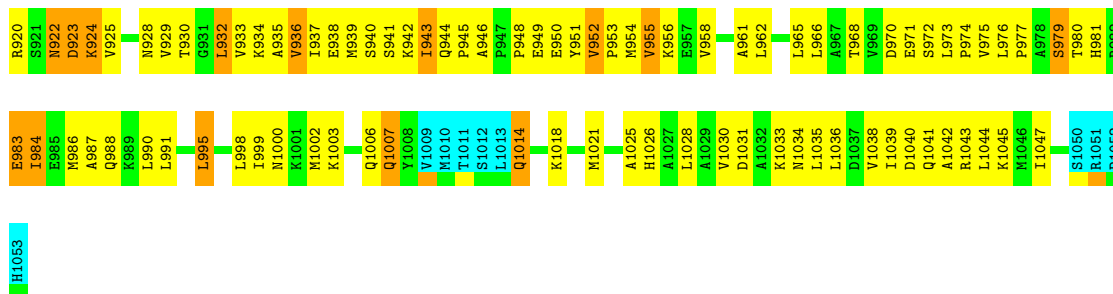




4.2.19 Score per residue for model 19

- Molecule 1: Focal adhesion kinase 1

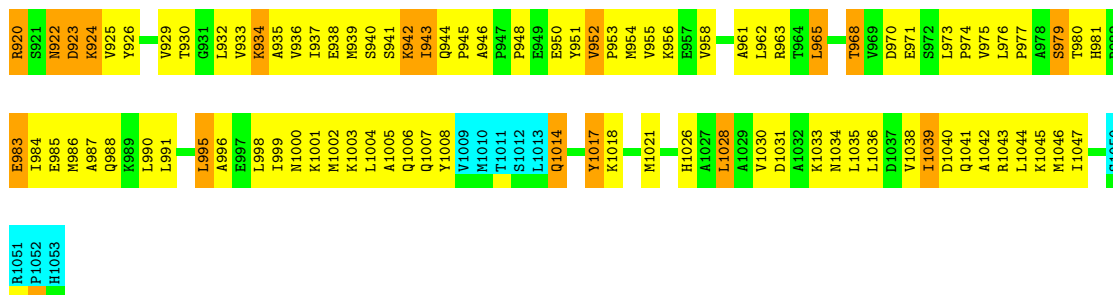
Chain A: 30% 53% 10% 7%



4.2.20 Score per residue for model 20

- Molecule 1: Focal adhesion kinase 1

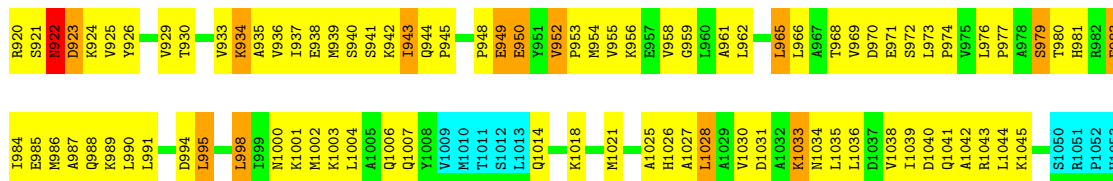
Chain A: 26% 54% 13% 7%



4.2.21 Score per residue for model 21

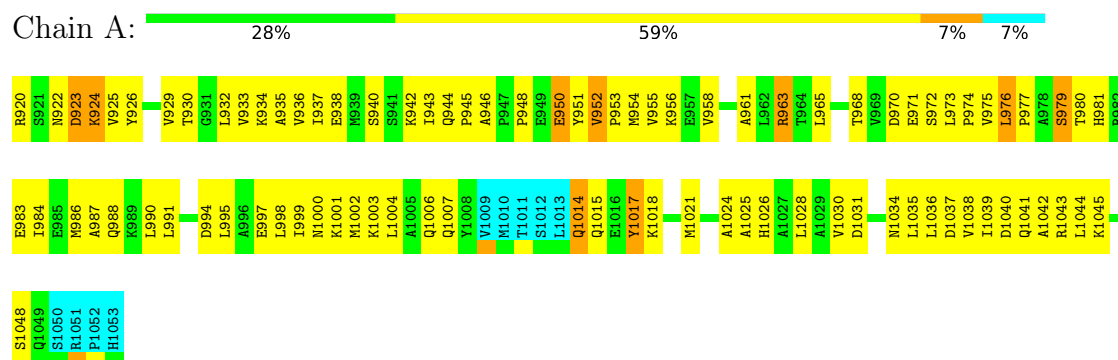
- Molecule 1: Focal adhesion kinase 1

Chain A: 28% 55% 10% 7%



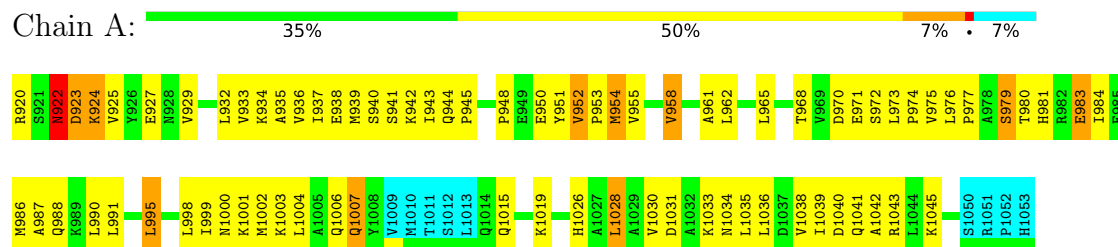
4.2.22 Score per residue for model 22

- Molecule 1: Focal adhesion kinase 1



4.2.23 Score per residue for model 23

- Molecule 1: Focal adhesion kinase 1



4.2.24 Score per residue for model 24

- Molecule 1: Focal adhesion kinase 1



4.2.25 Score per residue for model 25

- Molecule 1: Focal adhesion kinase 1



R920	S921	N922	D923	K924	V925	Y926	E927	N928	V929	T930	G931	L932	V933	K934	A935	V936	I937	E938	R939	S940	S941	K942	T943	Q944	P945	A946	P947	P948	E949	E950	Y951	Y952	P953	N954	Y955	Y958	A961	L962	T968	V969	D970	E971	S972	L973	P974	V975	L976	P977	A978	S979	T980	H981	R982	E983	T984	E985
M986	A987	L990	L991	N992	S993	D994	L995	A996	E997	L998	L999	N1000	K1001	M1002	K1003	L1004	A1005	Q1006	Q1007	Y1008	V1009	M1010	T1011	S1012	L1013	Q1014	Y1017	L1028	A1029	V1030	D1031	M1034	L1035	L1036	D1037	V1038	I1039	D1040	Q1041	A1042	R1043	L1044	K1045	S1050	R1051	P1052	H1053									

5 Refinement protocol and experimental data overview

The models were refined using the following method: *The program CNS version 1.1 with ARIA version 1.2 module was used to calculate the structures of the avian FAT domain..*

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

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

Software name	Classification	Version
CNS	refinement	1.1
ARIA	refinement	1.2

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	1263
Number of shifts mapped to atoms	1263
Number of unparsed shifts	0
Number of shifts with mapping errors	0
Number of shifts with mapping warnings	0
Assignment completeness (well-defined parts)	69%

6 Model quality [i](#)

6.1 Standard geometry [i](#)

The Z score for a bond length (or angle) is the number of standard deviations the observed value is removed from the expected value. A bond length (or angle) with $|Z| > 5$ is considered an outlier worth inspection. RMSZ is the (average) root-mean-square of all Z scores of the bond lengths (or angles).

Mol	Chain	Bond lengths		Bond angles	
		RMSZ	#Z>5	RMSZ	#Z>5
1	A	0.58±0.02	0±0/988 (0.0± 0.0%)	0.86±0.02	0±0/1337 (0.0± 0.0%)
All	All	0.58	0/24700 (0.0%)	0.86	1/33425 (0.0%)

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

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

There are no bond-length outliers.

All unique angle outliers are listed below.

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)	Models	
								Worst	Total
1	A	922	ASN	CA-CB-CG	-6.37	106.23	112.60	11	1

There are no chirality outliers.

All unique planar outliers are listed below.

Mol	Chain	Res	Type	Group	Models (Total)
1	A	1043	ARG	Sidechain	1

6.2 Too-close contacts [i](#)

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

Mol	Chain	Non-H	H(model)	H(added)	Clashes
1	A	976	1027	1024	108±7
All	All	24400	25675	25600	2688

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:952:VAL:HA	1:A:1002:MET:HB2	1.09	1.23	21	12
1:A:979:SER:HB2	1:A:1045:LYS:HD3	1.09	1.22	22	1
1:A:955:VAL:HB	1:A:1002:MET:HG3	1.01	1.31	7	4
1:A:973:LEU:HA	1:A:976:LEU:HD13	1.00	1.28	1	4
1:A:988:GLN:HA	1:A:991:LEU:HD12	0.97	1.37	7	17
1:A:991:LEU:HD11	1:A:1035:LEU:HG	0.97	1.34	11	1
1:A:979:SER:HB3	1:A:1045:LYS:HB3	0.96	1.31	12	1
1:A:983:GLU:HB3	1:A:1038:VAL:HG13	0.96	1.36	17	20
1:A:932:LEU:HA	1:A:961:ALA:HB1	0.96	1.35	16	22
1:A:966:LEU:HA	1:A:969:VAL:HG22	0.94	1.37	1	1
1:A:920:ARG:HG2	1:A:1043:ARG:HB2	0.94	1.35	10	3
1:A:935:ALA:HB3	1:A:961:ALA:HB2	0.94	1.39	16	15
1:A:952:VAL:HG13	1:A:953:PRO:HD3	0.93	1.34	21	25
1:A:929:VAL:HA	1:A:932:LEU:HD13	0.92	1.39	1	2
1:A:943:ILE:HA	1:A:950:GLU:HG3	0.92	1.37	14	2
1:A:976:LEU:HG	1:A:984:ILE:HG21	0.91	1.42	20	4
1:A:929:VAL:HG11	1:A:1036:LEU:HA	0.90	1.42	16	12
1:A:995:LEU:HA	1:A:1028:LEU:HD12	0.90	1.37	6	19
1:A:962:LEU:HB2	1:A:995:LEU:HD23	0.90	1.42	25	1
1:A:979:SER:HB2	1:A:1045:LYS:HB3	0.90	1.40	20	18
1:A:972:SER:HA	1:A:975:VAL:HG22	0.90	1.43	24	1
1:A:983:GLU:HB2	1:A:1038:VAL:HG22	0.89	1.40	8	1
1:A:951:TYR:HA	1:A:954:MET:HE3	0.89	1.45	24	7
1:A:932:LEU:HD12	1:A:965:LEU:HD22	0.89	1.43	2	1
1:A:995:LEU:HA	1:A:1028:LEU:HD22	0.89	1.43	9	3
1:A:920:ARG:HG2	1:A:1043:ARG:HB3	0.88	1.44	20	5
1:A:932:LEU:HD11	1:A:965:LEU:HB2	0.88	1.45	1	2
1:A:976:LEU:HG	1:A:981:HIS:HB3	0.87	1.45	11	8
1:A:925:VAL:HB	1:A:1039:ILE:HB	0.85	1.46	17	12
1:A:958:VAL:HG21	1:A:998:LEU:HD23	0.85	1.48	8	2
1:A:920:ARG:HG3	1:A:1043:ARG:HB2	0.85	1.48	16	1
1:A:991:LEU:HD11	1:A:1035:LEU:HD22	0.85	1.49	12	15
1:A:925:VAL:HA	1:A:968:THR:HG23	0.85	1.47	8	19
1:A:951:TYR:HA	1:A:954:MET:HE2	0.84	1.48	14	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:932:LEU:HD12	1:A:1032:ALA:HB2	0.84	1.48	10	1
1:A:979:SER:HB2	1:A:1045:LYS:CD	0.83	2.02	22	1
1:A:998:LEU:HD21	1:A:1025:ALA:HA	0.83	1.49	21	2
1:A:991:LEU:HD23	1:A:1031:ASP:HB3	0.83	1.51	8	5
1:A:991:LEU:HB3	1:A:1031:ASP:HB3	0.82	1.52	4	2
1:A:983:GLU:HB2	1:A:1038:VAL:HG12	0.82	1.50	1	1
1:A:976:LEU:HG	1:A:977:PRO:HD3	0.81	1.51	9	5
1:A:1001:LYS:HD2	1:A:1021:MET:HA	0.81	1.50	14	1
1:A:1040:ASP:O	1:A:1043:ARG:HD3	0.81	1.76	16	1
1:A:1003:LYS:O	1:A:1007:GLN:HB2	0.81	1.75	4	25
1:A:1001:LYS:HD3	1:A:1021:MET:HB2	0.81	1.51	20	1
1:A:920:ARG:HB3	1:A:1043:ARG:HG2	0.80	1.54	17	3
1:A:939:MET:HG2	1:A:954:MET:HE2	0.80	1.54	6	1
1:A:976:LEU:HD11	1:A:984:ILE:HD13	0.80	1.53	17	1
1:A:980:THR:HG22	1:A:984:ILE:HB	0.80	1.51	12	16
1:A:958:VAL:HG23	1:A:998:LEU:HD22	0.80	1.54	25	1
1:A:932:LEU:HD12	1:A:965:LEU:HD13	0.79	1.54	12	3
1:A:962:LEU:HB2	1:A:995:LEU:HD13	0.78	1.54	2	4
1:A:943:ILE:HB	1:A:954:MET:SD	0.77	2.19	13	15
1:A:922:ASN:OD1	1:A:1040:ASP:HA	0.77	1.78	11	1
1:A:939:MET:HA	1:A:954:MET:HB2	0.77	1.55	21	8
1:A:929:VAL:HG11	1:A:1039:ILE:HD11	0.77	1.56	17	4
1:A:948:PRO:HB3	1:A:1006:GLN:HE21	0.77	1.40	15	2
1:A:983:GLU:HB3	1:A:1038:VAL:HG22	0.76	1.57	4	3
1:A:946:ALA:HB1	1:A:950:GLU:HB2	0.76	1.57	11	8
1:A:983:GLU:HG2	1:A:1038:VAL:HG22	0.76	1.55	2	3
1:A:929:VAL:HB	1:A:1039:ILE:HD11	0.76	1.58	13	8
1:A:920:ARG:HG2	1:A:922:ASN:H	0.76	1.42	13	2
1:A:955:VAL:HG11	1:A:999:ILE:HA	0.75	1.57	20	10
1:A:976:LEU:HA	1:A:980:THR:HB	0.75	1.57	24	4
1:A:948:PRO:HA	1:A:951:TYR:CD1	0.75	2.17	11	7
1:A:948:PRO:HA	1:A:951:TYR:CD2	0.75	2.16	4	9
1:A:1040:ASP:O	1:A:1043:ARG:HG3	0.74	1.81	9	3
1:A:962:LEU:HD22	1:A:995:LEU:HG	0.74	1.59	15	1
1:A:954:MET:HE2	1:A:1002:MET:HE2	0.74	1.59	13	1
1:A:973:LEU:O	1:A:976:LEU:HG	0.74	1.82	8	6
1:A:1042:ALA:O	1:A:1045:LYS:HG3	0.74	1.81	22	1
1:A:923:ASP:HB2	1:A:1043:ARG:HG2	0.74	1.58	1	3
1:A:990:LEU:HG	1:A:1031:ASP:CG	0.73	2.09	9	1
1:A:948:PRO:HA	1:A:951:TYR:HD1	0.73	1.42	11	2
1:A:962:LEU:HD13	1:A:995:LEU:HB2	0.73	1.61	21	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:998:LEU:HA	1:A:1001:LYS:HB3	0.73	1.61	17	1
1:A:929:VAL:HB	1:A:1036:LEU:HD23	0.73	1.59	25	1
1:A:920:ARG:HB2	1:A:1047:ILE:HD11	0.73	1.61	17	1
1:A:925:VAL:HA	1:A:968:THR:CG2	0.72	2.14	20	23
1:A:983:GLU:HG3	1:A:1038:VAL:HG22	0.72	1.61	10	13
1:A:987:ALA:O	1:A:991:LEU:HG	0.72	1.82	4	24
1:A:1000:ASN:O	1:A:1004:LEU:HB2	0.72	1.85	16	15
1:A:1035:LEU:HA	1:A:1038:VAL:HB	0.72	1.59	8	21
1:A:943:ILE:HG13	1:A:954:MET:HE2	0.72	1.61	15	1
1:A:976:LEU:CG	1:A:984:ILE:HG21	0.72	2.14	20	4
1:A:948:PRO:HA	1:A:951:TYR:HD2	0.72	1.45	8	1
1:A:997:GLU:O	1:A:1001:LYS:HG2	0.72	1.85	22	6
1:A:925:VAL:HB	1:A:1039:ILE:CG2	0.71	2.15	12	2
1:A:983:GLU:CG	1:A:1038:VAL:HG22	0.71	2.14	13	20
1:A:1045:LYS:HD2	1:A:1045:LYS:C	0.71	2.11	22	1
1:A:987:ALA:HB2	1:A:1038:VAL:HG21	0.71	1.60	20	8
1:A:1021:MET:HE2	1:A:1021:MET:HA	0.71	1.63	17	2
1:A:1039:ILE:HA	1:A:1042:ALA:CB	0.70	2.15	11	23
1:A:965:LEU:HD11	1:A:1035:LEU:HD23	0.70	1.61	12	2
1:A:1002:MET:HE2	1:A:1021:MET:HG3	0.70	1.61	19	1
1:A:1018:LYS:HG3	1:A:1021:MET:HE3	0.70	1.61	21	1
1:A:970:ASP:O	1:A:974:PRO:HD2	0.70	1.87	9	7
1:A:996:ALA:HA	1:A:999:ILE:HG22	0.70	1.63	20	2
1:A:1001:LYS:HG2	1:A:1021:MET:HB2	0.70	1.63	21	1
1:A:969:VAL:HG13	1:A:984:ILE:HD11	0.70	1.63	4	11
1:A:991:LEU:HA	1:A:1031:ASP:OD2	0.70	1.87	18	2
1:A:920:ARG:HD3	1:A:1044:LEU:HB2	0.70	1.64	7	2
1:A:991:LEU:HA	1:A:994:ASP:OD1	0.69	1.86	3	2
1:A:972:SER:HA	1:A:975:VAL:CG2	0.69	2.17	24	1
1:A:976:LEU:HG	1:A:981:HIS:CB	0.69	2.17	11	13
1:A:973:LEU:O	1:A:977:PRO:HD3	0.69	1.87	22	15
1:A:983:GLU:HG2	1:A:1038:VAL:HA	0.69	1.63	6	10
1:A:955:VAL:HB	1:A:1002:MET:HB3	0.68	1.63	23	10
1:A:1036:LEU:HA	1:A:1039:ILE:HD11	0.68	1.64	21	5
1:A:966:LEU:CA	1:A:969:VAL:HG22	0.68	2.17	1	1
1:A:999:ILE:O	1:A:1002:MET:HG2	0.68	1.87	22	7
1:A:979:SER:CB	1:A:1045:LYS:HB3	0.68	2.19	4	18
1:A:962:LEU:HB2	1:A:995:LEU:HG	0.68	1.65	24	1
1:A:952:VAL:HG12	1:A:1006:GLN:HG3	0.68	1.64	21	2
1:A:998:LEU:HD22	1:A:1028:LEU:HD13	0.68	1.65	14	1
1:A:951:TYR:O	1:A:954:MET:HG2	0.67	1.89	2	17

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:983:GLU:CB	1:A:1038:VAL:HG12	0.67	2.19	1	1
1:A:998:LEU:HG	1:A:1028:LEU:HD13	0.67	1.64	21	2
1:A:925:VAL:HG21	1:A:1043:ARG:HG2	0.67	1.67	22	3
1:A:962:LEU:HD11	1:A:991:LEU:HB3	0.67	1.66	14	4
1:A:939:MET:HG3	1:A:954:MET:SD	0.67	2.30	15	3
1:A:1035:LEU:O	1:A:1039:ILE:HG12	0.67	1.89	14	12
1:A:1004:LEU:HG	1:A:1017:TYR:CE2	0.67	2.25	14	5
1:A:922:ASN:OD1	1:A:926:TYR:HB2	0.67	1.90	11	1
1:A:952:VAL:O	1:A:955:VAL:HG12	0.67	1.90	3	9
1:A:955:VAL:HB	1:A:1002:MET:SD	0.67	2.29	22	4
1:A:920:ARG:CD	1:A:1044:LEU:HB2	0.67	2.20	25	2
1:A:941:SER:O	1:A:945:PRO:HD3	0.67	1.90	14	17
1:A:925:VAL:HG21	1:A:1043:ARG:HB2	0.66	1.66	6	6
1:A:955:VAL:CG1	1:A:999:ILE:HA	0.66	2.20	24	7
1:A:1014:GLN:HE22	1:A:1018:LYS:HB2	0.66	1.51	16	4
1:A:1001:LYS:HD3	1:A:1024:ALA:HB3	0.66	1.66	14	1
1:A:979:SER:CB	1:A:1045:LYS:HD3	0.66	2.14	22	1
1:A:973:LEU:O	1:A:976:LEU:HB3	0.66	1.91	22	15
1:A:952:VAL:HG23	1:A:1002:MET:HE3	0.66	1.68	22	2
1:A:1028:LEU:HA	1:A:1031:ASP:OD2	0.66	1.89	16	12
1:A:996:ALA:O	1:A:1000:ASN:HB3	0.66	1.89	15	1
1:A:973:LEU:O	1:A:977:PRO:HD2	0.66	1.90	12	7
1:A:998:LEU:HD12	1:A:1028:LEU:HD13	0.66	1.66	12	1
1:A:929:VAL:HG22	1:A:965:LEU:CD2	0.66	2.21	21	3
1:A:943:ILE:HB	1:A:954:MET:HE2	0.65	1.66	23	1
1:A:972:SER:CA	1:A:975:VAL:HG22	0.65	2.20	24	1
1:A:929:VAL:HG21	1:A:1039:ILE:HD11	0.65	1.67	2	2
1:A:943:ILE:HB	1:A:954:MET:HE1	0.65	1.68	2	1
1:A:929:VAL:HG23	1:A:965:LEU:HD11	0.65	1.67	14	2
1:A:988:GLN:HA	1:A:991:LEU:CD1	0.65	2.20	16	13
1:A:996:ALA:O	1:A:999:ILE:HG12	0.65	1.91	7	5
1:A:976:LEU:HG	1:A:981:HIS:HB2	0.65	1.69	16	5
1:A:944:GLN:HB2	1:A:945:PRO:HD3	0.65	1.67	16	22
1:A:1034:ASN:O	1:A:1038:VAL:HG23	0.65	1.90	1	19
1:A:925:VAL:HA	1:A:968:THR:HG21	0.65	1.69	22	8
1:A:1039:ILE:HD12	1:A:1040:ASP:H	0.64	1.51	17	8
1:A:980:THR:HA	1:A:1045:LYS:HG3	0.64	1.70	5	5
1:A:1004:LEU:HD22	1:A:1017:TYR:HB3	0.64	1.68	25	1
1:A:1033:LYS:O	1:A:1036:LEU:HG	0.64	1.91	7	11
1:A:920:ARG:HD2	1:A:1044:LEU:HB2	0.64	1.68	4	2
1:A:958:VAL:HG21	1:A:1028:LEU:HD21	0.64	1.70	5	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:962:LEU:HB2	1:A:995:LEU:CD2	0.64	2.19	25	1
1:A:935:ALA:CB	1:A:961:ALA:HB2	0.64	2.21	6	19
1:A:1045:LYS:O	1:A:1048:SER:HB2	0.64	1.93	22	3
1:A:990:LEU:HD23	1:A:1034:ASN:HD22	0.64	1.52	8	1
1:A:983:GLU:O	1:A:986:MET:HG2	0.64	1.92	11	14
1:A:1015:GLN:HA	1:A:1018:LYS:HB3	0.64	1.68	14	7
1:A:951:TYR:O	1:A:954:MET:HG3	0.64	1.93	15	1
1:A:1014:GLN:HA	1:A:1017:TYR:CD2	0.64	2.28	20	1
1:A:932:LEU:HD12	1:A:965:LEU:HD12	0.63	1.69	20	1
1:A:1002:MET:HE3	1:A:1002:MET:HA	0.63	1.69	15	2
1:A:996:ALA:HA	1:A:999:ILE:HG12	0.63	1.68	17	2
1:A:935:ALA:O	1:A:938:GLU:HB2	0.63	1.93	3	23
1:A:983:GLU:HG3	1:A:986:MET:HE2	0.63	1.69	19	1
1:A:973:LEU:CA	1:A:976:LEU:HD13	0.63	2.15	1	3
1:A:1041:GLN:O	1:A:1045:LYS:HG2	0.63	1.94	23	19
1:A:1004:LEU:HG	1:A:1017:TYR:CD2	0.63	2.29	18	5
1:A:920:ARG:HA	1:A:920:ARG:HE	0.63	1.54	1	2
1:A:925:VAL:O	1:A:929:VAL:HG23	0.63	1.93	1	7
1:A:997:GLU:O	1:A:1001:LYS:HB2	0.63	1.94	13	2
1:A:965:LEU:HD21	1:A:1035:LEU:HD23	0.63	1.71	5	5
1:A:983:GLU:OE1	1:A:1042:ALA:HB2	0.62	1.93	1	1
1:A:929:VAL:CG2	1:A:1039:ILE:HD11	0.62	2.23	11	4
1:A:920:ARG:HG2	1:A:1043:ARG:CB	0.62	2.20	20	4
1:A:936:VAL:O	1:A:939:MET:HG2	0.62	1.94	19	3
1:A:925:VAL:HG12	1:A:968:THR:HG23	0.62	1.71	24	1
1:A:1018:LYS:O	1:A:1021:MET:HG2	0.62	1.94	16	1
1:A:995:LEU:O	1:A:998:LEU:HG	0.62	1.94	25	1
1:A:947:PRO:HD2	1:A:950:GLU:HG3	0.62	1.71	8	1
1:A:1018:LYS:O	1:A:1021:MET:HB3	0.62	1.94	20	4
1:A:948:PRO:HA	1:A:951:TYR:CG	0.62	2.29	1	10
1:A:962:LEU:HD11	1:A:991:LEU:HD13	0.62	1.70	4	2
1:A:940:SER:O	1:A:944:GLN:HG2	0.62	1.94	12	8
1:A:1002:MET:HE2	1:A:1021:MET:HE3	0.62	1.72	2	2
1:A:983:GLU:CG	1:A:1038:VAL:HG13	0.61	2.25	8	1
1:A:984:ILE:O	1:A:988:GLN:HB3	0.61	1.95	1	5
1:A:922:ASN:HA	1:A:1043:ARG:HG3	0.61	1.71	14	3
1:A:1033:LYS:HA	1:A:1036:LEU:HD23	0.61	1.72	5	3
1:A:943:ILE:HG12	1:A:954:MET:HE1	0.61	1.72	8	1
1:A:1036:LEU:O	1:A:1040:ASP:HB2	0.61	1.96	23	4
1:A:950:GLU:HA	1:A:953:PRO:HD2	0.61	1.71	3	16
1:A:955:VAL:HG21	1:A:999:ILE:HA	0.61	1.70	10	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:980:THR:HA	1:A:1045:LYS:HG2	0.61	1.70	9	3
1:A:953:PRO:O	1:A:956:LYS:HB3	0.61	1.96	7	17
1:A:1041:GLN:HB3	1:A:1045:LYS:HE2	0.61	1.72	17	2
1:A:1039:ILE:HD12	1:A:1040:ASP:N	0.61	2.11	2	8
1:A:974:PRO:O	1:A:977:PRO:HD2	0.61	1.96	22	10
1:A:994:ASP:OD2	1:A:1028:LEU:HA	0.61	1.96	3	1
1:A:986:MET:HG3	1:A:987:ALA:N	0.60	2.11	21	17
1:A:947:PRO:O	1:A:950:GLU:HG3	0.60	1.96	18	2
1:A:985:GLU:O	1:A:989:LYS:HG2	0.60	1.97	14	2
1:A:943:ILE:HG13	1:A:951:TYR:HE1	0.60	1.55	3	1
1:A:942:LYS:O	1:A:946:ALA:HB2	0.60	1.96	20	6
1:A:1043:ARG:HD3	1:A:1044:LEU:N	0.60	2.12	2	4
1:A:1005:ALA:HA	1:A:1017:TYR:HD2	0.60	1.55	6	2
1:A:952:VAL:CG1	1:A:953:PRO:HD3	0.60	2.22	21	3
1:A:981:HIS:HA	1:A:984:ILE:HG22	0.60	1.74	5	14
1:A:972:SER:OG	1:A:980:THR:HG21	0.60	1.97	23	12
1:A:998:LEU:O	1:A:1002:MET:HG2	0.60	1.96	11	4
1:A:929:VAL:HG22	1:A:965:LEU:HD13	0.60	1.73	1	2
1:A:1008:TYR:HB2	1:A:1017:TYR:CD2	0.60	2.31	10	5
1:A:1002:MET:SD	1:A:1021:MET:HG3	0.60	2.37	10	2
1:A:1042:ALA:HA	1:A:1045:LYS:HG2	0.60	1.71	2	4
1:A:930:THR:O	1:A:934:LYS:HG2	0.60	1.97	22	15
1:A:965:LEU:HD11	1:A:1035:LEU:CD2	0.59	2.26	6	4
1:A:966:LEU:HA	1:A:969:VAL:CG2	0.59	2.21	1	1
1:A:940:SER:O	1:A:944:GLN:HG3	0.59	1.97	23	13
1:A:932:LEU:HD22	1:A:1032:ALA:HB2	0.59	1.73	5	3
1:A:955:VAL:CB	1:A:1002:MET:HG3	0.59	2.20	7	3
1:A:991:LEU:HD21	1:A:1035:LEU:HD22	0.59	1.72	4	2
1:A:983:GLU:HB3	1:A:1038:VAL:CG1	0.59	2.22	23	10
1:A:941:SER:O	1:A:945:PRO:HD2	0.59	1.98	17	1
1:A:920:ARG:HB3	1:A:1043:ARG:HD3	0.59	1.73	9	1
1:A:952:VAL:HA	1:A:1002:MET:CB	0.59	2.27	8	4
1:A:955:VAL:O	1:A:958:VAL:HG22	0.59	1.97	25	11
1:A:975:VAL:HG13	1:A:1046:MET:HB2	0.59	1.74	1	3
1:A:965:LEU:HD11	1:A:1035:LEU:HD22	0.59	1.73	9	1
1:A:998:LEU:HD23	1:A:1028:LEU:HD13	0.59	1.74	19	3
1:A:994:ASP:HB2	1:A:1031:ASP:OD2	0.59	1.97	7	7
1:A:1008:TYR:CD2	1:A:1017:TYR:CE1	0.59	2.91	25	2
1:A:1017:TYR:CD1	1:A:1017:TYR:N	0.58	2.71	15	4
1:A:970:ASP:O	1:A:974:PRO:HD3	0.58	1.97	8	14
1:A:934:LYS:O	1:A:937:ILE:HG12	0.58	1.98	5	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:942:LYS:O	1:A:945:PRO:HD2	0.58	1.98	13	10
1:A:998:LEU:HD22	1:A:1025:ALA:HA	0.58	1.74	22	2
1:A:1030:VAL:HA	1:A:1033:LYS:HG2	0.58	1.74	13	1
1:A:925:VAL:HB	1:A:1039:ILE:HG22	0.58	1.74	12	2
1:A:998:LEU:HD22	1:A:1028:LEU:HD22	0.58	1.76	8	2
1:A:1035:LEU:O	1:A:1039:ILE:HG13	0.58	1.99	3	9
1:A:954:MET:HG3	1:A:955:VAL:N	0.58	2.12	19	2
1:A:929:VAL:HG21	1:A:1036:LEU:HA	0.58	1.74	2	1
1:A:951:TYR:HB2	1:A:1006:GLN:HG3	0.58	1.76	6	2
1:A:932:LEU:HG	1:A:961:ALA:HB1	0.57	1.75	11	8
1:A:1001:LYS:CG	1:A:1021:MET:HA	0.57	2.29	9	1
1:A:1033:LYS:HA	1:A:1036:LEU:CD2	0.57	2.29	9	11
1:A:998:LEU:HD11	1:A:1025:ALA:HA	0.57	1.73	17	2
1:A:1014:GLN:NE2	1:A:1018:LYS:HB2	0.57	2.14	16	3
1:A:995:LEU:HA	1:A:1028:LEU:CD2	0.57	2.29	15	1
1:A:920:ARG:CG	1:A:1043:ARG:HB3	0.57	2.27	20	1
1:A:993:SER:O	1:A:997:GLU:HG2	0.57	1.99	2	1
1:A:933:VAL:O	1:A:937:ILE:HG12	0.57	2.00	22	16
1:A:984:ILE:HA	1:A:1038:VAL:HG11	0.57	1.77	24	7
1:A:942:LYS:HD2	1:A:954:MET:HB2	0.57	1.75	6	1
1:A:991:LEU:CD1	1:A:1035:LEU:HD22	0.57	2.30	16	10
1:A:951:TYR:OH	1:A:1018:LYS:HG3	0.57	1.99	7	1
1:A:990:LEU:HG	1:A:1031:ASP:OD1	0.57	1.99	18	1
1:A:948:PRO:HB3	1:A:1006:GLN:NE2	0.57	2.12	15	2
1:A:947:PRO:HB2	1:A:948:PRO:HD2	0.57	1.77	24	8
1:A:951:TYR:O	1:A:1002:MET:HG2	0.57	1.99	2	3
1:A:939:MET:HG2	1:A:954:MET:SD	0.57	2.40	7	2
1:A:963:ARG:HA	1:A:963:ARG:HE	0.57	1.60	22	1
1:A:923:ASP:HB3	1:A:1043:ARG:HE	0.57	1.60	5	4
1:A:1001:LYS:HG3	1:A:1024:ALA:HB3	0.57	1.77	22	2
1:A:999:ILE:O	1:A:1003:LYS:HB2	0.56	1.99	5	2
1:A:955:VAL:CB	1:A:1002:MET:HB3	0.56	2.30	21	5
1:A:999:ILE:HG23	1:A:1002:MET:HE2	0.56	1.77	23	4
1:A:962:LEU:HB3	1:A:995:LEU:HD22	0.56	1.77	18	3
1:A:920:ARG:CB	1:A:1043:ARG:HG2	0.56	2.28	17	2
1:A:975:VAL:HG12	1:A:1045:LYS:HE2	0.56	1.77	22	1
1:A:962:LEU:HD12	1:A:965:LEU:HD12	0.56	1.74	6	2
1:A:943:ILE:HA	1:A:950:GLU:CG	0.56	2.24	14	2
1:A:991:LEU:HD23	1:A:1031:ASP:HB2	0.56	1.77	14	1
1:A:947:PRO:HD2	1:A:950:GLU:CG	0.56	2.30	8	1
1:A:1001:LYS:HB3	1:A:1021:MET:HA	0.56	1.76	22	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:952:VAL:HG13	1:A:953:PRO:CD	0.56	2.30	4	8
1:A:947:PRO:HG2	1:A:949:GLU:HG2	0.56	1.75	2	1
1:A:924:LYS:HD3	1:A:928:ASN:HB2	0.56	1.77	3	3
1:A:1039:ILE:HA	1:A:1042:ALA:HB2	0.56	1.76	11	19
1:A:929:VAL:HG22	1:A:965:LEU:HD11	0.56	1.78	15	2
1:A:962:LEU:HD13	1:A:991:LEU:HD13	0.56	1.78	1	1
1:A:1001:LYS:HD3	1:A:1021:MET:HB3	0.56	1.78	17	1
1:A:954:MET:HE2	1:A:1002:MET:HE3	0.56	1.78	19	1
1:A:965:LEU:HD23	1:A:1035:LEU:HD23	0.55	1.76	2	1
1:A:973:LEU:HB3	1:A:974:PRO:HD3	0.55	1.77	2	14
1:A:976:LEU:HA	1:A:980:THR:HG22	0.55	1.78	6	3
1:A:973:LEU:HD12	1:A:976:LEU:HD21	0.55	1.78	8	1
1:A:1000:ASN:HA	1:A:1003:LYS:CB	0.55	2.31	17	1
1:A:958:VAL:O	1:A:961:ALA:HB3	0.55	2.01	18	21
1:A:997:GLU:HA	1:A:1000:ASN:ND2	0.55	2.16	17	3
1:A:973:LEU:HA	1:A:976:LEU:HD23	0.55	1.78	24	2
1:A:955:VAL:HG13	1:A:998:LEU:HG	0.55	1.77	9	4
1:A:1000:ASN:O	1:A:1004:LEU:HB3	0.55	2.00	20	1
1:A:925:VAL:HB	1:A:1039:ILE:HG12	0.55	1.78	9	1
1:A:1005:ALA:HA	1:A:1017:TYR:CD2	0.55	2.36	6	1
1:A:955:VAL:HG21	1:A:1002:MET:HB3	0.55	1.77	24	4
1:A:951:TYR:HE2	1:A:1014:GLN:HG3	0.55	1.62	3	1
1:A:1037:ASP:O	1:A:1041:GLN:HB2	0.55	2.01	7	2
1:A:929:VAL:HG22	1:A:965:LEU:CD1	0.55	2.32	24	2
1:A:1000:ASN:HA	1:A:1003:LYS:HB3	0.55	1.79	19	11
1:A:983:GLU:HA	1:A:986:MET:HG2	0.55	1.79	2	8
1:A:951:TYR:HD2	1:A:1002:MET:SD	0.55	2.25	6	1
1:A:920:ARG:HG2	1:A:1043:ARG:HG3	0.55	1.79	12	2
1:A:932:LEU:HD21	1:A:965:LEU:HD22	0.54	1.79	1	1
1:A:1033:LYS:O	1:A:1036:LEU:HB3	0.54	2.01	17	3
1:A:999:ILE:O	1:A:1002:MET:HG3	0.54	2.02	14	1
1:A:920:ARG:CG	1:A:1043:ARG:HG2	0.54	2.32	2	3
1:A:969:VAL:O	1:A:973:LEU:HG	0.54	2.01	18	2
1:A:920:ARG:CG	1:A:1043:ARG:HB2	0.54	2.29	16	2
1:A:1004:LEU:HG	1:A:1008:TYR:CE2	0.54	2.37	20	1
1:A:998:LEU:CD2	1:A:1025:ALA:HA	0.54	2.29	21	1
1:A:955:VAL:CG2	1:A:1002:MET:HB3	0.54	2.32	18	6
1:A:925:VAL:HB	1:A:1039:ILE:HG13	0.54	1.78	4	1
1:A:932:LEU:HB2	1:A:965:LEU:HD11	0.54	1.79	4	1
1:A:971:GLU:O	1:A:974:PRO:HD2	0.54	2.01	25	17
1:A:955:VAL:HB	1:A:1002:MET:HB2	0.54	1.78	20	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:976:LEU:O	1:A:981:HIS:HB2	0.54	2.01	8	1
1:A:929:VAL:CG1	1:A:1039:ILE:HD11	0.54	2.32	17	1
1:A:922:ASN:HB2	1:A:926:TYR:HB3	0.54	1.78	21	1
1:A:924:LYS:HD2	1:A:968:THR:OG1	0.54	2.02	25	4
1:A:1043:ARG:HD2	1:A:1044:LEU:N	0.54	2.18	21	2
1:A:943:ILE:HD11	1:A:1018:LYS:HE2	0.54	1.78	10	1
1:A:1028:LEU:HD23	1:A:1029:ALA:N	0.54	2.17	7	10
1:A:995:LEU:HD13	1:A:1028:LEU:CD1	0.54	2.33	7	1
1:A:987:ALA:HA	1:A:990:LEU:HB3	0.54	1.80	25	4
1:A:952:VAL:CA	1:A:1002:MET:HB2	0.54	2.30	25	2
1:A:987:ALA:HB3	1:A:1038:VAL:HG21	0.54	1.80	17	2
1:A:1036:LEU:HD13	1:A:1037:ASP:N	0.54	2.18	24	2
1:A:955:VAL:CG2	1:A:999:ILE:HA	0.53	2.34	16	2
1:A:998:LEU:HA	1:A:1001:LYS:HD3	0.53	1.78	25	1
1:A:975:VAL:HG11	1:A:1042:ALA:O	0.53	2.02	1	11
1:A:998:LEU:CB	1:A:1028:LEU:HD13	0.53	2.34	24	4
1:A:925:VAL:C	1:A:1039:ILE:HD13	0.53	2.28	21	8
1:A:955:VAL:HG12	1:A:999:ILE:HD13	0.53	1.80	22	1
1:A:965:LEU:HD11	1:A:1035:LEU:HD21	0.53	1.81	13	1
1:A:929:VAL:HG22	1:A:965:LEU:HD21	0.53	1.80	21	1
1:A:1041:GLN:O	1:A:1045:LYS:N	0.53	2.40	22	24
1:A:929:VAL:HG11	1:A:1036:LEU:N	0.53	2.19	3	3
1:A:998:LEU:CD2	1:A:1028:LEU:HD13	0.53	2.33	19	4
1:A:946:ALA:HB1	1:A:950:GLU:HG3	0.53	1.81	10	1
1:A:920:ARG:HA	1:A:1043:ARG:HB3	0.53	1.81	25	1
1:A:979:SER:HB3	1:A:1045:LYS:HG3	0.53	1.80	16	5
1:A:929:VAL:CG1	1:A:1036:LEU:HB3	0.53	2.34	4	3
1:A:1000:ASN:HA	1:A:1003:LYS:HB2	0.53	1.80	17	2
1:A:923:ASP:O	1:A:925:VAL:N	0.53	2.42	16	24
1:A:998:LEU:HD12	1:A:1002:MET:HE2	0.53	1.81	11	2
1:A:976:LEU:HG	1:A:981:HIS:CA	0.53	2.33	22	4
1:A:962:LEU:HD12	1:A:991:LEU:HB3	0.53	1.79	11	4
1:A:953:PRO:O	1:A:956:LYS:HB2	0.53	2.03	15	1
1:A:1026:HIS:O	1:A:1030:VAL:HG23	0.53	2.03	23	15
1:A:976:LEU:CD1	1:A:984:ILE:HG21	0.53	2.34	17	3
1:A:976:LEU:CA	1:A:980:THR:HG22	0.53	2.34	6	3
1:A:991:LEU:CB	1:A:1031:ASP:HB3	0.53	2.34	25	2
1:A:1008:TYR:HB2	1:A:1017:TYR:CE2	0.53	2.39	20	2
1:A:943:ILE:HA	1:A:950:GLU:OE1	0.52	2.04	7	1
1:A:948:PRO:C	1:A:950:GLU:H	0.52	2.11	21	1
1:A:969:VAL:HA	1:A:972:SER:OG	0.52	2.03	1	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:962:LEU:O	1:A:966:LEU:HG	0.52	2.05	6	4
1:A:995:LEU:N	1:A:1028:LEU:HD13	0.52	2.20	15	3
1:A:948:PRO:O	1:A:951:TYR:HB2	0.52	2.04	2	7
1:A:950:GLU:C	1:A:953:PRO:HD2	0.52	2.30	6	14
1:A:998:LEU:HD21	1:A:1024:ALA:O	0.52	2.04	11	4
1:A:1033:LYS:HA	1:A:1036:LEU:HG	0.52	1.81	9	1
1:A:1008:TYR:HD2	1:A:1017:TYR:CD2	0.52	2.22	17	2
1:A:942:LYS:HB3	1:A:954:MET:HB3	0.52	1.80	25	8
1:A:932:LEU:O	1:A:936:VAL:HG13	0.52	2.04	19	2
1:A:984:ILE:HD12	1:A:1035:LEU:HD11	0.52	1.80	24	2
1:A:946:ALA:HB3	1:A:950:GLU:HB3	0.52	1.82	14	1
1:A:978:ALA:HA	1:A:1049:GLN:OE1	0.52	2.04	15	1
1:A:979:SER:HB3	1:A:1045:LYS:HE3	0.52	1.80	21	1
1:A:950:GLU:CA	1:A:953:PRO:HD2	0.52	2.34	3	15
1:A:962:LEU:HA	1:A:965:LEU:HB3	0.52	1.80	8	6
1:A:998:LEU:HD12	1:A:1021:MET:HE2	0.52	1.81	15	1
1:A:951:TYR:CA	1:A:954:MET:HE3	0.52	2.30	24	1
1:A:936:VAL:O	1:A:939:MET:HB3	0.52	2.05	18	5
1:A:955:VAL:HG11	1:A:998:LEU:O	0.52	2.05	8	8
1:A:995:LEU:HD22	1:A:1028:LEU:CD1	0.52	2.34	19	5
1:A:976:LEU:HD12	1:A:984:ILE:CG2	0.52	2.35	22	5
1:A:1003:LYS:O	1:A:1006:GLN:HG3	0.52	2.05	9	4
1:A:925:VAL:HG21	1:A:1043:ARG:HB3	0.52	1.82	9	2
1:A:991:LEU:HD12	1:A:1035:LEU:HD22	0.51	1.81	3	1
1:A:979:SER:CB	1:A:1045:LYS:HG3	0.51	2.35	1	2
1:A:978:ALA:O	1:A:1049:GLN:HG3	0.51	2.05	12	1
1:A:984:ILE:HD13	1:A:988:GLN:HB2	0.51	1.82	12	1
1:A:920:ARG:HG3	1:A:921:SER:O	0.51	2.04	9	2
1:A:936:VAL:HA	1:A:958:VAL:HG12	0.51	1.81	13	10
1:A:1001:LYS:HA	1:A:1004:LEU:CB	0.51	2.35	4	1
1:A:932:LEU:HD21	1:A:995:LEU:HD21	0.51	1.81	5	3
1:A:955:VAL:HG21	1:A:1002:MET:CB	0.51	2.35	24	2
1:A:959:GLY:HA2	1:A:995:LEU:HD21	0.51	1.81	2	6
1:A:987:ALA:CB	1:A:1038:VAL:HG21	0.51	2.34	20	12
1:A:976:LEU:HG	1:A:981:HIS:HA	0.51	1.83	22	4
1:A:1028:LEU:O	1:A:1031:ASP:HB2	0.51	2.06	8	1
1:A:1014:GLN:HA	1:A:1017:TYR:CE2	0.51	2.40	20	2
1:A:942:LYS:HD2	1:A:954:MET:HB3	0.51	1.82	15	2
1:A:1005:ALA:HA	1:A:1017:TYR:HB2	0.51	1.81	15	1
1:A:1001:LYS:HB3	1:A:1021:MET:HG3	0.51	1.83	18	3
1:A:932:LEU:HG	1:A:1032:ALA:HB1	0.51	1.83	6	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:975:VAL:HG12	1:A:980:THR:HB	0.51	1.83	14	2
1:A:1039:ILE:HA	1:A:1042:ALA:HB3	0.51	1.82	24	3
1:A:984:ILE:HA	1:A:1038:VAL:CG1	0.51	2.36	10	2
1:A:920:ARG:HB3	1:A:1044:LEU:HD12	0.51	1.83	15	1
1:A:983:GLU:HG3	1:A:1038:VAL:O	0.51	2.06	8	1
1:A:998:LEU:HA	1:A:1001:LYS:HB2	0.50	1.82	6	4
1:A:1037:ASP:O	1:A:1041:GLN:HG3	0.50	2.06	17	3
1:A:953:PRO:HA	1:A:956:LYS:HE3	0.50	1.82	15	1
1:A:991:LEU:HD23	1:A:1031:ASP:OD2	0.50	2.05	18	1
1:A:1005:ALA:HA	1:A:1017:TYR:CB	0.50	2.35	15	2
1:A:996:ALA:O	1:A:999:ILE:HB	0.50	2.06	25	1
1:A:976:LEU:HG	1:A:984:ILE:CG2	0.50	2.27	20	3
1:A:958:VAL:O	1:A:995:LEU:HD11	0.50	2.06	2	2
1:A:938:GLU:O	1:A:942:LYS:HB2	0.50	2.07	8	6
1:A:991:LEU:HD21	1:A:1031:ASP:C	0.50	2.32	6	1
1:A:1003:LYS:O	1:A:1007:GLN:N	0.50	2.44	22	5
1:A:933:VAL:O	1:A:937:ILE:HG13	0.50	2.06	21	2
1:A:930:THR:O	1:A:934:LYS:HD2	0.50	2.07	20	3
1:A:940:SER:O	1:A:943:ILE:HG22	0.50	2.07	8	3
1:A:920:ARG:NE	1:A:920:ARG:HA	0.50	2.21	10	2
1:A:1045:LYS:CD	1:A:1045:LYS:C	0.50	2.85	22	1
1:A:955:VAL:HG11	1:A:1001:LYS:HB2	0.50	1.81	25	1
1:A:951:TYR:CG	1:A:1002:MET:HE3	0.50	2.42	5	1
1:A:955:VAL:CG1	1:A:998:LEU:HG	0.50	2.37	9	4
1:A:965:LEU:HD21	1:A:1035:LEU:CD2	0.50	2.36	7	3
1:A:976:LEU:CA	1:A:980:THR:HB	0.50	2.32	24	2
1:A:949:GLU:O	1:A:953:PRO:HD2	0.50	2.07	4	3
1:A:924:LYS:HA	1:A:927:GLU:HB2	0.49	1.82	12	5
1:A:942:LYS:HB3	1:A:954:MET:CB	0.49	2.37	20	1
1:A:965:LEU:HD21	1:A:991:LEU:HD22	0.49	1.84	24	1
1:A:1002:MET:SD	1:A:1021:MET:HE3	0.49	2.47	3	1
1:A:954:MET:HE3	1:A:1002:MET:SD	0.49	2.47	15	1
1:A:983:GLU:HB3	1:A:1038:VAL:CG2	0.49	2.34	4	1
1:A:933:VAL:O	1:A:937:ILE:HG23	0.49	2.07	5	2
1:A:934:LYS:O	1:A:938:GLU:HG2	0.49	2.08	1	1
1:A:950:GLU:HA	1:A:953:PRO:CD	0.49	2.37	3	3
1:A:983:GLU:OE1	1:A:1039:ILE:HA	0.49	2.08	1	1
1:A:983:GLU:CG	1:A:1038:VAL:HG12	0.49	2.37	1	1
1:A:925:VAL:O	1:A:929:VAL:HG22	0.49	2.08	2	1
1:A:939:MET:CA	1:A:954:MET:HB2	0.49	2.33	21	1
1:A:1036:LEU:O	1:A:1040:ASP:HB3	0.49	2.07	5	4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:962:LEU:CB	1:A:995:LEU:HG	0.49	2.37	10	2
1:A:995:LEU:HD22	1:A:1028:LEU:HD11	0.49	1.85	19	1
1:A:1004:LEU:HA	1:A:1007:GLN:CB	0.49	2.37	23	1
1:A:1004:LEU:HA	1:A:1007:GLN:HB2	0.49	1.84	23	1
1:A:1042:ALA:O	1:A:1045:LYS:HB2	0.49	2.08	12	5
1:A:995:LEU:CA	1:A:1028:LEU:HD12	0.49	2.31	2	1
1:A:1018:LYS:HA	1:A:1021:MET:HB3	0.49	1.84	3	1
1:A:1008:TYR:HB3	1:A:1017:TYR:CD2	0.49	2.43	14	1
1:A:1045:LYS:O	1:A:1048:SER:HB3	0.49	2.07	16	1
1:A:995:LEU:HD12	1:A:1028:LEU:HD21	0.49	1.83	18	1
1:A:933:VAL:HA	1:A:936:VAL:HG12	0.49	1.84	11	7
1:A:1042:ALA:HA	1:A:1045:LYS:HB2	0.49	1.84	9	1
1:A:998:LEU:HA	1:A:1024:ALA:HB1	0.49	1.85	16	1
1:A:942:LYS:HG2	1:A:954:MET:HA	0.49	1.84	19	1
1:A:929:VAL:HG22	1:A:965:LEU:HD12	0.49	1.84	24	1
1:A:943:ILE:HD12	1:A:946:ALA:HB3	0.49	1.84	25	1
1:A:970:ASP:O	1:A:974:PRO:CD	0.48	2.61	5	25
1:A:976:LEU:HB2	1:A:977:PRO:HD3	0.48	1.85	1	2
1:A:943:ILE:HA	1:A:946:ALA:HB3	0.48	1.85	11	2
1:A:1035:LEU:HA	1:A:1038:VAL:CB	0.48	2.38	9	4
1:A:935:ALA:HB3	1:A:961:ALA:CB	0.48	2.25	6	3
1:A:971:GLU:O	1:A:975:VAL:HG23	0.48	2.09	8	8
1:A:946:ALA:HB1	1:A:950:GLU:CB	0.48	2.36	11	1
1:A:955:VAL:O	1:A:958:VAL:HG12	0.48	2.08	22	1
1:A:934:LYS:O	1:A:937:ILE:HB	0.48	2.09	23	17
1:A:942:LYS:HE3	1:A:950:GLU:HB3	0.48	1.86	6	1
1:A:1035:LEU:HA	1:A:1038:VAL:CG2	0.48	2.38	13	3
1:A:996:ALA:HA	1:A:999:ILE:CG2	0.48	2.37	20	1
1:A:983:GLU:HG3	1:A:1038:VAL:HG12	0.48	1.83	1	1
1:A:998:LEU:CG	1:A:1028:LEU:HD13	0.48	2.39	1	1
1:A:981:HIS:HA	1:A:984:ILE:CG2	0.48	2.38	5	6
1:A:922:ASN:HA	1:A:1043:ARG:HG2	0.48	1.84	21	2
1:A:976:LEU:HD11	1:A:984:ILE:HG21	0.48	1.85	17	1
1:A:1039:ILE:O	1:A:1042:ALA:HB3	0.48	2.08	8	10
1:A:976:LEU:HG	1:A:977:PRO:CD	0.48	2.38	10	2
1:A:962:LEU:HB2	1:A:995:LEU:CD1	0.48	2.33	2	1
1:A:950:GLU:HA	1:A:953:PRO:HG2	0.48	1.85	19	3
1:A:996:ALA:O	1:A:999:ILE:HG22	0.48	2.08	3	1
1:A:1035:LEU:HD12	1:A:1038:VAL:HG11	0.48	1.84	15	6
1:A:995:LEU:HA	1:A:1028:LEU:CD1	0.48	2.32	2	7
1:A:929:VAL:CG2	1:A:1039:ILE:HD12	0.48	2.39	3	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:972:SER:HB2	1:A:1039:ILE:HG13	0.48	1.85	9	1
1:A:980:THR:O	1:A:984:ILE:HG22	0.48	2.09	25	3
1:A:1036:LEU:HD23	1:A:1037:ASP:N	0.48	2.24	18	1
1:A:925:VAL:HB	1:A:1039:ILE:CG1	0.48	2.39	4	1
1:A:962:LEU:CD1	1:A:991:LEU:HD13	0.48	2.39	4	2
1:A:943:ILE:HB	1:A:954:MET:HE3	0.48	1.85	6	1
1:A:980:THR:CG2	1:A:984:ILE:HB	0.48	2.38	18	2
1:A:934:LYS:O	1:A:938:GLU:HG3	0.47	2.08	5	1
1:A:947:PRO:CB	1:A:948:PRO:HD2	0.47	2.38	14	2
1:A:965:LEU:HD22	1:A:965:LEU:O	0.47	2.09	21	2
1:A:1001:LYS:HG3	1:A:1024:ALA:CB	0.47	2.39	22	1
1:A:950:GLU:HA	1:A:953:PRO:CG	0.47	2.39	19	2
1:A:920:ARG:HB2	1:A:1047:ILE:CG1	0.47	2.38	14	2
1:A:1004:LEU:HD23	1:A:1017:TYR:HA	0.47	1.85	8	1
1:A:990:LEU:HD21	1:A:1031:ASP:HA	0.47	1.85	14	1
1:A:943:ILE:HG12	1:A:951:TYR:CE1	0.47	2.44	17	1
1:A:1001:LYS:HA	1:A:1021:MET:HG3	0.47	1.85	8	1
1:A:951:TYR:HD2	1:A:1002:MET:HA	0.47	1.67	7	1
1:A:1033:LYS:HA	1:A:1036:LEU:CG	0.47	2.39	9	1
1:A:995:LEU:O	1:A:999:ILE:HG12	0.47	2.09	12	1
1:A:976:LEU:HD23	1:A:977:PRO:N	0.47	2.24	22	1
1:A:922:ASN:O	1:A:923:ASP:O	0.47	2.32	16	22
1:A:969:VAL:O	1:A:973:LEU:HB2	0.47	2.09	1	1
1:A:1001:LYS:HB2	1:A:1021:MET:HB3	0.47	1.86	8	1
1:A:1008:TYR:CD2	1:A:1017:TYR:CD2	0.47	3.02	17	1
1:A:1002:MET:HA	1:A:1021:MET:HE3	0.47	1.87	18	1
1:A:983:GLU:HG2	1:A:1038:VAL:CA	0.47	2.39	6	1
1:A:963:ARG:O	1:A:966:LEU:HB3	0.47	2.09	10	1
1:A:997:GLU:HG2	1:A:1001:LYS:HG3	0.47	1.87	10	1
1:A:1041:GLN:HA	1:A:1044:LEU:HB3	0.47	1.87	22	1
1:A:923:ASP:C	1:A:925:VAL:N	0.47	2.73	16	23
1:A:987:ALA:HB1	1:A:1035:LEU:HB2	0.47	1.87	2	2
1:A:929:VAL:HB	1:A:1036:LEU:HB3	0.47	1.86	12	2
1:A:943:ILE:HD12	1:A:954:MET:HE1	0.47	1.87	9	1
1:A:1004:LEU:HD23	1:A:1017:TYR:HB3	0.47	1.86	20	1
1:A:948:PRO:C	1:A:950:GLU:N	0.47	2.70	21	1
1:A:1001:LYS:HZ2	1:A:1001:LYS:HB3	0.47	1.69	25	1
1:A:979:SER:OG	1:A:1045:LYS:HG3	0.47	2.09	1	1
1:A:929:VAL:O	1:A:932:LEU:HB3	0.47	2.10	6	2
1:A:920:ARG:CB	1:A:1043:ARG:HD3	0.47	2.39	9	1
1:A:939:MET:HG3	1:A:954:MET:HG3	0.47	1.86	24	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:1037:ASP:O	1:A:1041:GLN:HG2	0.47	2.09	13	1
1:A:1001:LYS:HD3	1:A:1021:MET:CB	0.47	2.39	17	1
1:A:1015:GLN:OE1	1:A:1018:LYS:HD3	0.47	2.09	22	1
1:A:949:GLU:O	1:A:953:PRO:CD	0.46	2.62	4	9
1:A:925:VAL:CB	1:A:1039:ILE:HB	0.46	2.31	17	5
1:A:969:VAL:HG11	1:A:988:GLN:HG3	0.46	1.87	15	1
1:A:973:LEU:O	1:A:977:PRO:CD	0.46	2.63	24	2
1:A:988:GLN:NE2	1:A:991:LEU:HD11	0.46	2.26	1	1
1:A:983:GLU:HB2	1:A:1038:VAL:CG2	0.46	2.27	8	1
1:A:946:ALA:HB3	1:A:950:GLU:HG2	0.46	1.87	18	1
1:A:1042:ALA:CA	1:A:1045:LYS:HG2	0.46	2.39	2	1
1:A:983:GLU:CB	1:A:1038:VAL:HG13	0.46	2.40	3	3
1:A:936:VAL:HA	1:A:958:VAL:HG22	0.46	1.87	4	3
1:A:984:ILE:HG13	1:A:988:GLN:NE2	0.46	2.26	4	1
1:A:923:ASP:HB3	1:A:1043:ARG:HG2	0.46	1.87	15	1
1:A:1041:GLN:OE1	1:A:1044:LEU:HD23	0.46	2.10	20	1
1:A:928:ASN:HD21	1:A:968:THR:HB	0.46	1.70	24	1
1:A:949:GLU:O	1:A:953:PRO:HG2	0.46	2.10	24	1
1:A:980:THR:CA	1:A:1045:LYS:HG2	0.46	2.41	9	2
1:A:1016:GLU:HG2	1:A:1017:TYR:CE1	0.46	2.45	12	1
1:A:948:PRO:HA	1:A:950:GLU:OE1	0.46	2.09	14	2
1:A:932:LEU:HG	1:A:1032:ALA:CB	0.46	2.41	6	1
1:A:972:SER:O	1:A:975:VAL:HB	0.46	2.10	9	2
1:A:943:ILE:HA	1:A:954:MET:HE1	0.46	1.87	16	1
1:A:928:ASN:HB3	1:A:968:THR:OG1	0.46	2.11	19	1
1:A:933:VAL:O	1:A:936:VAL:HG12	0.46	2.09	25	2
1:A:924:LYS:O	1:A:924:LYS:HD3	0.46	2.10	2	3
1:A:951:TYR:O	1:A:1002:MET:HB3	0.46	2.10	7	3
1:A:1036:LEU:C	1:A:1036:LEU:HD12	0.46	2.35	9	1
1:A:942:LYS:CD	1:A:954:MET:HB3	0.46	2.41	15	1
1:A:1008:TYR:HD2	1:A:1017:TYR:CG	0.46	2.29	17	1
1:A:929:VAL:CG1	1:A:1036:LEU:HA	0.46	2.33	18	1
1:A:990:LEU:HG	1:A:1031:ASP:CB	0.46	2.41	2	1
1:A:962:LEU:CD1	1:A:991:LEU:HB3	0.46	2.41	8	3
1:A:939:MET:HE1	1:A:998:LEU:HD21	0.46	1.86	18	1
1:A:925:VAL:HG21	1:A:1043:ARG:CG	0.46	2.41	22	1
1:A:1035:LEU:CA	1:A:1038:VAL:HB	0.46	2.40	15	4
1:A:985:GLU:O	1:A:989:LYS:HG3	0.46	2.11	11	1
1:A:950:GLU:O	1:A:954:MET:HG2	0.46	2.11	14	1
1:A:998:LEU:CD1	1:A:1025:ALA:HA	0.46	2.41	17	1
1:A:946:ALA:CB	1:A:950:GLU:HB2	0.46	2.34	19	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:987:ALA:HB3	1:A:1035:LEU:HD23	0.46	1.87	1	1
1:A:998:LEU:HD11	1:A:1025:ALA:CA	0.46	2.41	3	1
1:A:1040:ASP:O	1:A:1043:ARG:HB3	0.46	2.10	3	1
1:A:955:VAL:CG1	1:A:998:LEU:HB3	0.46	2.41	4	1
1:A:998:LEU:O	1:A:1001:LYS:HB3	0.46	2.11	14	3
1:A:976:LEU:HD12	1:A:984:ILE:HG21	0.46	1.87	25	3
1:A:925:VAL:HG23	1:A:926:TYR:N	0.46	2.26	22	2
1:A:976:LEU:HA	1:A:980:THR:CB	0.46	2.35	24	1
1:A:955:VAL:HG11	1:A:998:LEU:C	0.45	2.36	2	3
1:A:983:GLU:HG3	1:A:1038:VAL:CG1	0.45	2.41	1	1
1:A:1015:GLN:O	1:A:1019:LYS:HG2	0.45	2.11	23	2
1:A:993:SER:O	1:A:997:GLU:HG3	0.45	2.10	11	1
1:A:965:LEU:HD21	1:A:1035:LEU:HD21	0.45	1.87	23	1
1:A:1018:LYS:HA	1:A:1021:MET:HE2	0.45	1.87	4	1
1:A:965:LEU:HD11	1:A:1035:LEU:HD12	0.45	1.88	11	1
1:A:958:VAL:HB	1:A:998:LEU:HD21	0.45	1.86	14	1
1:A:995:LEU:HD12	1:A:1028:LEU:CD1	0.45	2.41	16	1
1:A:923:ASP:CG	1:A:924:LYS:H	0.45	2.18	11	5
1:A:942:LYS:HB3	1:A:954:MET:HB2	0.45	1.89	23	3
1:A:967:ALA:O	1:A:970:ASP:HB3	0.45	2.10	8	1
1:A:943:ILE:HG13	1:A:951:TYR:CE1	0.45	2.46	13	2
1:A:1037:ASP:HA	1:A:1040:ASP:HB3	0.45	1.86	22	1
1:A:1001:LYS:HD2	1:A:1021:MET:CA	0.45	2.32	14	1
1:A:998:LEU:CA	1:A:1001:LYS:HB3	0.45	2.39	17	1
1:A:1044:LEU:O	1:A:1044:LEU:HD23	0.45	2.11	19	1
1:A:922:ASN:HB2	1:A:926:TYR:CB	0.45	2.40	21	1
1:A:1000:ASN:O	1:A:1004:LEU:HG	0.45	2.12	1	2
1:A:976:LEU:N	1:A:980:THR:HG22	0.45	2.26	6	1
1:A:972:SER:HB3	1:A:1039:ILE:CG1	0.45	2.42	8	1
1:A:955:VAL:HG23	1:A:998:LEU:HG	0.45	1.88	13	1
1:A:962:LEU:CB	1:A:995:LEU:HD13	0.45	2.41	16	1
1:A:1001:LYS:HE2	1:A:1021:MET:SD	0.45	2.51	20	1
1:A:991:LEU:HD21	1:A:1035:LEU:HG	0.45	1.87	1	1
1:A:934:LYS:HA	1:A:934:LYS:HE2	0.45	1.87	3	4
1:A:923:ASP:CG	1:A:1043:ARG:HG3	0.45	2.37	22	1
1:A:923:ASP:CB	1:A:1043:ARG:HG2	0.45	2.42	23	1
1:A:920:ARG:HG2	1:A:1043:ARG:HG2	0.45	1.86	2	1
1:A:955:VAL:HG21	1:A:998:LEU:C	0.45	2.37	15	3
1:A:932:LEU:HD22	1:A:965:LEU:HD22	0.45	1.88	19	1
1:A:1014:GLN:NE2	1:A:1014:GLN:HA	0.45	2.26	25	1
1:A:1041:GLN:O	1:A:1045:LYS:HD3	0.45	2.12	10	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:1001:LYS:CD	1:A:1021:MET:HA	0.45	2.32	14	1
1:A:973:LEU:HA	1:A:976:LEU:CD2	0.45	2.42	24	1
1:A:1041:GLN:HA	1:A:1044:LEU:HB2	0.45	1.89	5	1
1:A:1005:ALA:HB1	1:A:1014:GLN:NE2	0.45	2.26	15	1
1:A:973:LEU:HD12	1:A:976:LEU:CD2	0.44	2.42	2	1
1:A:1042:ALA:HA	1:A:1045:LYS:CG	0.44	2.41	2	2
1:A:974:PRO:C	1:A:977:PRO:HD2	0.44	2.37	15	2
1:A:973:LEU:O	1:A:976:LEU:HB2	0.44	2.12	12	2
1:A:995:LEU:HD13	1:A:995:LEU:C	0.44	2.37	14	2
1:A:929:VAL:HG13	1:A:1036:LEU:HD23	0.44	1.89	17	1
1:A:975:VAL:C	1:A:980:THR:HG22	0.44	2.38	15	2
1:A:962:LEU:HD21	1:A:991:LEU:HD13	0.44	1.88	18	1
1:A:991:LEU:HA	1:A:1031:ASP:HB2	0.44	1.89	1	3
1:A:1029:ALA:O	1:A:1033:LYS:HG3	0.44	2.12	10	1
1:A:1001:LYS:HG3	1:A:1024:ALA:HB2	0.44	1.89	16	1
1:A:996:ALA:HA	1:A:999:ILE:CG1	0.44	2.41	17	1
1:A:930:THR:CG2	1:A:1036:LEU:HD12	0.44	2.43	18	1
1:A:929:VAL:HG11	1:A:1036:LEU:HB2	0.44	1.88	25	1
1:A:1014:GLN:NE2	1:A:1017:TYR:HD2	0.44	2.09	25	1
1:A:983:GLU:CB	1:A:1038:VAL:HG22	0.44	2.43	2	3
1:A:1040:ASP:O	1:A:1043:ARG:HD2	0.44	2.13	2	1
1:A:978:ALA:HB1	1:A:1049:GLN:HG3	0.44	1.89	8	1
1:A:932:LEU:HG	1:A:961:ALA:CB	0.44	2.42	11	2
1:A:955:VAL:HB	1:A:1002:MET:CG	0.44	2.31	11	1
1:A:1016:GLU:O	1:A:1020:GLN:HG2	0.44	2.12	11	1
1:A:955:VAL:CG2	1:A:998:LEU:HG	0.44	2.42	13	1
1:A:1002:MET:HA	1:A:1002:MET:CE	0.44	2.39	15	1
1:A:923:ASP:C	1:A:925:VAL:H	0.44	2.21	16	2
1:A:1036:LEU:HD13	1:A:1036:LEU:C	0.44	2.37	16	1
1:A:933:VAL:O	1:A:936:VAL:HG22	0.44	2.13	19	1
1:A:997:GLU:HG3	1:A:1001:LYS:HE2	0.44	1.89	7	1
1:A:1036:LEU:HD22	1:A:1036:LEU:O	0.44	2.12	16	2
1:A:996:ALA:CA	1:A:999:ILE:HG12	0.44	2.42	17	1
1:A:968:THR:CG2	1:A:1039:ILE:HD12	0.44	2.43	7	2
1:A:999:ILE:HB	1:A:1002:MET:HE2	0.44	1.89	9	1
1:A:953:PRO:O	1:A:957:GLU:HG2	0.44	2.13	4	4
1:A:991:LEU:HD12	1:A:992:ASN:N	0.44	2.27	1	3
1:A:982:ARG:HG3	1:A:983:GLU:N	0.44	2.28	3	1
1:A:962:LEU:O	1:A:965:LEU:HB3	0.44	2.13	7	2
1:A:994:ASP:HA	1:A:997:GLU:HB3	0.44	1.88	13	1
1:A:981:HIS:CD2	1:A:985:GLU:HG3	0.44	2.48	15	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:1005:ALA:CB	1:A:1017:TYR:HB2	0.44	2.42	15	1
1:A:1015:GLN:O	1:A:1019:LYS:HG3	0.44	2.13	3	1
1:A:932:LEU:HD13	1:A:1032:ALA:HB2	0.44	1.90	4	1
1:A:998:LEU:HD12	1:A:1001:LYS:HB3	0.44	1.89	5	1
1:A:991:LEU:HD23	1:A:1031:ASP:CB	0.44	2.42	13	1
1:A:1014:GLN:O	1:A:1014:GLN:NE2	0.44	2.50	22	3
1:A:968:THR:HG21	1:A:1039:ILE:HD12	0.44	1.90	13	1
1:A:948:PRO:HB3	1:A:1006:GLN:OE1	0.44	2.13	24	1
1:A:943:ILE:HB	1:A:954:MET:CE	0.43	2.41	2	1
1:A:1002:MET:HE1	1:A:1018:LYS:HE2	0.43	1.89	2	1
1:A:942:LYS:O	1:A:946:ALA:HB3	0.43	2.13	10	2
1:A:942:LYS:HE2	1:A:950:GLU:OE1	0.43	2.13	12	1
1:A:989:LYS:O	1:A:989:LYS:HD3	0.43	2.12	24	1
1:A:920:ARG:HB2	1:A:1047:ILE:HG13	0.43	1.88	6	1
1:A:946:ALA:HB1	1:A:950:GLU:CG	0.43	2.43	10	1
1:A:1038:VAL:O	1:A:1042:ALA:N	0.43	2.51	24	4
1:A:1015:GLN:HA	1:A:1018:LYS:CB	0.43	2.43	18	1
1:A:976:LEU:HD13	1:A:981:HIS:ND1	0.43	2.27	9	1
1:A:1036:LEU:HA	1:A:1039:ILE:CD1	0.43	2.40	21	1
1:A:1045:LYS:HD2	1:A:1045:LYS:O	0.43	2.13	22	1
1:A:1041:GLN:HG2	1:A:1044:LEU:HD12	0.43	1.90	5	1
1:A:1018:LYS:HG3	1:A:1021:MET:HE2	0.43	1.90	16	1
1:A:994:ASP:OD2	1:A:1027:ALA:HB1	0.43	2.14	21	1
1:A:929:VAL:HA	1:A:932:LEU:CD1	0.43	2.40	7	1
1:A:1001:LYS:HE3	1:A:1025:ALA:HB2	0.43	1.90	14	1
1:A:962:LEU:HB3	1:A:995:LEU:CD2	0.43	2.43	18	1
1:A:943:ILE:HD13	1:A:943:ILE:O	0.43	2.12	21	2
1:A:981:HIS:O	1:A:985:GLU:HG2	0.43	2.13	20	2
1:A:935:ALA:HA	1:A:938:GLU:HG2	0.43	1.89	19	2
1:A:1015:GLN:N	1:A:1015:GLN:HE21	0.43	2.12	17	1
1:A:963:ARG:C	1:A:963:ARG:HD3	0.43	2.39	20	1
1:A:947:PRO:HB2	1:A:948:PRO:CD	0.43	2.42	24	1
1:A:991:LEU:HB3	1:A:1031:ASP:HB2	0.43	1.89	5	1
1:A:935:ALA:HA	1:A:938:GLU:CG	0.43	2.44	6	1
1:A:998:LEU:CD2	1:A:1028:LEU:HD22	0.43	2.44	17	1
1:A:1038:VAL:O	1:A:1041:GLN:HB2	0.43	2.14	1	1
1:A:965:LEU:HD13	1:A:965:LEU:C	0.43	2.38	6	4
1:A:997:GLU:O	1:A:1001:LYS:HD3	0.43	2.14	12	1
1:A:1016:GLU:HG3	1:A:1017:TYR:N	0.43	2.29	17	1
1:A:929:VAL:HG21	1:A:1039:ILE:HG12	0.43	1.91	24	1
1:A:995:LEU:O	1:A:999:ILE:HG13	0.43	2.14	4	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:990:LEU:HD21	1:A:1031:ASP:OD1	0.43	2.13	17	1
1:A:1005:ALA:HB1	1:A:1014:GLN:HE22	0.43	1.73	3	1
1:A:1001:LYS:CB	1:A:1021:MET:HB3	0.43	2.44	8	1
1:A:929:VAL:HG13	1:A:965:LEU:CD1	0.43	2.43	12	1
1:A:926:TYR:HD1	1:A:1036:LEU:CD2	0.43	2.27	24	1
1:A:1035:LEU:O	1:A:1038:VAL:HB	0.42	2.14	21	4
1:A:982:ARG:NE	1:A:982:ARG:HA	0.42	2.29	10	1
1:A:929:VAL:CG2	1:A:965:LEU:HD11	0.42	2.44	15	1
1:A:944:GLN:HG3	1:A:945:PRO:HD3	0.42	1.90	15	1
1:A:983:GLU:OE1	1:A:986:MET:HE3	0.42	2.13	21	1
1:A:984:ILE:HD12	1:A:1035:LEU:HD21	0.42	1.91	25	1
1:A:975:VAL:HG22	1:A:1046:MET:HE3	0.42	1.90	11	1
1:A:962:LEU:CB	1:A:995:LEU:HD23	0.42	2.30	25	1
1:A:1035:LEU:O	1:A:1035:LEU:HD13	0.42	2.13	25	1
1:A:966:LEU:HG	1:A:969:VAL:CG2	0.42	2.44	1	1
1:A:926:TYR:HB2	1:A:1040:ASP:HB2	0.42	1.90	13	3
1:A:1017:TYR:O	1:A:1021:MET:HB2	0.42	2.13	17	1
1:A:1043:ARG:O	1:A:1047:ILE:HG12	0.42	2.14	20	2
1:A:1036:LEU:HD22	1:A:1036:LEU:C	0.42	2.39	24	1
1:A:975:VAL:CG1	1:A:1046:MET:HB2	0.42	2.44	1	1
1:A:966:LEU:O	1:A:969:VAL:HB	0.42	2.15	8	2
1:A:988:GLN:HA	1:A:988:GLN:HE21	0.42	1.73	10	1
1:A:991:LEU:HD21	1:A:1035:LEU:CB	0.42	2.44	11	1
1:A:992:ASN:O	1:A:996:ALA:HB2	0.42	2.14	25	1
1:A:922:ASN:HB3	1:A:926:TYR:CB	0.42	2.45	13	1
1:A:1001:LYS:HA	1:A:1004:LEU:HB3	0.42	1.92	4	1
1:A:951:TYR:O	1:A:954:MET:HB3	0.42	2.15	5	1
1:A:997:GLU:O	1:A:1001:LYS:N	0.42	2.53	6	1
1:A:1044:LEU:HD12	1:A:1047:ILE:HB	0.42	1.90	20	1
1:A:975:VAL:HG12	1:A:1045:LYS:CE	0.42	2.44	22	1
1:A:931:GLY:HA2	1:A:934:LYS:CG	0.42	2.45	24	1
1:A:934:LYS:HE2	1:A:934:LYS:CA	0.42	2.45	3	1
1:A:962:LEU:HD22	1:A:965:LEU:HD12	0.42	1.92	3	1
1:A:1027:ALA:O	1:A:1030:VAL:HB	0.42	2.14	15	1
1:A:998:LEU:HB2	1:A:1028:LEU:HD13	0.42	1.92	7	2
1:A:950:GLU:OE1	1:A:951:TYR:N	0.42	2.53	14	1
1:A:1044:LEU:O	1:A:1047:ILE:HB	0.42	2.15	16	1
1:A:941:SER:O	1:A:945:PRO:CD	0.42	2.67	17	1
1:A:955:VAL:HB	1:A:1002:MET:CB	0.42	2.40	23	1
1:A:989:LYS:HD3	1:A:989:LYS:C	0.42	2.40	24	1
1:A:929:VAL:HG23	1:A:1039:ILE:HD11	0.42	1.92	25	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:965:LEU:HD13	1:A:969:VAL:HG23	0.41	1.91	6	1
1:A:952:VAL:HG23	1:A:1002:MET:HG3	0.41	1.91	20	1
1:A:979:SER:HB3	1:A:1045:LYS:HD2	0.41	1.91	3	1
1:A:951:TYR:O	1:A:954:MET:HE2	0.41	2.16	5	1
1:A:923:ASP:CG	1:A:924:LYS:N	0.41	2.79	25	3
1:A:1001:LYS:HB3	1:A:1001:LYS:NZ	0.41	2.30	14	1
1:A:948:PRO:HA	1:A:1006:GLN:OE1	0.41	2.16	22	1
1:A:972:SER:HB2	1:A:1039:ILE:CG1	0.41	2.45	9	1
1:A:1040:ASP:O	1:A:1044:LEU:HD13	0.41	2.14	15	1
1:A:1005:ALA:HA	1:A:1017:TYR:HB3	0.41	1.92	3	1
1:A:920:ARG:C	1:A:922:ASN:H	0.41	2.23	11	1
1:A:965:LEU:HD12	1:A:968:THR:HB	0.41	1.92	15	1
1:A:1004:LEU:HD22	1:A:1017:TYR:CE2	0.41	2.50	1	1
1:A:929:VAL:HA	1:A:965:LEU:HD11	0.41	1.93	10	1
1:A:976:LEU:HD11	1:A:984:ILE:HG12	0.41	1.92	20	1
1:A:952:VAL:HG23	1:A:1002:MET:SD	0.41	2.55	25	1
1:A:996:ALA:CA	1:A:999:ILE:HG22	0.41	2.39	20	1
1:A:929:VAL:HG11	1:A:1036:LEU:CA	0.41	2.46	22	1
1:A:998:LEU:HD21	1:A:1024:ALA:C	0.41	2.40	2	1
1:A:936:VAL:HB	1:A:958:VAL:HG21	0.41	1.92	5	1
1:A:987:ALA:O	1:A:990:LEU:HB3	0.41	2.16	6	1
1:A:920:ARG:HD2	1:A:1040:ASP:O	0.41	2.16	7	1
1:A:929:VAL:HA	1:A:965:LEU:HD12	0.41	1.91	8	1
1:A:942:LYS:CB	1:A:954:MET:HB3	0.41	2.46	18	1
1:A:942:LYS:HD2	1:A:950:GLU:HB2	0.41	1.93	18	1
1:A:1028:LEU:HD12	1:A:1031:ASP:OD2	0.41	2.16	18	1
1:A:920:ARG:O	1:A:921:SER:HB2	0.41	2.16	21	1
1:A:955:VAL:HG13	1:A:998:LEU:HD12	0.41	1.91	21	1
1:A:922:ASN:O	1:A:926:TYR:HB3	0.41	2.15	24	1
1:A:942:LYS:HG3	1:A:954:MET:HA	0.41	1.93	1	1
1:A:929:VAL:HG21	1:A:1036:LEU:N	0.41	2.31	18	2
1:A:982:ARG:HG3	1:A:983:GLU:H	0.40	1.76	3	1
1:A:986:MET:CG	1:A:987:ALA:N	0.40	2.84	7	1
1:A:983:GLU:HG3	1:A:1038:VAL:HG13	0.40	1.92	8	1
1:A:1035:LEU:HD12	1:A:1038:VAL:CG1	0.40	2.46	8	1
1:A:990:LEU:O	1:A:990:LEU:HD12	0.40	2.17	18	1
1:A:972:SER:HB3	1:A:1039:ILE:HG13	0.40	1.93	8	1
1:A:972:SER:CB	1:A:1039:ILE:HG13	0.40	2.46	9	2
1:A:1035:LEU:O	1:A:1039:ILE:HG22	0.40	2.15	9	1
1:A:1004:LEU:HG	1:A:1017:TYR:HB3	0.40	1.93	12	1
1:A:925:VAL:CG1	1:A:1039:ILE:HB	0.40	2.46	16	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:920:ARG:HB2	1:A:1043:ARG:HB3	0.40	1.92	18	1
1:A:1001:LYS:HZ2	1:A:1001:LYS:CB	0.40	2.29	25	1
1:A:934:LYS:HA	1:A:937:ILE:HG12	0.40	1.92	1	1
1:A:988:GLN:HE21	1:A:991:LEU:HD12	0.40	1.75	10	1
1:A:955:VAL:HG21	1:A:1001:LYS:HD2	0.40	1.92	21	1
1:A:929:VAL:CG1	1:A:1036:LEU:HB2	0.40	2.47	25	1
1:A:955:VAL:HG11	1:A:998:LEU:HB3	0.40	1.92	4	1
1:A:954:MET:SD	1:A:1002:MET:HE1	0.40	2.56	16	1
1:A:1016:GLU:O	1:A:1019:LYS:HG2	0.40	2.17	24	1
1:A:976:LEU:N	1:A:977:PRO:HD2	0.40	2.31	2	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	124/134 (93%)	116±1 (94±1%)	5±1 (4±1%)	3±1 (3±0%)	6	42
All	All	3100/3350 (93%)	2907 (94%)	113 (4%)	80 (3%)	6	42

All 6 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	923	ASP	25
1	A	924	LYS	25
1	A	979	SER	24
1	A	922	ASN	3
1	A	945	PRO	2
1	A	949	GLU	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	109/118 (92%)	95±3 (88±3%)	14±3 (12±3%)	7	48
All	All	2725/2950 (92%)	2387 (88%)	338 (12%)	7	48

All 61 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	922	ASN	25
1	A	952	VAL	25
1	A	1014	GLN	21
1	A	983	GLU	20
1	A	924	LYS	17
1	A	995	LEU	16
1	A	1028	LEU	16
1	A	990	LEU	15
1	A	1006	GLN	14
1	A	1007	GLN	12
1	A	955	VAL	9
1	A	958	VAL	9
1	A	942	LYS	7
1	A	950	GLU	7
1	A	1043	ARG	6
1	A	998	LEU	6
1	A	943	ILE	6
1	A	968	THR	6
1	A	920	ARG	5
1	A	1017	TYR	5
1	A	1000	ASN	5
1	A	1008	TYR	5
1	A	934	LYS	5
1	A	976	LEU	4
1	A	994	ASP	4
1	A	1036	LEU	4
1	A	984	ILE	4
1	A	965	LEU	4
1	A	973	LEU	3
1	A	988	GLN	3
1	A	1039	ILE	3
1	A	927	GLU	3
1	A	956	LYS	3
1	A	1016	GLU	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	966	LEU	3
1	A	975	VAL	2
1	A	936	VAL	2
1	A	1049	GLN	2
1	A	954	MET	2
1	A	1002	MET	2
1	A	1041	GLN	2
1	A	962	LEU	2
1	A	925	VAL	2
1	A	985	GLU	2
1	A	989	LYS	1
1	A	1044	LEU	1
1	A	1040	ASP	1
1	A	993	SER	1
1	A	1038	VAL	1
1	A	1045	LYS	1
1	A	970	ASP	1
1	A	980	THR	1
1	A	1001	LYS	1
1	A	944	GLN	1
1	A	957	GLU	1
1	A	1015	GLN	1
1	A	928	ASN	1
1	A	1031	ASP	1
1	A	932	LEU	1
1	A	1033	LYS	1
1	A	963	ARG	1

6.3.3 RNA ⓘ

There are no RNA molecules in this entry.

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

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

6.5 Carbohydrates ⓘ

There are no oligosaccharides in this entry.

6.6 Ligand geometry

There are no ligands in this entry.

6.7 Other polymers

There are no such molecules in this entry.

6.8 Polymer linkage issues

There are no chain breaks in this entry.

7 Chemical shift validation

The completeness of assignment taking into account all chemical shift lists is 69% for the well-defined parts and 67% 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	1263
Number of shifts mapped to atoms	1263
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
$^{13}\text{C}_\alpha$	127	-1.06 ± 0.13	Should be checked
$^{13}\text{C}_\beta$	99	0.34 ± 0.12	None needed (< 0.5 ppm)
$^{13}\text{C}'$	0	—	None (insufficient data)
^{15}N	121	2.95 ± 0.24	Should be applied

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 69%, i.e. 1212 atoms were assigned a chemical shift out of a possible 1749. 0 out of 28 assigned methyl groups (LEU and VAL) were assigned stereospecifically.

	Total	^1H	^{13}C	^{15}N
Backbone	453/615 (74%)	218/246 (89%)	120/250 (48%)	115/119 (97%)
Sidechain	723/1082 (67%)	512/708 (72%)	203/337 (60%)	8/37 (22%)

Continued on next page...

Continued from previous page...

	Total	¹H	¹³C	¹⁵N
Aromatic	36/52 (69%)	18/24 (75%)	18/24 (75%)	0/4 (0%)
Overall	1212/1749 (69%)	748/978 (76%)	341/611 (56%)	123/160 (77%)

The following table shows the completeness of the chemical shift assignments for the full structure. The overall completeness is 67%, i.e. 1261 atoms were assigned a chemical shift out of a possible 1875. 0 out of 30 assigned methyl groups (LEU and VAL) were assigned stereospecifically.

	Total	¹H	¹³C	¹⁵N
Backbone	476/658 (72%)	228/263 (87%)	127/268 (47%)	121/127 (95%)
Sidechain	747/1157 (65%)	527/758 (70%)	212/359 (59%)	8/40 (20%)
Aromatic	38/60 (63%)	19/28 (68%)	19/26 (73%)	0/6 (0%)
Overall	1261/1875 (67%)	774/1049 (74%)	358/653 (55%)	129/173 (75%)

7.1.4 Statistically unusual chemical shifts [i](#)

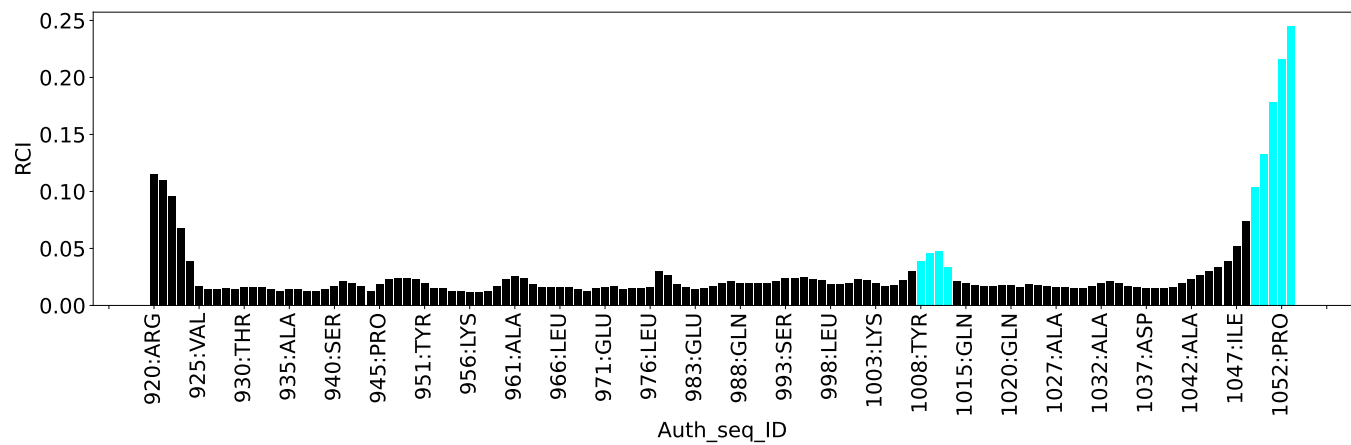
The following table lists the statistically unusual chemical shifts. These are statistical measures, and large deviations from the mean do not necessarily imply incorrect assignments. Molecules containing paramagnetic centres or hemes are expected to give rise to anomalous chemical shifts.

List Id	Chain	Res	Type	Atom	Shift, ppm	Expected range, ppm	Z-score
1	A	930	THR	HB	2.26	2.57 – 5.77	-5.9

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

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

Random coil index (RCI) for chain A:



8 NMR restraints analysis

8.1 Conformationally restricting restraints

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

Description	Value
Total distance restraints	227
Intra-residue ($ i-j =0$)	0
Sequential ($ i-j =1$)	3
Medium range ($ i-j >1$ and $ i-j <5$)	1
Long range ($ i-j \geq 5$)	15
Inter-chain	0
Hydrogen bond restraints	208
Disulfide bond restraints	0
Total dihedral-angle restraints	184
Number of unmapped restraints	0
Number of restraints per residue	3.1
Number of long range restraints per residue ¹	0.1

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)	8.1	0.2
0.2-0.5 (Medium)	6.6	0.49
>0.5 (Large)	3.2	5.39

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)	79.1	10.0
10.0-20.0 (Medium)	9.4	19.89
>20.0 (Large)	1.0	36.83

9 Distance violation analysis ⓘ

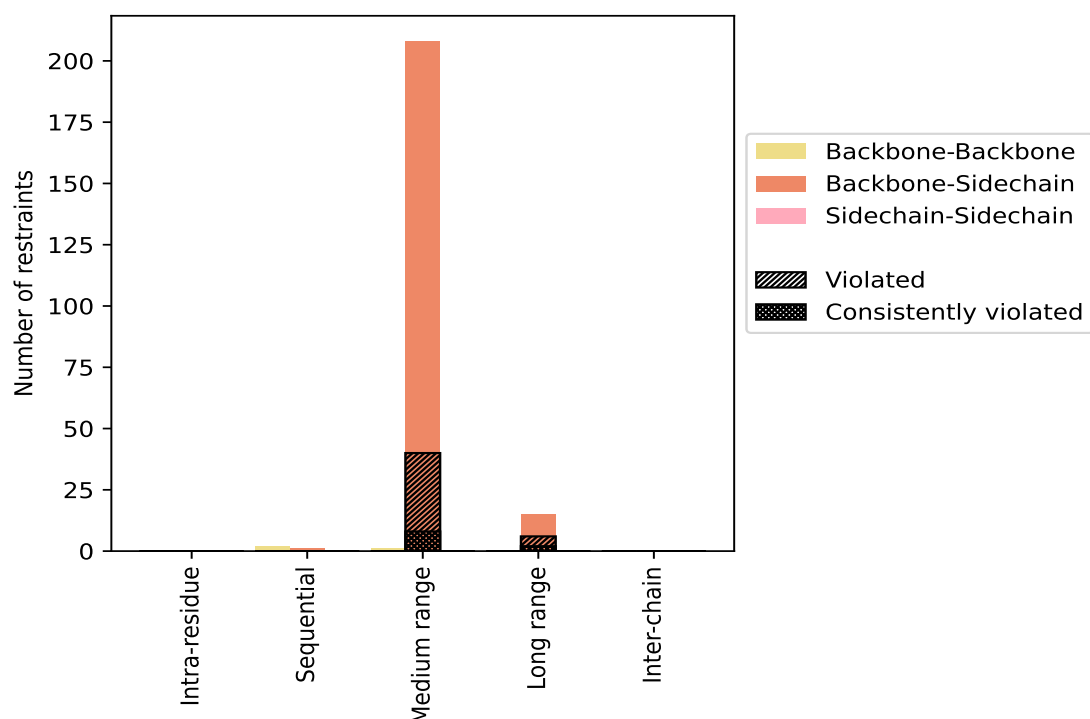
9.1 Summary of distance violations ⓘ

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$)	0	0.0	0	0.0	0.0	0	0.0	0.0
Backbone-Backbone	0	0.0	0	0.0	0.0	0	0.0	0.0
Backbone-Sidechain	0	0.0	0	0.0	0.0	0	0.0	0.0
Sidechain-Sidechain	0	0.0	0	0.0	0.0	0	0.0	0.0
Sequential ($ i-j =1$)	3	1.3	0	0.0	0.0	0	0.0	0.0
Backbone-Backbone	2	0.9	0	0.0	0.0	0	0.0	0.0
Backbone-Sidechain	1	0.4	0	0.0	0.0	0	0.0	0.0
Sidechain-Sidechain	0	0.0	0	0.0	0.0	0	0.0	0.0
Medium range ($ i-j >1$ & $ i-j <5$)	1	0.4	0	0.0	0.0	0	0.0	0.0
Backbone-Backbone	1	0.4	0	0.0	0.0	0	0.0	0.0
Backbone-Sidechain	0	0.0	0	0.0	0.0	0	0.0	0.0
Sidechain-Sidechain	0	0.0	0	0.0	0.0	0	0.0	0.0
Long range ($ i-j \geq 5$)	15	6.6	6	40.0	2.6	2	13.3	0.9
Backbone-Backbone	0	0.0	0	0.0	0.0	0	0.0	0.0
Backbone-Sidechain	15	6.6	6	40.0	2.6	2	13.3	0.9
Sidechain-Sidechain	0	0.0	0	0.0	0.0	0	0.0	0.0
Inter-chain	0	0.0	0	0.0	0.0	0	0.0	0.0
Backbone-Backbone	0	0.0	0	0.0	0.0	0	0.0	0.0
Backbone-Sidechain	0	0.0	0	0.0	0.0	0	0.0	0.0
Sidechain-Sidechain	0	0.0	0	0.0	0.0	0	0.0	0.0
Hydrogen bond	208	91.6	40	19.2	17.6	8	3.8	3.5
Disulfide bond	0	0.0	0	0.0	0.0	0	0.0	0.0
Total	227	100.0	46	20.3	20.3	10	4.4	4.4
Backbone-Backbone	3	1.3	0	0.0	0.0	0	0.0	0.0
Backbone-Sidechain	224	98.7	46	20.5	20.3	10	4.5	4.4
Sidechain-Sidechain	0	0.0	0	0.0	0.0	0	0.0	0.0

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

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



Violated and consistently violated restraints are shown using different hatch patterns in their respective categories. The hydrogen bonds and 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	0	0	15	3	0	18	0.58	5.39	1.18	0.28
2	0	0	16	2	0	18	0.74	4.72	1.39	0.24
3	0	0	17	2	0	19	0.51	3.95	0.9	0.19
4	0	0	16	2	0	18	0.53	3.91	0.93	0.2
5	0	0	16	2	0	18	0.7	4.6	1.31	0.23
6	0	0	17	3	0	20	0.51	3.67	0.81	0.18
7	0	0	15	2	0	17	0.7	4.17	1.22	0.23
8	0	0	15	2	0	17	0.68	4.0	1.18	0.18
9	0	0	14	2	0	16	0.63	4.81	1.15	0.24
10	0	0	14	3	0	17	0.64	4.63	1.1	0.27

Continued on next page...

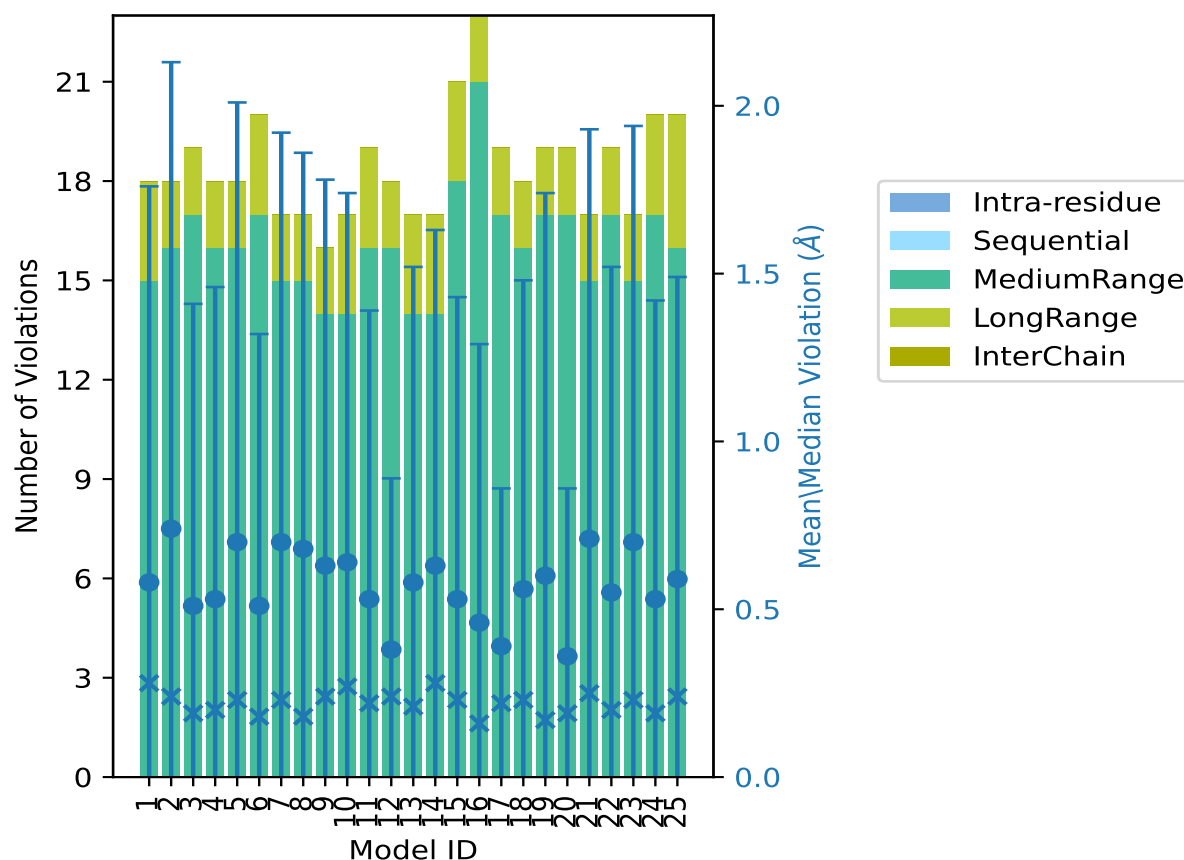
Continued from previous page...

Model ID	Number of violations						Mean (Å)	Max (Å)	SD ⁶ (Å)	Median (Å)
	IR ¹	SQ ²	MR ³	LR ⁴	IC ⁵	Total				
11	0	0	16	3	0	19	0.53	3.62	0.86	0.22
12	0	0	16	2	0	18	0.38	2.37	0.51	0.24
13	0	0	14	3	0	17	0.58	3.83	0.94	0.21
14	0	0	14	3	0	17	0.63	4.16	1.0	0.28
15	0	0	18	3	0	21	0.53	4.1	0.9	0.23
16	0	0	21	2	0	23	0.46	3.9	0.83	0.16
17	0	0	17	2	0	19	0.39	1.97	0.47	0.22
18	0	0	16	2	0	18	0.56	3.88	0.92	0.23
19	0	0	17	2	0	19	0.6	3.98	1.14	0.17
20	0	0	17	2	0	19	0.36	2.31	0.5	0.19
21	0	0	15	2	0	17	0.71	4.03	1.22	0.25
22	0	0	17	2	0	19	0.55	3.82	0.97	0.2
23	0	0	15	2	0	17	0.7	4.37	1.24	0.23
24	0	0	17	3	0	20	0.53	3.7	0.89	0.19
25	0	0	16	4	0	20	0.59	3.66	0.9	0.24

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

⁵Inter-chain restraints, ⁶Standard deviation

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



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

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

Violation analysis may find that some restraints are violated in few models and some are violated in most of models. The following table provides this information as number of violated restraints for a given fraction of the ensemble. In total, 13(IR:0, SQ:3, MR:1, LR:9, 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	%
0	0	0	1	0	1	1	4.0
0	0	0	2	0	2	2	8.0
0	0	0	0	0	0	3	12.0
0	0	0	0	0	0	4	16.0
0	0	0	1	0	1	5	20.0
0	0	0	0	0	0	6	24.0

Continued on next page...

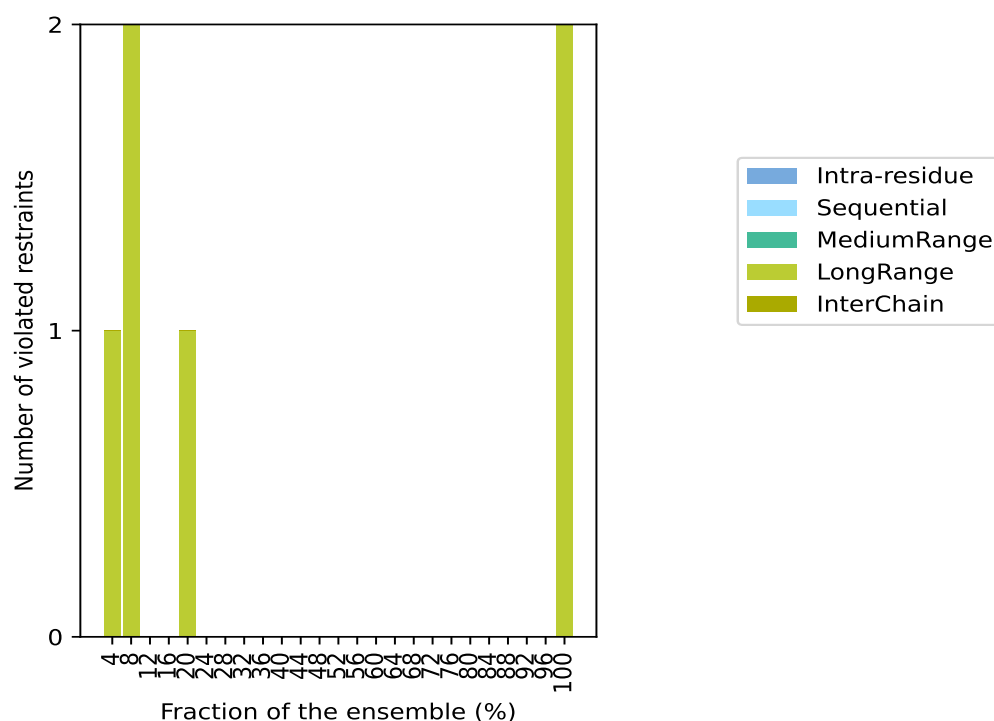
Continued from previous page...

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

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

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

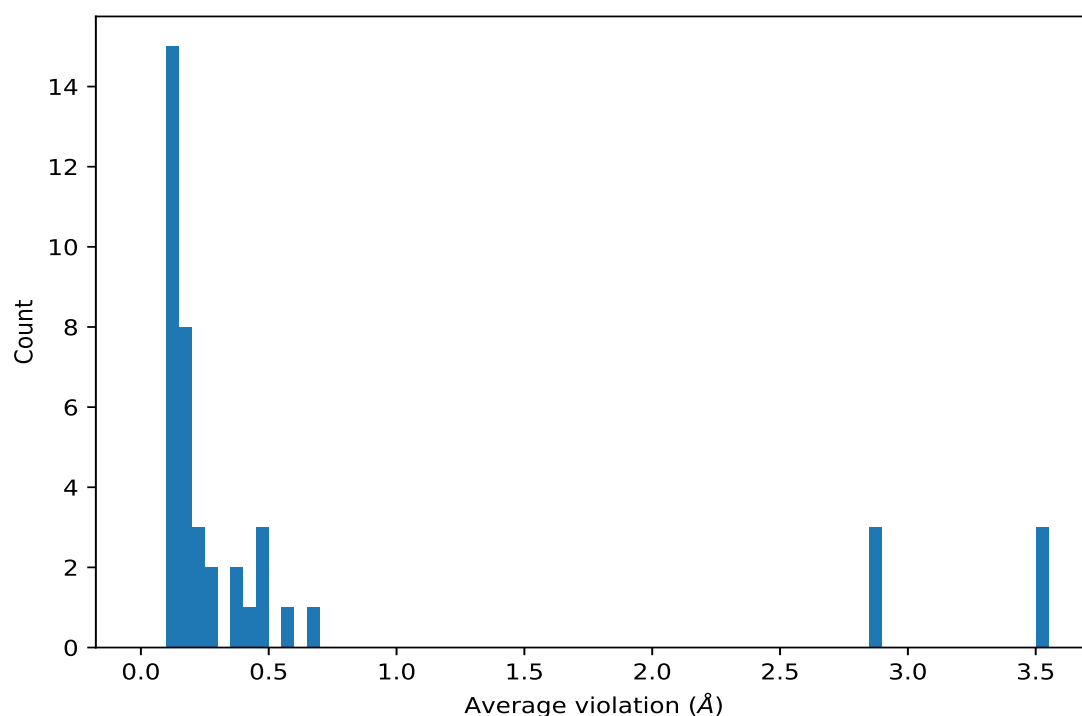
9.3.1 Bar graph : Distance violation statistics for the ensemble [i](#)



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

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

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



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

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

Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)	Median (Å)
(1,17)	1:976:A:LEU:HD11	1:1043:A:ARG:H	25	3.5	1.17	3.88
(1,17)	1:976:A:LEU:HD12	1:1043:A:ARG:H	25	3.5	1.17	3.88
(1,17)	1:976:A:LEU:HD13	1:1043:A:ARG:H	25	3.5	1.17	3.88
(1,10)	1:937:A:ILE:HD11	1:1029:A:ALA:H	25	2.87	1.1	2.31
(1,10)	1:937:A:ILE:HD12	1:1029:A:ALA:H	25	2.87	1.1	2.31
(1,10)	1:937:A:ILE:HD13	1:1029:A:ALA:H	25	2.87	1.1	2.31
(2,42)	1:949:A:GLU:O	1:953:A:PRO:N	25	0.65	0.1	0.65
(2,39)	1:941:A:SER:O	1:945:A:PRO:N	25	0.42	0.07	0.4
(2,1)	1:922:A:ASN:O	1:926:A:TYR:H	25	0.38	0.03	0.39
(2,83)	1:970:A:ASP:O	1:974:A:PRO:N	25	0.37	0.04	0.37
(2,88)	1:973:A:LEU:O	1:977:A:PRO:N	25	0.26	0.03	0.25
(2,40)	1:948:A:PRO:O	1:952:A:VAL:H	25	0.25	0.06	0.23
(2,84)	1:971:A:GLU:O	1:975:A:VAL:H	25	0.24	0.03	0.23
(2,2)	1:922:A:ASN:O	1:926:A:TYR:N	25	0.2	0.03	0.2
(2,89)	1:974:A:PRO:O	1:978:A:ALA:H	24	0.14	0.02	0.14
(2,85)	1:971:A:GLU:O	1:975:A:VAL:N	23	0.15	0.04	0.15

Continued on next page...

Continued from previous page...

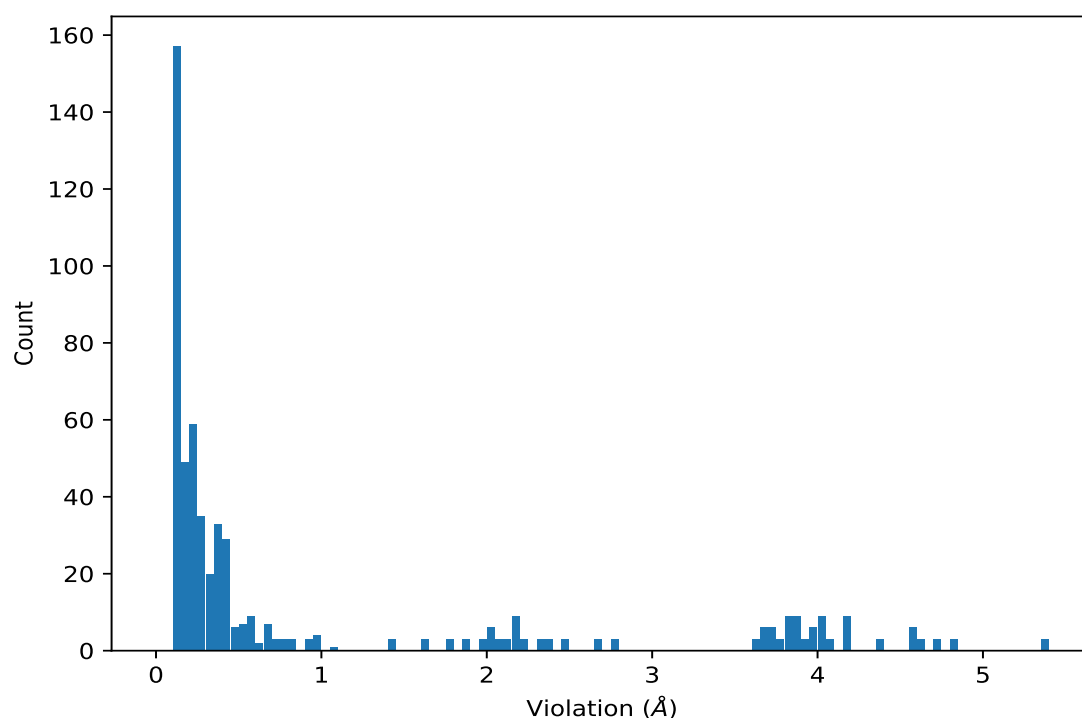
Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)	Median (Å)
(2,41)	1:948:A:PRO:O	1:952:A:VAL:N	19	0.16	0.06	0.13
(2,51)	1:954:A:MET:O	1:958:A:VAL:H	19	0.15	0.04	0.13
(2,93)	1:982:A:ARG:O	1:986:A:MET:H	16	0.16	0.03	0.16
(2,37)	1:940:A:SER:O	1:944:A:GLN:H	16	0.15	0.03	0.14
(2,69)	1:963:A:ARG:O	1:967:A:ALA:H	14	0.13	0.02	0.13
(2,113)	1:992:A:ASN:O	1:996:A:ALA:H	9	0.13	0.02	0.13
(2,139)	1:1005:A:ALA:O	1:1009:A:VAL:H	6	0.14	0.02	0.14
(2,71)	1:964:A:THR:O	1:968:A:THR:H	6	0.13	0.01	0.13
(2,77)	1:967:A:ALA:O	1:971:A:GLU:H	6	0.13	0.02	0.12
(2,193)	1:1040:A:ASP:O	1:1044:A:LEU:H	6	0.13	0.02	0.12
(1,3)	1:980:A:THR:HG21	1:1042:A:ALA:H	5	0.59	0.27	0.58
(2,121)	1:996:A:ALA:O	1:1000:A:ASN:H	4	0.14	0.03	0.15
(2,52)	1:954:A:MET:O	1:958:A:VAL:N	4	0.12	0.01	0.11
(2,179)	1:1033:A:LYS:O	1:1037:A:ASP:H	4	0.11	0.01	0.11
(2,101)	1:986:A:MET:O	1:990:A:LEU:H	3	0.12	0.01	0.12
(2,15)	1:929:A:VAL:O	1:933:A:VAL:H	3	0.11	0.01	0.11
(1,12)	1:1035:A:LEU:HD11	1:991:A:LEU:H	2	0.46	0.07	0.46
(1,12)	1:1035:A:LEU:HD12	1:991:A:LEU:H	2	0.46	0.07	0.46
(1,12)	1:1035:A:LEU:HD13	1:991:A:LEU:H	2	0.46	0.07	0.46
(2,127)	1:999:A:ILE:O	1:1003:A:LYS:H	2	0.2	0.05	0.2
(1,2)	1:965:A:LEU:HD21	1:929:A:VAL:H	2	0.16	0.04	0.16
(1,2)	1:965:A:LEU:HD22	1:929:A:VAL:H	2	0.16	0.04	0.16
(1,2)	1:965:A:LEU:HD23	1:929:A:VAL:H	2	0.16	0.04	0.16
(2,45)	1:951:A:TYR:O	1:955:A:VAL:H	2	0.12	0.02	0.12
(2,57)	1:957:A:GLU:O	1:961:A:ALA:H	2	0.12	0.01	0.12
(2,90)	1:974:A:PRO:O	1:978:A:ALA:N	2	0.12	0.02	0.12

¹Number of violated models, ²Standard deviation

9.5 All violated distance restraints [i](#)

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

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



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

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

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,10)	1:937:A:ILE:HD11	1:1029:A:ALA:H	1	5.39
(1,10)	1:937:A:ILE:HD12	1:1029:A:ALA:H	1	5.39
(1,10)	1:937:A:ILE:HD13	1:1029:A:ALA:H	1	5.39
(1,17)	1:976:A:LEU:HD11	1:1043:A:ARG:H	9	4.81
(1,17)	1:976:A:LEU:HD12	1:1043:A:ARG:H	9	4.81
(1,17)	1:976:A:LEU:HD13	1:1043:A:ARG:H	9	4.81
(1,10)	1:937:A:ILE:HD11	1:1029:A:ALA:H	2	4.72
(1,10)	1:937:A:ILE:HD12	1:1029:A:ALA:H	2	4.72
(1,10)	1:937:A:ILE:HD13	1:1029:A:ALA:H	2	4.72
(1,17)	1:976:A:LEU:HD11	1:1043:A:ARG:H	10	4.63
(1,17)	1:976:A:LEU:HD12	1:1043:A:ARG:H	10	4.63
(1,17)	1:976:A:LEU:HD13	1:1043:A:ARG:H	10	4.63
(1,10)	1:937:A:ILE:HD11	1:1029:A:ALA:H	5	4.6
(1,10)	1:937:A:ILE:HD12	1:1029:A:ALA:H	5	4.6
(1,10)	1:937:A:ILE:HD13	1:1029:A:ALA:H	5	4.6
(1,17)	1:976:A:LEU:HD11	1:1043:A:ARG:H	2	4.57

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,17)	1:976:A:LEU:HD12	1:1043:A:ARG:H	2	4.57
(1,17)	1:976:A:LEU:HD13	1:1043:A:ARG:H	2	4.57
(1,10)	1:937:A:ILE:HD11	1:1029:A:ALA:H	23	4.37
(1,10)	1:937:A:ILE:HD12	1:1029:A:ALA:H	23	4.37
(1,10)	1:937:A:ILE:HD13	1:1029:A:ALA:H	23	4.37
(1,17)	1:976:A:LEU:HD11	1:1043:A:ARG:H	5	4.18
(1,17)	1:976:A:LEU:HD12	1:1043:A:ARG:H	5	4.18
(1,17)	1:976:A:LEU:HD13	1:1043:A:ARG:H	5	4.18
(1,10)	1:937:A:ILE:HD11	1:1029:A:ALA:H	7	4.17
(1,10)	1:937:A:ILE:HD12	1:1029:A:ALA:H	7	4.17
(1,10)	1:937:A:ILE:HD13	1:1029:A:ALA:H	7	4.17
(1,17)	1:976:A:LEU:HD11	1:1043:A:ARG:H	14	4.16
(1,17)	1:976:A:LEU:HD12	1:1043:A:ARG:H	14	4.16
(1,17)	1:976:A:LEU:HD13	1:1043:A:ARG:H	14	4.16
(1,17)	1:976:A:LEU:HD11	1:1043:A:ARG:H	15	4.1
(1,17)	1:976:A:LEU:HD12	1:1043:A:ARG:H	15	4.1
(1,17)	1:976:A:LEU:HD13	1:1043:A:ARG:H	15	4.1
(1,17)	1:976:A:LEU:HD11	1:1043:A:ARG:H	21	4.03
(1,17)	1:976:A:LEU:HD12	1:1043:A:ARG:H	21	4.03
(1,17)	1:976:A:LEU:HD13	1:1043:A:ARG:H	21	4.03
(1,10)	1:937:A:ILE:HD11	1:1029:A:ALA:H	21	4.03
(1,10)	1:937:A:ILE:HD12	1:1029:A:ALA:H	21	4.03
(1,10)	1:937:A:ILE:HD13	1:1029:A:ALA:H	21	4.03
(1,17)	1:976:A:LEU:HD11	1:1043:A:ARG:H	8	4.0
(1,17)	1:976:A:LEU:HD12	1:1043:A:ARG:H	8	4.0
(1,17)	1:976:A:LEU:HD13	1:1043:A:ARG:H	8	4.0
(1,10)	1:937:A:ILE:HD11	1:1029:A:ALA:H	19	3.98
(1,10)	1:937:A:ILE:HD12	1:1029:A:ALA:H	19	3.98
(1,10)	1:937:A:ILE:HD13	1:1029:A:ALA:H	19	3.98
(1,17)	1:976:A:LEU:HD11	1:1043:A:ARG:H	3	3.95
(1,17)	1:976:A:LEU:HD12	1:1043:A:ARG:H	3	3.95
(1,17)	1:976:A:LEU:HD13	1:1043:A:ARG:H	3	3.95
(1,17)	1:976:A:LEU:HD11	1:1043:A:ARG:H	4	3.91
(1,17)	1:976:A:LEU:HD12	1:1043:A:ARG:H	4	3.91
(1,17)	1:976:A:LEU:HD13	1:1043:A:ARG:H	4	3.91
(1,17)	1:976:A:LEU:HD11	1:1043:A:ARG:H	16	3.9
(1,17)	1:976:A:LEU:HD12	1:1043:A:ARG:H	16	3.9
(1,17)	1:976:A:LEU:HD13	1:1043:A:ARG:H	16	3.9
(1,17)	1:976:A:LEU:HD11	1:1043:A:ARG:H	7	3.88
(1,17)	1:976:A:LEU:HD12	1:1043:A:ARG:H	7	3.88
(1,17)	1:976:A:LEU:HD13	1:1043:A:ARG:H	7	3.88
(1,17)	1:976:A:LEU:HD11	1:1043:A:ARG:H	18	3.88

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,17)	1:976:A:LEU:HD12	1:1043:A:ARG:H	18	3.88
(1,17)	1:976:A:LEU:HD13	1:1043:A:ARG:H	18	3.88
(1,17)	1:976:A:LEU:HD11	1:1043:A:ARG:H	13	3.83
(1,17)	1:976:A:LEU:HD12	1:1043:A:ARG:H	13	3.83
(1,17)	1:976:A:LEU:HD13	1:1043:A:ARG:H	13	3.83
(1,17)	1:976:A:LEU:HD11	1:1043:A:ARG:H	19	3.82
(1,17)	1:976:A:LEU:HD12	1:1043:A:ARG:H	19	3.82
(1,17)	1:976:A:LEU:HD13	1:1043:A:ARG:H	19	3.82
(1,17)	1:976:A:LEU:HD11	1:1043:A:ARG:H	22	3.82
(1,17)	1:976:A:LEU:HD12	1:1043:A:ARG:H	22	3.82
(1,17)	1:976:A:LEU:HD13	1:1043:A:ARG:H	22	3.82
(1,10)	1:937:A:ILE:HD11	1:1029:A:ALA:H	8	3.78
(1,10)	1:937:A:ILE:HD12	1:1029:A:ALA:H	8	3.78
(1,10)	1:937:A:ILE:HD13	1:1029:A:ALA:H	8	3.78
(1,17)	1:976:A:LEU:HD11	1:1043:A:ARG:H	23	3.73
(1,17)	1:976:A:LEU:HD12	1:1043:A:ARG:H	23	3.73
(1,17)	1:976:A:LEU:HD13	1:1043:A:ARG:H	23	3.73
(1,17)	1:976:A:LEU:HD11	1:1043:A:ARG:H	24	3.7
(1,17)	1:976:A:LEU:HD12	1:1043:A:ARG:H	24	3.7
(1,17)	1:976:A:LEU:HD13	1:1043:A:ARG:H	24	3.7
(1,17)	1:976:A:LEU:HD11	1:1043:A:ARG:H	6	3.67
(1,17)	1:976:A:LEU:HD12	1:1043:A:ARG:H	6	3.67
(1,17)	1:976:A:LEU:HD13	1:1043:A:ARG:H	6	3.67
(1,17)	1:976:A:LEU:HD11	1:1043:A:ARG:H	25	3.66
(1,17)	1:976:A:LEU:HD12	1:1043:A:ARG:H	25	3.66
(1,17)	1:976:A:LEU:HD13	1:1043:A:ARG:H	25	3.66
(1,17)	1:976:A:LEU:HD11	1:1043:A:ARG:H	11	3.62
(1,17)	1:976:A:LEU:HD12	1:1043:A:ARG:H	11	3.62
(1,17)	1:976:A:LEU:HD13	1:1043:A:ARG:H	11	3.62
(1,10)	1:937:A:ILE:HD11	1:1029:A:ALA:H	22	2.76
(1,10)	1:937:A:ILE:HD12	1:1029:A:ALA:H	22	2.76
(1,10)	1:937:A:ILE:HD13	1:1029:A:ALA:H	22	2.76
(1,10)	1:937:A:ILE:HD11	1:1029:A:ALA:H	25	2.69
(1,10)	1:937:A:ILE:HD12	1:1029:A:ALA:H	25	2.69
(1,10)	1:937:A:ILE:HD13	1:1029:A:ALA:H	25	2.69
(1,10)	1:937:A:ILE:HD11	1:1029:A:ALA:H	24	2.49
(1,10)	1:937:A:ILE:HD12	1:1029:A:ALA:H	24	2.49
(1,10)	1:937:A:ILE:HD13	1:1029:A:ALA:H	24	2.49
(1,10)	1:937:A:ILE:HD11	1:1029:A:ALA:H	12	2.37
(1,10)	1:937:A:ILE:HD12	1:1029:A:ALA:H	12	2.37
(1,10)	1:937:A:ILE:HD13	1:1029:A:ALA:H	12	2.37
(1,10)	1:937:A:ILE:HD11	1:1029:A:ALA:H	20	2.31

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,10)	1:937:A:ILE:HD12	1:1029:A:ALA:H	20	2.31
(1,10)	1:937:A:ILE:HD13	1:1029:A:ALA:H	20	2.31
(1,10)	1:937:A:ILE:HD11	1:1029:A:ALA:H	11	2.24
(1,10)	1:937:A:ILE:HD12	1:1029:A:ALA:H	11	2.24
(1,10)	1:937:A:ILE:HD13	1:1029:A:ALA:H	11	2.24
(1,10)	1:937:A:ILE:HD11	1:1029:A:ALA:H	13	2.18
(1,10)	1:937:A:ILE:HD12	1:1029:A:ALA:H	13	2.18
(1,10)	1:937:A:ILE:HD13	1:1029:A:ALA:H	13	2.18
(1,10)	1:937:A:ILE:HD11	1:1029:A:ALA:H	14	2.18
(1,10)	1:937:A:ILE:HD12	1:1029:A:ALA:H	14	2.18
(1,10)	1:937:A:ILE:HD13	1:1029:A:ALA:H	14	2.18
(1,10)	1:937:A:ILE:HD11	1:1029:A:ALA:H	10	2.17
(1,10)	1:937:A:ILE:HD12	1:1029:A:ALA:H	10	2.17
(1,10)	1:937:A:ILE:HD13	1:1029:A:ALA:H	10	2.17
(1,10)	1:937:A:ILE:HD11	1:1029:A:ALA:H	18	2.12
(1,10)	1:937:A:ILE:HD12	1:1029:A:ALA:H	18	2.12
(1,10)	1:937:A:ILE:HD13	1:1029:A:ALA:H	18	2.12
(1,10)	1:937:A:ILE:HD11	1:1029:A:ALA:H	4	2.07
(1,10)	1:937:A:ILE:HD12	1:1029:A:ALA:H	4	2.07
(1,10)	1:937:A:ILE:HD13	1:1029:A:ALA:H	4	2.07
(1,10)	1:937:A:ILE:HD11	1:1029:A:ALA:H	16	2.04
(1,10)	1:937:A:ILE:HD12	1:1029:A:ALA:H	16	2.04
(1,10)	1:937:A:ILE:HD13	1:1029:A:ALA:H	16	2.04
(1,10)	1:937:A:ILE:HD11	1:1029:A:ALA:H	15	2.01
(1,10)	1:937:A:ILE:HD12	1:1029:A:ALA:H	15	2.01
(1,10)	1:937:A:ILE:HD13	1:1029:A:ALA:H	15	2.01
(1,10)	1:937:A:ILE:HD11	1:1029:A:ALA:H	17	1.97
(1,10)	1:937:A:ILE:HD12	1:1029:A:ALA:H	17	1.97
(1,10)	1:937:A:ILE:HD13	1:1029:A:ALA:H	17	1.97
(1,10)	1:937:A:ILE:HD11	1:1029:A:ALA:H	3	1.85
(1,10)	1:937:A:ILE:HD12	1:1029:A:ALA:H	3	1.85
(1,10)	1:937:A:ILE:HD13	1:1029:A:ALA:H	3	1.85
(1,10)	1:937:A:ILE:HD11	1:1029:A:ALA:H	9	1.75
(1,10)	1:937:A:ILE:HD12	1:1029:A:ALA:H	9	1.75
(1,10)	1:937:A:ILE:HD13	1:1029:A:ALA:H	9	1.75
(1,10)	1:937:A:ILE:HD11	1:1029:A:ALA:H	6	1.61
(1,10)	1:937:A:ILE:HD12	1:1029:A:ALA:H	6	1.61
(1,10)	1:937:A:ILE:HD13	1:1029:A:ALA:H	6	1.61
(1,17)	1:976:A:LEU:HD11	1:1043:A:ARG:H	17	1.44
(1,17)	1:976:A:LEU:HD12	1:1043:A:ARG:H	17	1.44
(1,17)	1:976:A:LEU:HD13	1:1043:A:ARG:H	17	1.44
(1,3)	1:980:A:THR:HG21	1:1042:A:ALA:H	6	1.09

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,19)	1:995:A:LEU:HD11	1:959:A:GLY:H	25	0.99
(1,19)	1:995:A:LEU:HD12	1:959:A:GLY:H	25	0.99
(1,19)	1:995:A:LEU:HD13	1:959:A:GLY:H	25	0.99
(2,42)	1:949:A:GLU:O	1:953:A:PRO:N	24	0.97
(1,17)	1:976:A:LEU:HD11	1:1043:A:ARG:H	20	0.9
(1,17)	1:976:A:LEU:HD12	1:1043:A:ARG:H	20	0.9
(1,17)	1:976:A:LEU:HD13	1:1043:A:ARG:H	20	0.9
(1,17)	1:976:A:LEU:HD11	1:1043:A:ARG:H	1	0.81
(1,17)	1:976:A:LEU:HD12	1:1043:A:ARG:H	1	0.81
(1,17)	1:976:A:LEU:HD13	1:1043:A:ARG:H	1	0.81
(2,42)	1:949:A:GLU:O	1:953:A:PRO:N	23	0.76
(2,42)	1:949:A:GLU:O	1:953:A:PRO:N	16	0.75
(2,39)	1:941:A:SER:O	1:945:A:PRO:N	15	0.75
(2,42)	1:949:A:GLU:O	1:953:A:PRO:N	22	0.74
(2,42)	1:949:A:GLU:O	1:953:A:PRO:N	8	0.72
(2,42)	1:949:A:GLU:O	1:953:A:PRO:N	6	0.71
(2,42)	1:949:A:GLU:O	1:953:A:PRO:N	15	0.7
(2,42)	1:949:A:GLU:O	1:953:A:PRO:N	5	0.68
(2,42)	1:949:A:GLU:O	1:953:A:PRO:N	11	0.67
(2,42)	1:949:A:GLU:O	1:953:A:PRO:N	12	0.66
(2,42)	1:949:A:GLU:O	1:953:A:PRO:N	7	0.65
(2,42)	1:949:A:GLU:O	1:953:A:PRO:N	13	0.65
(2,42)	1:949:A:GLU:O	1:953:A:PRO:N	14	0.65
(2,42)	1:949:A:GLU:O	1:953:A:PRO:N	18	0.64
(2,42)	1:949:A:GLU:O	1:953:A:PRO:N	21	0.61
(2,42)	1:949:A:GLU:O	1:953:A:PRO:N	3	0.6
(2,42)	1:949:A:GLU:O	1:953:A:PRO:N	9	0.6
(2,42)	1:949:A:GLU:O	1:953:A:PRO:N	10	0.6
(2,42)	1:949:A:GLU:O	1:953:A:PRO:N	20	0.59
(1,3)	1:980:A:THR:HG21	1:1042:A:ALA:H	14	0.59
(2,42)	1:949:A:GLU:O	1:953:A:PRO:N	25	0.58
(1,3)	1:980:A:THR:HG21	1:1042:A:ALA:H	10	0.58
(2,42)	1:949:A:GLU:O	1:953:A:PRO:N	1	0.57
(2,42)	1:949:A:GLU:O	1:953:A:PRO:N	2	0.55
(1,17)	1:976:A:LEU:HD11	1:1043:A:ARG:H	12	0.54
(1,17)	1:976:A:LEU:HD12	1:1043:A:ARG:H	12	0.54
(1,17)	1:976:A:LEU:HD13	1:1043:A:ARG:H	12	0.54
(1,12)	1:1035:A:LEU:HD11	1:991:A:LEU:H	25	0.53
(1,12)	1:1035:A:LEU:HD12	1:991:A:LEU:H	25	0.53
(1,12)	1:1035:A:LEU:HD13	1:991:A:LEU:H	25	0.53
(2,42)	1:949:A:GLU:O	1:953:A:PRO:N	19	0.52
(2,42)	1:949:A:GLU:O	1:953:A:PRO:N	17	0.49

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,83)	1:970:A:ASP:O	1:974:A:PRO:N	23	0.48
(2,42)	1:949:A:GLU:O	1:953:A:PRO:N	4	0.48
(2,39)	1:941:A:SER:O	1:945:A:PRO:N	17	0.48
(2,39)	1:941:A:SER:O	1:945:A:PRO:N	9	0.46
(2,1)	1:922:A:ASN:O	1:926:A:TYR:H	1	0.45
(2,39)	1:941:A:SER:O	1:945:A:PRO:N	11	0.44
(2,39)	1:941:A:SER:O	1:945:A:PRO:N	21	0.44
(2,40)	1:948:A:PRO:O	1:952:A:VAL:H	21	0.43
(2,39)	1:941:A:SER:O	1:945:A:PRO:N	8	0.43
(2,39)	1:941:A:SER:O	1:945:A:PRO:N	25	0.43
(2,1)	1:922:A:ASN:O	1:926:A:TYR:H	21	0.43
(2,83)	1:970:A:ASP:O	1:974:A:PRO:N	1	0.42
(2,83)	1:970:A:ASP:O	1:974:A:PRO:N	13	0.42
(2,83)	1:970:A:ASP:O	1:974:A:PRO:N	19	0.42
(2,39)	1:941:A:SER:O	1:945:A:PRO:N	7	0.42
(2,39)	1:941:A:SER:O	1:945:A:PRO:N	13	0.42
(2,39)	1:941:A:SER:O	1:945:A:PRO:N	20	0.42
(2,39)	1:941:A:SER:O	1:945:A:PRO:N	22	0.42
(2,1)	1:922:A:ASN:O	1:926:A:TYR:H	11	0.42
(2,83)	1:970:A:ASP:O	1:974:A:PRO:N	18	0.41
(2,39)	1:941:A:SER:O	1:945:A:PRO:N	4	0.41
(2,1)	1:922:A:ASN:O	1:926:A:TYR:H	2	0.41
(2,1)	1:922:A:ASN:O	1:926:A:TYR:H	5	0.41
(2,1)	1:922:A:ASN:O	1:926:A:TYR:H	9	0.41
(2,83)	1:970:A:ASP:O	1:974:A:PRO:N	7	0.4
(2,83)	1:970:A:ASP:O	1:974:A:PRO:N	16	0.4
(2,83)	1:970:A:ASP:O	1:974:A:PRO:N	17	0.4
(2,39)	1:941:A:SER:O	1:945:A:PRO:N	3	0.4
(2,39)	1:941:A:SER:O	1:945:A:PRO:N	5	0.4
(2,39)	1:941:A:SER:O	1:945:A:PRO:N	23	0.4
(2,39)	1:941:A:SER:O	1:945:A:PRO:N	24	0.4
(2,1)	1:922:A:ASN:O	1:926:A:TYR:H	13	0.4
(2,1)	1:922:A:ASN:O	1:926:A:TYR:H	14	0.4
(2,1)	1:922:A:ASN:O	1:926:A:TYR:H	19	0.4
(2,39)	1:941:A:SER:O	1:945:A:PRO:N	10	0.39
(2,39)	1:941:A:SER:O	1:945:A:PRO:N	18	0.39
(2,1)	1:922:A:ASN:O	1:926:A:TYR:H	4	0.39
(2,1)	1:922:A:ASN:O	1:926:A:TYR:H	7	0.39
(2,1)	1:922:A:ASN:O	1:926:A:TYR:H	15	0.39
(2,1)	1:922:A:ASN:O	1:926:A:TYR:H	16	0.39
(2,1)	1:922:A:ASN:O	1:926:A:TYR:H	17	0.39
(2,1)	1:922:A:ASN:O	1:926:A:TYR:H	24	0.39

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,12)	1:1035:A:LEU:HD11	1:991:A:LEU:H	1	0.39
(1,12)	1:1035:A:LEU:HD12	1:991:A:LEU:H	1	0.39
(1,12)	1:1035:A:LEU:HD13	1:991:A:LEU:H	1	0.39
(2,83)	1:970:A:ASP:O	1:974:A:PRO:N	6	0.38
(2,83)	1:970:A:ASP:O	1:974:A:PRO:N	14	0.38
(2,39)	1:941:A:SER:O	1:945:A:PRO:N	2	0.38
(2,39)	1:941:A:SER:O	1:945:A:PRO:N	6	0.38
(2,39)	1:941:A:SER:O	1:945:A:PRO:N	12	0.38
(2,39)	1:941:A:SER:O	1:945:A:PRO:N	14	0.38
(2,39)	1:941:A:SER:O	1:945:A:PRO:N	19	0.38
(2,1)	1:922:A:ASN:O	1:926:A:TYR:H	23	0.38
(2,83)	1:970:A:ASP:O	1:974:A:PRO:N	4	0.37
(2,83)	1:970:A:ASP:O	1:974:A:PRO:N	5	0.37
(2,83)	1:970:A:ASP:O	1:974:A:PRO:N	22	0.37
(2,83)	1:970:A:ASP:O	1:974:A:PRO:N	25	0.37
(2,40)	1:948:A:PRO:O	1:952:A:VAL:H	14	0.37
(2,1)	1:922:A:ASN:O	1:926:A:TYR:H	10	0.37
(2,1)	1:922:A:ASN:O	1:926:A:TYR:H	18	0.37
(2,83)	1:970:A:ASP:O	1:974:A:PRO:N	3	0.36
(2,83)	1:970:A:ASP:O	1:974:A:PRO:N	12	0.36
(2,83)	1:970:A:ASP:O	1:974:A:PRO:N	15	0.36
(2,39)	1:941:A:SER:O	1:945:A:PRO:N	16	0.36
(2,1)	1:922:A:ASN:O	1:926:A:TYR:H	3	0.36
(2,1)	1:922:A:ASN:O	1:926:A:TYR:H	8	0.36
(1,3)	1:980:A:THR:HG21	1:1042:A:ALA:H	13	0.36
(2,83)	1:970:A:ASP:O	1:974:A:PRO:N	11	0.35
(2,40)	1:948:A:PRO:O	1:952:A:VAL:H	16	0.35
(2,39)	1:941:A:SER:O	1:945:A:PRO:N	1	0.35
(2,1)	1:922:A:ASN:O	1:926:A:TYR:H	12	0.35
(2,1)	1:922:A:ASN:O	1:926:A:TYR:H	25	0.35
(1,3)	1:980:A:THR:HG21	1:1042:A:ALA:H	15	0.35
(2,1)	1:922:A:ASN:O	1:926:A:TYR:H	6	0.34
(2,83)	1:970:A:ASP:O	1:974:A:PRO:N	8	0.33
(2,83)	1:970:A:ASP:O	1:974:A:PRO:N	10	0.33
(2,40)	1:948:A:PRO:O	1:952:A:VAL:H	18	0.33
(2,1)	1:922:A:ASN:O	1:926:A:TYR:H	22	0.33
(2,88)	1:973:A:LEU:O	1:977:A:PRO:N	8	0.32
(2,88)	1:973:A:LEU:O	1:977:A:PRO:N	17	0.32
(2,84)	1:971:A:GLU:O	1:975:A:VAL:H	12	0.32
(2,83)	1:970:A:ASP:O	1:974:A:PRO:N	2	0.32
(2,83)	1:970:A:ASP:O	1:974:A:PRO:N	9	0.32
(2,83)	1:970:A:ASP:O	1:974:A:PRO:N	24	0.32

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,1)	1:922:A:ASN:O	1:926:A:TYR:H	20	0.32
(2,88)	1:973:A:LEU:O	1:977:A:PRO:N	10	0.31
(2,41)	1:948:A:PRO:O	1:952:A:VAL:N	21	0.31
(2,88)	1:973:A:LEU:O	1:977:A:PRO:N	1	0.3
(2,88)	1:973:A:LEU:O	1:977:A:PRO:N	2	0.3
(2,84)	1:971:A:GLU:O	1:975:A:VAL:H	17	0.3
(2,83)	1:970:A:ASP:O	1:974:A:PRO:N	20	0.3
(2,40)	1:948:A:PRO:O	1:952:A:VAL:H	2	0.3
(2,40)	1:948:A:PRO:O	1:952:A:VAL:H	7	0.3
(2,88)	1:973:A:LEU:O	1:977:A:PRO:N	15	0.29
(2,83)	1:970:A:ASP:O	1:974:A:PRO:N	21	0.29
(2,2)	1:922:A:ASN:O	1:926:A:TYR:N	1	0.29
(2,88)	1:973:A:LEU:O	1:977:A:PRO:N	14	0.28
(2,88)	1:973:A:LEU:O	1:977:A:PRO:N	20	0.28
(2,88)	1:973:A:LEU:O	1:977:A:PRO:N	24	0.28
(2,84)	1:971:A:GLU:O	1:975:A:VAL:H	20	0.28
(2,88)	1:973:A:LEU:O	1:977:A:PRO:N	3	0.27
(2,88)	1:973:A:LEU:O	1:977:A:PRO:N	12	0.27
(2,84)	1:971:A:GLU:O	1:975:A:VAL:H	1	0.27
(2,40)	1:948:A:PRO:O	1:952:A:VAL:H	10	0.27
(2,88)	1:973:A:LEU:O	1:977:A:PRO:N	9	0.26
(2,85)	1:971:A:GLU:O	1:975:A:VAL:N	12	0.26
(2,84)	1:971:A:GLU:O	1:975:A:VAL:H	2	0.26
(2,84)	1:971:A:GLU:O	1:975:A:VAL:H	3	0.26
(2,84)	1:971:A:GLU:O	1:975:A:VAL:H	9	0.26
(2,84)	1:971:A:GLU:O	1:975:A:VAL:H	25	0.26
(2,41)	1:948:A:PRO:O	1:952:A:VAL:N	14	0.26
(2,127)	1:999:A:ILE:O	1:1003:A:LYS:H	15	0.25
(2,88)	1:973:A:LEU:O	1:977:A:PRO:N	6	0.25
(2,88)	1:973:A:LEU:O	1:977:A:PRO:N	7	0.25
(2,88)	1:973:A:LEU:O	1:977:A:PRO:N	21	0.25
(2,88)	1:973:A:LEU:O	1:977:A:PRO:N	25	0.25
(2,84)	1:971:A:GLU:O	1:975:A:VAL:H	4	0.25
(2,84)	1:971:A:GLU:O	1:975:A:VAL:H	8	0.25
(2,40)	1:948:A:PRO:O	1:952:A:VAL:H	1	0.25
(2,40)	1:948:A:PRO:O	1:952:A:VAL:H	4	0.25
(2,40)	1:948:A:PRO:O	1:952:A:VAL:H	17	0.25
(2,2)	1:922:A:ASN:O	1:926:A:TYR:N	21	0.25
(2,88)	1:973:A:LEU:O	1:977:A:PRO:N	16	0.24
(2,88)	1:973:A:LEU:O	1:977:A:PRO:N	19	0.24
(2,88)	1:973:A:LEU:O	1:977:A:PRO:N	23	0.24
(2,84)	1:971:A:GLU:O	1:975:A:VAL:H	5	0.24

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,84)	1:971:A:GLU:O	1:975:A:VAL:H	14	0.24
(2,40)	1:948:A:PRO:O	1:952:A:VAL:H	3	0.24
(2,40)	1:948:A:PRO:O	1:952:A:VAL:H	11	0.24
(2,2)	1:922:A:ASN:O	1:926:A:TYR:N	11	0.24
(2,93)	1:982:A:ARG:O	1:986:A:MET:H	18	0.23
(2,93)	1:982:A:ARG:O	1:986:A:MET:H	22	0.23
(2,88)	1:973:A:LEU:O	1:977:A:PRO:N	5	0.23
(2,88)	1:973:A:LEU:O	1:977:A:PRO:N	13	0.23
(2,88)	1:973:A:LEU:O	1:977:A:PRO:N	18	0.23
(2,88)	1:973:A:LEU:O	1:977:A:PRO:N	22	0.23
(2,84)	1:971:A:GLU:O	1:975:A:VAL:H	7	0.23
(2,84)	1:971:A:GLU:O	1:975:A:VAL:H	10	0.23
(2,84)	1:971:A:GLU:O	1:975:A:VAL:H	15	0.23
(2,84)	1:971:A:GLU:O	1:975:A:VAL:H	18	0.23
(2,84)	1:971:A:GLU:O	1:975:A:VAL:H	21	0.23
(2,51)	1:954:A:MET:O	1:958:A:VAL:H	23	0.23
(2,41)	1:948:A:PRO:O	1:952:A:VAL:N	16	0.23
(2,40)	1:948:A:PRO:O	1:952:A:VAL:H	5	0.23
(2,40)	1:948:A:PRO:O	1:952:A:VAL:H	9	0.23
(2,40)	1:948:A:PRO:O	1:952:A:VAL:H	12	0.23
(2,40)	1:948:A:PRO:O	1:952:A:VAL:H	15	0.23
(2,40)	1:948:A:PRO:O	1:952:A:VAL:H	23	0.23
(2,2)	1:922:A:ASN:O	1:926:A:TYR:N	2	0.23
(2,2)	1:922:A:ASN:O	1:926:A:TYR:N	5	0.23
(2,88)	1:973:A:LEU:O	1:977:A:PRO:N	4	0.22
(2,88)	1:973:A:LEU:O	1:977:A:PRO:N	11	0.22
(2,84)	1:971:A:GLU:O	1:975:A:VAL:H	6	0.22
(2,84)	1:971:A:GLU:O	1:975:A:VAL:H	11	0.22
(2,84)	1:971:A:GLU:O	1:975:A:VAL:H	16	0.22
(2,51)	1:954:A:MET:O	1:958:A:VAL:H	25	0.22
(2,2)	1:922:A:ASN:O	1:926:A:TYR:N	15	0.22
(2,2)	1:922:A:ASN:O	1:926:A:TYR:N	17	0.22
(2,85)	1:971:A:GLU:O	1:975:A:VAL:N	17	0.21
(2,84)	1:971:A:GLU:O	1:975:A:VAL:H	13	0.21
(2,51)	1:954:A:MET:O	1:958:A:VAL:H	15	0.21
(2,41)	1:948:A:PRO:O	1:952:A:VAL:N	18	0.21
(2,40)	1:948:A:PRO:O	1:952:A:VAL:H	24	0.21
(2,37)	1:940:A:SER:O	1:944:A:GLN:H	2	0.21
(2,2)	1:922:A:ASN:O	1:926:A:TYR:N	14	0.21
(2,2)	1:922:A:ASN:O	1:926:A:TYR:N	19	0.21
(2,2)	1:922:A:ASN:O	1:926:A:TYR:N	24	0.21
(2,89)	1:974:A:PRO:O	1:978:A:ALA:H	22	0.2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,84)	1:971:A:GLU:O	1:975:A:VAL:H	19	0.2
(2,84)	1:971:A:GLU:O	1:975:A:VAL:H	24	0.2
(2,51)	1:954:A:MET:O	1:958:A:VAL:H	20	0.2
(2,40)	1:948:A:PRO:O	1:952:A:VAL:H	13	0.2
(2,40)	1:948:A:PRO:O	1:952:A:VAL:H	22	0.2
(2,40)	1:948:A:PRO:O	1:952:A:VAL:H	25	0.2
(2,2)	1:922:A:ASN:O	1:926:A:TYR:N	12	0.2
(2,2)	1:922:A:ASN:O	1:926:A:TYR:N	13	0.2
(2,2)	1:922:A:ASN:O	1:926:A:TYR:N	16	0.2
(2,2)	1:922:A:ASN:O	1:926:A:TYR:N	23	0.2
(1,2)	1:965:A:LEU:HD21	1:929:A:VAL:H	11	0.2
(1,2)	1:965:A:LEU:HD22	1:929:A:VAL:H	11	0.2
(1,2)	1:965:A:LEU:HD23	1:929:A:VAL:H	11	0.2
(2,93)	1:982:A:ARG:O	1:986:A:MET:H	11	0.19
(2,85)	1:971:A:GLU:O	1:975:A:VAL:N	20	0.19
(2,84)	1:971:A:GLU:O	1:975:A:VAL:H	22	0.19
(2,2)	1:922:A:ASN:O	1:926:A:TYR:N	3	0.19
(2,2)	1:922:A:ASN:O	1:926:A:TYR:N	4	0.19
(2,2)	1:922:A:ASN:O	1:926:A:TYR:N	7	0.19
(2,2)	1:922:A:ASN:O	1:926:A:TYR:N	9	0.19
(2,121)	1:996:A:ALA:O	1:1000:A:ASN:H	11	0.18
(2,85)	1:971:A:GLU:O	1:975:A:VAL:N	25	0.18
(2,77)	1:967:A:ALA:O	1:971:A:GLU:H	8	0.18
(2,51)	1:954:A:MET:O	1:958:A:VAL:H	6	0.18
(2,41)	1:948:A:PRO:O	1:952:A:VAL:N	2	0.18
(2,41)	1:948:A:PRO:O	1:952:A:VAL:N	7	0.18
(2,40)	1:948:A:PRO:O	1:952:A:VAL:H	6	0.18
(2,37)	1:940:A:SER:O	1:944:A:GLN:H	24	0.18
(2,2)	1:922:A:ASN:O	1:926:A:TYR:N	6	0.18
(2,2)	1:922:A:ASN:O	1:926:A:TYR:N	8	0.18
(2,2)	1:922:A:ASN:O	1:926:A:TYR:N	10	0.18
(2,2)	1:922:A:ASN:O	1:926:A:TYR:N	18	0.18
(2,2)	1:922:A:ASN:O	1:926:A:TYR:N	25	0.18
(2,93)	1:982:A:ARG:O	1:986:A:MET:H	8	0.17
(2,93)	1:982:A:ARG:O	1:986:A:MET:H	24	0.17
(2,89)	1:974:A:PRO:O	1:978:A:ALA:H	8	0.17
(2,89)	1:974:A:PRO:O	1:978:A:ALA:H	24	0.17
(2,85)	1:971:A:GLU:O	1:975:A:VAL:N	1	0.17
(2,85)	1:971:A:GLU:O	1:975:A:VAL:N	3	0.17
(2,84)	1:971:A:GLU:O	1:975:A:VAL:H	23	0.17
(2,69)	1:963:A:ARG:O	1:967:A:ALA:H	2	0.17
(2,40)	1:948:A:PRO:O	1:952:A:VAL:H	8	0.17

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,40)	1:948:A:PRO:O	1:952:A:VAL:H	19	0.17
(2,40)	1:948:A:PRO:O	1:952:A:VAL:H	20	0.17
(2,37)	1:940:A:SER:O	1:944:A:GLN:H	5	0.17
(2,37)	1:940:A:SER:O	1:944:A:GLN:H	7	0.17
(2,37)	1:940:A:SER:O	1:944:A:GLN:H	18	0.17
(2,139)	1:1005:A:ALA:O	1:1009:A:VAL:H	17	0.16
(2,121)	1:996:A:ALA:O	1:1000:A:ASN:H	15	0.16
(2,113)	1:992:A:ASN:O	1:996:A:ALA:H	2	0.16
(2,113)	1:992:A:ASN:O	1:996:A:ALA:H	6	0.16
(2,93)	1:982:A:ARG:O	1:986:A:MET:H	12	0.16
(2,93)	1:982:A:ARG:O	1:986:A:MET:H	21	0.16
(2,93)	1:982:A:ARG:O	1:986:A:MET:H	25	0.16
(2,89)	1:974:A:PRO:O	1:978:A:ALA:H	9	0.16
(2,89)	1:974:A:PRO:O	1:978:A:ALA:H	18	0.16
(2,89)	1:974:A:PRO:O	1:978:A:ALA:H	21	0.16
(2,85)	1:971:A:GLU:O	1:975:A:VAL:N	4	0.16
(2,85)	1:971:A:GLU:O	1:975:A:VAL:N	5	0.16
(2,85)	1:971:A:GLU:O	1:975:A:VAL:N	8	0.16
(2,69)	1:963:A:ARG:O	1:967:A:ALA:H	1	0.16
(2,25)	1:934:A:LYS:O	1:938:A:GLU:H	16	0.16
(2,193)	1:1040:A:ASP:O	1:1044:A:LEU:H	24	0.15
(2,139)	1:1005:A:ALA:O	1:1009:A:VAL:H	12	0.15
(2,109)	1:990:A:LEU:O	1:994:A:ASP:H	25	0.15
(2,93)	1:982:A:ARG:O	1:986:A:MET:H	3	0.15
(2,89)	1:974:A:PRO:O	1:978:A:ALA:H	5	0.15
(2,89)	1:974:A:PRO:O	1:978:A:ALA:H	6	0.15
(2,89)	1:974:A:PRO:O	1:978:A:ALA:H	16	0.15
(2,89)	1:974:A:PRO:O	1:978:A:ALA:H	19	0.15
(2,89)	1:974:A:PRO:O	1:978:A:ALA:H	25	0.15
(2,85)	1:971:A:GLU:O	1:975:A:VAL:N	2	0.15
(2,85)	1:971:A:GLU:O	1:975:A:VAL:N	7	0.15
(2,85)	1:971:A:GLU:O	1:975:A:VAL:N	9	0.15
(2,85)	1:971:A:GLU:O	1:975:A:VAL:N	18	0.15
(2,71)	1:964:A:THR:O	1:968:A:THR:H	19	0.15
(2,69)	1:963:A:ARG:O	1:967:A:ALA:H	19	0.15
(2,51)	1:954:A:MET:O	1:958:A:VAL:H	10	0.15
(2,45)	1:951:A:TYR:O	1:955:A:VAL:H	17	0.15
(2,37)	1:940:A:SER:O	1:944:A:GLN:H	3	0.15
(2,37)	1:940:A:SER:O	1:944:A:GLN:H	23	0.15
(2,2)	1:922:A:ASN:O	1:926:A:TYR:N	20	0.15
(2,193)	1:1040:A:ASP:O	1:1044:A:LEU:H	16	0.14
(2,139)	1:1005:A:ALA:O	1:1009:A:VAL:H	8	0.14

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,127)	1:999:A:ILE:O	1:1003:A:LYS:H	11	0.14
(2,113)	1:992:A:ASN:O	1:996:A:ALA:H	7	0.14
(2,113)	1:992:A:ASN:O	1:996:A:ALA:H	24	0.14
(2,101)	1:986:A:MET:O	1:990:A:LEU:H	18	0.14
(2,93)	1:982:A:ARG:O	1:986:A:MET:H	6	0.14
(2,93)	1:982:A:ARG:O	1:986:A:MET:H	9	0.14
(2,93)	1:982:A:ARG:O	1:986:A:MET:H	16	0.14
(2,89)	1:974:A:PRO:O	1:978:A:ALA:H	2	0.14
(2,89)	1:974:A:PRO:O	1:978:A:ALA:H	11	0.14
(2,89)	1:974:A:PRO:O	1:978:A:ALA:H	23	0.14
(2,71)	1:964:A:THR:O	1:968:A:THR:H	25	0.14
(2,69)	1:963:A:ARG:O	1:967:A:ALA:H	3	0.14
(2,69)	1:963:A:ARG:O	1:967:A:ALA:H	6	0.14
(2,52)	1:954:A:MET:O	1:958:A:VAL:N	15	0.14
(2,51)	1:954:A:MET:O	1:958:A:VAL:H	5	0.14
(2,51)	1:954:A:MET:O	1:958:A:VAL:H	9	0.14
(2,41)	1:948:A:PRO:O	1:952:A:VAL:N	3	0.14
(2,41)	1:948:A:PRO:O	1:952:A:VAL:N	4	0.14
(2,37)	1:940:A:SER:O	1:944:A:GLN:H	13	0.14
(2,2)	1:922:A:ASN:O	1:926:A:TYR:N	22	0.14
(2,193)	1:1040:A:ASP:O	1:1044:A:LEU:H	21	0.13
(2,149)	1:1018:A:LYS:O	1:1022:A:LEU:H	20	0.13
(2,139)	1:1005:A:ALA:O	1:1009:A:VAL:H	1	0.13
(2,121)	1:996:A:ALA:O	1:1000:A:ASN:H	20	0.13
(2,113)	1:992:A:ASN:O	1:996:A:ALA:H	16	0.13
(2,90)	1:974:A:PRO:O	1:978:A:ALA:N	22	0.13
(2,89)	1:974:A:PRO:O	1:978:A:ALA:H	1	0.13
(2,89)	1:974:A:PRO:O	1:978:A:ALA:H	4	0.13
(2,85)	1:971:A:GLU:O	1:975:A:VAL:N	11	0.13
(2,85)	1:971:A:GLU:O	1:975:A:VAL:N	14	0.13
(2,85)	1:971:A:GLU:O	1:975:A:VAL:N	21	0.13
(2,85)	1:971:A:GLU:O	1:975:A:VAL:N	24	0.13
(2,77)	1:967:A:ALA:O	1:971:A:GLU:H	13	0.13
(2,71)	1:964:A:THR:O	1:968:A:THR:H	2	0.13
(2,71)	1:964:A:THR:O	1:968:A:THR:H	12	0.13
(2,71)	1:964:A:THR:O	1:968:A:THR:H	24	0.13
(2,69)	1:963:A:ARG:O	1:967:A:ALA:H	5	0.13
(2,69)	1:963:A:ARG:O	1:967:A:ALA:H	13	0.13
(2,69)	1:963:A:ARG:O	1:967:A:ALA:H	15	0.13
(2,57)	1:957:A:GLU:O	1:961:A:ALA:H	11	0.13
(2,51)	1:954:A:MET:O	1:958:A:VAL:H	11	0.13
(2,51)	1:954:A:MET:O	1:958:A:VAL:H	12	0.13

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,51)	1:954:A:MET:O	1:958:A:VAL:H	13	0.13
(2,51)	1:954:A:MET:O	1:958:A:VAL:H	16	0.13
(2,51)	1:954:A:MET:O	1:958:A:VAL:H	17	0.13
(2,51)	1:954:A:MET:O	1:958:A:VAL:H	24	0.13
(2,41)	1:948:A:PRO:O	1:952:A:VAL:N	10	0.13
(2,41)	1:948:A:PRO:O	1:952:A:VAL:N	15	0.13
(2,41)	1:948:A:PRO:O	1:952:A:VAL:N	24	0.13
(2,37)	1:940:A:SER:O	1:944:A:GLN:H	1	0.13
(2,37)	1:940:A:SER:O	1:944:A:GLN:H	6	0.13
(2,37)	1:940:A:SER:O	1:944:A:GLN:H	10	0.13
(2,37)	1:940:A:SER:O	1:944:A:GLN:H	16	0.13
(1,2)	1:965:A:LEU:HD21	1:929:A:VAL:H	24	0.13
(1,2)	1:965:A:LEU:HD22	1:929:A:VAL:H	24	0.13
(1,2)	1:965:A:LEU:HD23	1:929:A:VAL:H	24	0.13
(2,205)	1:1046:A:MET:O	1:1050:A:SER:H	22	0.12
(2,193)	1:1040:A:ASP:O	1:1044:A:LEU:H	20	0.12
(2,185)	1:1036:A:LEU:O	1:1040:A:ASP:H	16	0.12
(2,179)	1:1033:A:LYS:O	1:1037:A:ASP:H	17	0.12
(2,139)	1:1005:A:ALA:O	1:1009:A:VAL:H	15	0.12
(2,113)	1:992:A:ASN:O	1:996:A:ALA:H	5	0.12
(2,101)	1:986:A:MET:O	1:990:A:LEU:H	9	0.12
(2,93)	1:982:A:ARG:O	1:986:A:MET:H	4	0.12
(2,93)	1:982:A:ARG:O	1:986:A:MET:H	10	0.12
(2,93)	1:982:A:ARG:O	1:986:A:MET:H	17	0.12
(2,89)	1:974:A:PRO:O	1:978:A:ALA:H	3	0.12
(2,89)	1:974:A:PRO:O	1:978:A:ALA:H	10	0.12
(2,89)	1:974:A:PRO:O	1:978:A:ALA:H	13	0.12
(2,85)	1:971:A:GLU:O	1:975:A:VAL:N	6	0.12
(2,85)	1:971:A:GLU:O	1:975:A:VAL:N	16	0.12
(2,77)	1:967:A:ALA:O	1:971:A:GLU:H	1	0.12
(2,77)	1:967:A:ALA:O	1:971:A:GLU:H	4	0.12
(2,77)	1:967:A:ALA:O	1:971:A:GLU:H	15	0.12
(2,71)	1:964:A:THR:O	1:968:A:THR:H	5	0.12
(2,69)	1:963:A:ARG:O	1:967:A:ALA:H	22	0.12
(2,57)	1:957:A:GLU:O	1:961:A:ALA:H	22	0.12
(2,41)	1:948:A:PRO:O	1:952:A:VAL:N	1	0.12
(2,41)	1:948:A:PRO:O	1:952:A:VAL:N	5	0.12
(2,41)	1:948:A:PRO:O	1:952:A:VAL:N	6	0.12
(2,41)	1:948:A:PRO:O	1:952:A:VAL:N	9	0.12
(2,41)	1:948:A:PRO:O	1:952:A:VAL:N	11	0.12
(2,41)	1:948:A:PRO:O	1:952:A:VAL:N	22	0.12
(2,41)	1:948:A:PRO:O	1:952:A:VAL:N	23	0.12

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,37)	1:940:A:SER:O	1:944:A:GLN:H	4	0.12
(2,37)	1:940:A:SER:O	1:944:A:GLN:H	19	0.12
(2,37)	1:940:A:SER:O	1:944:A:GLN:H	22	0.12
(2,15)	1:929:A:VAL:O	1:933:A:VAL:H	12	0.12
(2,207)	1:1047:A:ILE:O	1:1051:A:ARG:H	16	0.11
(2,199)	1:1043:A:ARG:O	1:1047:A:ILE:H	7	0.11
(2,193)	1:1040:A:ASP:O	1:1044:A:LEU:H	17	0.11
(2,179)	1:1033:A:LYS:O	1:1037:A:ASP:H	16	0.11
(2,179)	1:1033:A:LYS:O	1:1037:A:ASP:H	23	0.11
(2,139)	1:1005:A:ALA:O	1:1009:A:VAL:H	19	0.11
(2,123)	1:997:A:GLU:O	1:1001:A:LYS:H	8	0.11
(2,121)	1:996:A:ALA:O	1:1000:A:ASN:H	3	0.11
(2,113)	1:992:A:ASN:O	1:996:A:ALA:H	18	0.11
(2,113)	1:992:A:ASN:O	1:996:A:ALA:H	19	0.11
(2,101)	1:986:A:MET:O	1:990:A:LEU:H	21	0.11
(2,99)	1:985:A:GLU:O	1:989:A:LYS:H	17	0.11
(2,97)	1:984:A:ILE:O	1:988:A:GLN:H	14	0.11
(2,93)	1:982:A:ARG:O	1:986:A:MET:H	19	0.11
(2,89)	1:974:A:PRO:O	1:978:A:ALA:H	7	0.11
(2,89)	1:974:A:PRO:O	1:978:A:ALA:H	15	0.11
(2,89)	1:974:A:PRO:O	1:978:A:ALA:H	20	0.11
(2,85)	1:971:A:GLU:O	1:975:A:VAL:N	10	0.11
(2,85)	1:971:A:GLU:O	1:975:A:VAL:N	13	0.11
(2,77)	1:967:A:ALA:O	1:971:A:GLU:H	6	0.11
(2,69)	1:963:A:ARG:O	1:967:A:ALA:H	4	0.11
(2,69)	1:963:A:ARG:O	1:967:A:ALA:H	17	0.11
(2,69)	1:963:A:ARG:O	1:967:A:ALA:H	21	0.11
(2,52)	1:954:A:MET:O	1:958:A:VAL:N	20	0.11
(2,52)	1:954:A:MET:O	1:958:A:VAL:N	23	0.11
(2,52)	1:954:A:MET:O	1:958:A:VAL:N	25	0.11
(2,51)	1:954:A:MET:O	1:958:A:VAL:H	4	0.11
(2,51)	1:954:A:MET:O	1:958:A:VAL:H	8	0.11
(2,51)	1:954:A:MET:O	1:958:A:VAL:H	14	0.11
(2,51)	1:954:A:MET:O	1:958:A:VAL:H	19	0.11
(2,51)	1:954:A:MET:O	1:958:A:VAL:H	22	0.11
(2,41)	1:948:A:PRO:O	1:952:A:VAL:N	12	0.11
(2,37)	1:940:A:SER:O	1:944:A:GLN:H	14	0.11
(2,15)	1:929:A:VAL:O	1:933:A:VAL:H	7	0.11
(2,193)	1:1040:A:ASP:O	1:1044:A:LEU:H	2	0.1
(2,179)	1:1033:A:LYS:O	1:1037:A:ASP:H	3	0.1
(2,133)	1:1002:A:MET:O	1:1006:A:GLN:H	20	0.1
(2,113)	1:992:A:ASN:O	1:996:A:ALA:H	3	0.1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,90)	1:974:A:PRO:O	1:978:A:ALA:N	18	0.1
(2,89)	1:974:A:PRO:O	1:978:A:ALA:H	12	0.1
(2,89)	1:974:A:PRO:O	1:978:A:ALA:H	14	0.1
(2,85)	1:971:A:GLU:O	1:975:A:VAL:N	15	0.1
(2,85)	1:971:A:GLU:O	1:975:A:VAL:N	19	0.1
(2,69)	1:963:A:ARG:O	1:967:A:ALA:H	16	0.1
(2,69)	1:963:A:ARG:O	1:967:A:ALA:H	23	0.1
(2,45)	1:951:A:TYR:O	1:955:A:VAL:H	25	0.1
(2,15)	1:929:A:VAL:O	1:933:A:VAL:H	20	0.1

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

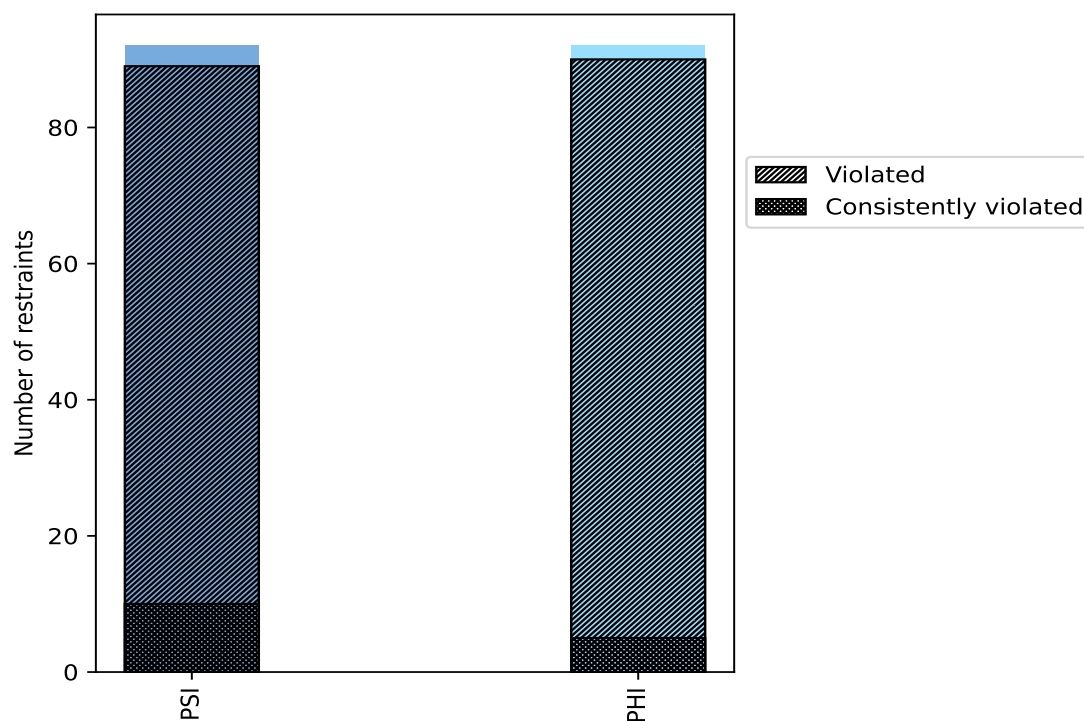
10.1 Summary of dihedral-angle violations [i](#)

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	92	50.0	89	96.7	48.4	10	10.9	5.4
PHI	92	50.0	90	97.8	48.9	5	5.4	2.7
Total	184	100.0	179	97.3	97.3	15	8.2	8.2

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

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



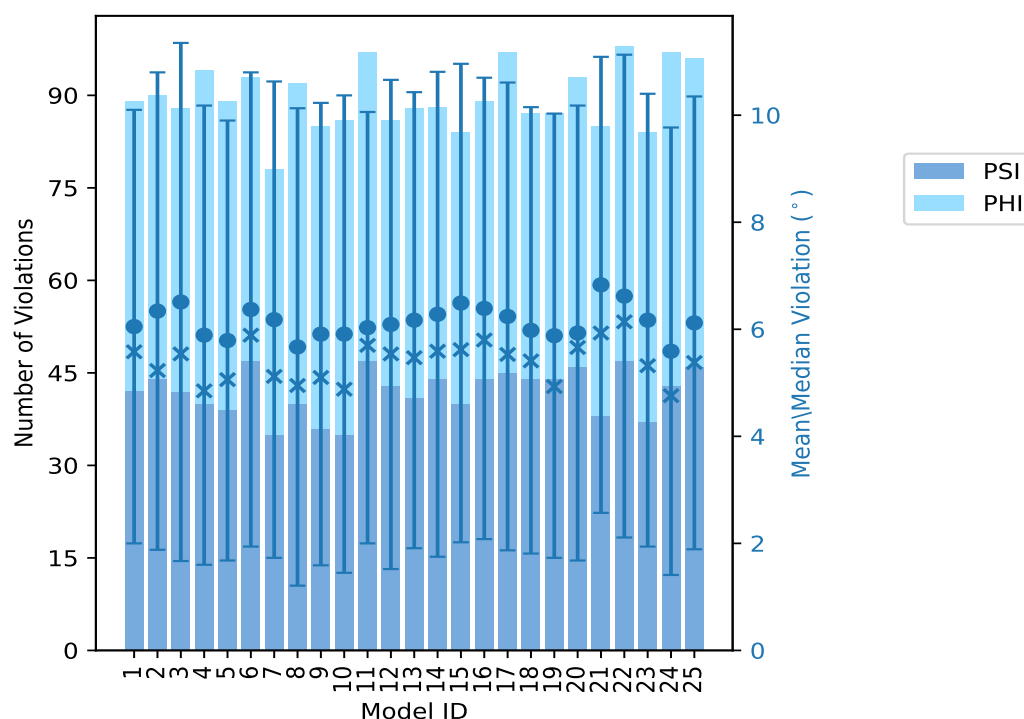
Violated and consistently violated restraints are shown using different hatch patterns in their respective categories

10.2 Dihedral-angle violation statistics for each model

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

Model ID	Number of violations			Mean (°)	Max (°)	SD (°)	Median (°)
	PSI	PHI	Total				
1	42	47	89	6.05	30.34	4.05	5.58
2	44	46	90	6.34	31.0	4.46	5.23
3	42	46	88	6.51	34.21	4.84	5.54
4	40	54	94	5.89	32.3	4.29	4.85
5	39	50	89	5.79	31.03	4.11	5.06
6	47	46	93	6.37	33.91	4.43	5.89
7	35	43	78	6.18	31.82	4.45	5.12
8	40	52	92	5.67	32.57	4.46	4.95
9	36	49	85	5.91	31.92	4.32	5.1
10	35	51	86	5.91	32.67	4.46	4.88
11	47	50	97	6.03	32.07	4.03	5.7
12	43	43	86	6.09	34.06	4.57	5.54
13	41	47	88	6.17	30.69	4.26	5.47
14	44	44	88	6.28	31.87	4.53	5.59
15	40	44	84	6.49	30.79	4.47	5.62
16	44	45	89	6.39	31.09	4.31	5.8
17	45	52	97	6.24	34.38	4.37	5.53
18	44	43	87	5.98	30.53	4.17	5.41
19	44	43	87	5.88	29.67	4.15	4.93
20	46	47	93	5.93	34.24	4.25	5.66
21	38	47	85	6.83	31.14	4.26	5.93
22	47	51	98	6.62	36.83	4.51	6.14
23	37	47	84	6.17	31.66	4.23	5.32
24	43	54	97	5.59	32.44	4.18	4.76
25	46	50	96	6.12	30.65	4.23	5.38

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



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

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

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

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

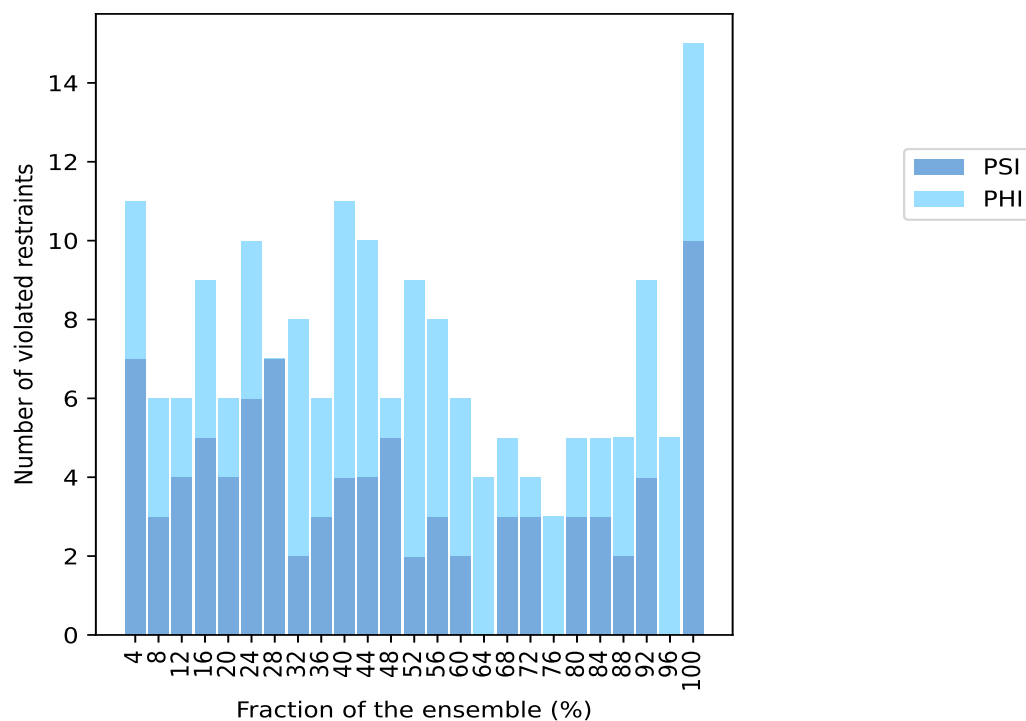
Continued on next page...

Continued from previous page...

Number of violated restraints			Fraction of the ensemble	
PSI	PHI	Total	Count ¹	%
5	1	6	12	48.0
2	7	9	13	52.0
3	5	8	14	56.0
2	4	6	15	60.0
0	4	4	16	64.0
3	2	5	17	68.0
3	1	4	18	72.0
0	3	3	19	76.0
3	2	5	20	80.0
3	2	5	21	84.0
2	3	5	22	88.0
4	5	9	23	92.0
0	5	5	24	96.0
10	5	15	25	100.0

¹ Number of models with violations

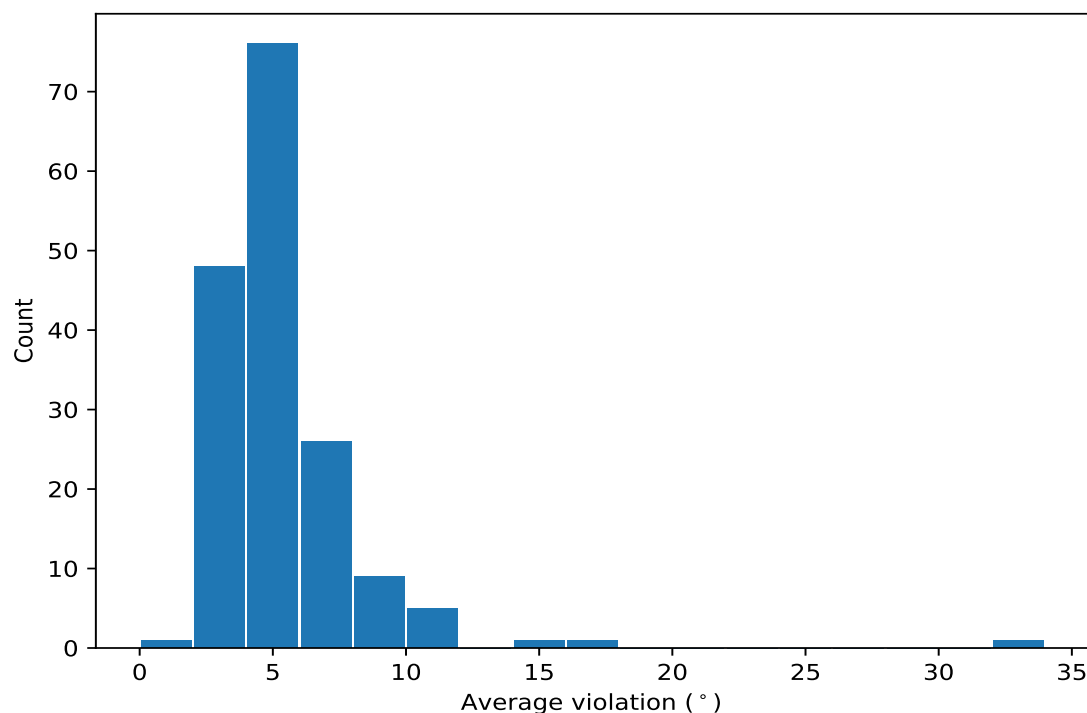
10.3.1 Bar graph : Dihedral-angle Violation statistics for the ensemble [i](#)



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

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

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



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

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

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Models ¹	Mean	SD ²	Med
(1,2)	1:923:A:ASP:N	1:923:A:ASP:CA	1:923:A:ASP:C	1:924:A:LYS:N	25	32.16	1.63	31.1
(1,1)	1:922:A:ASN:C	1:923:A:ASP:N	1:923:A:ASP:CA	1:923:A:ASP:C	25	17.85	1.85	17.1
(1,77)	1:974:A:PRO:C	1:975:A:VAL:N	1:975:A:VAL:CA	1:975:A:VAL:C	25	14.07	1.44	14.1
(1,81)	1:980:A:THR:C	1:981:A:HIS:N	1:981:A:HIS:CA	1:981:A:HIS:C	25	11.62	1.72	11.1
(1,72)	1:972:A:SER:N	1:972:A:SER:CA	1:972:A:SER:C	1:973:A:LEU:N	25	10.66	1.46	10.1
(1,80)	1:980:A:THR:N	1:980:A:THR:CA	1:980:A:THR:C	1:981:A:HIS:N	25	10.43	3.49	9.9
(1,84)	1:982:A:ARG:N	1:982:A:ARG:CA	1:982:A:ARG:C	1:983:A:GLU:N	25	9.88	1.63	10.1
(1,58)	1:961:A:ALA:N	1:961:A:ALA:CA	1:961:A:ALA:C	1:962:A:LEU:N	25	8.19	2.29	8.9
(1,46)	1:955:A:VAL:N	1:955:A:VAL:CA	1:955:A:VAL:C	1:956:A:LYS:N	25	8.08	0.99	8.0
(1,177)	1:1041:A:GLN:C	1:1042:A:ALA:N	1:1042:A:ALA:CA	1:1042:A:ALA:C	25	7.9	1.43	7.9
(1,4)	1:925:A:VAL:N	1:925:A:VAL:CA	1:925:A:VAL:C	1:926:A:TYR:N	25	7.81	1.88	7.6
(1,74)	1:973:A:LEU:N	1:973:A:LEU:CA	1:973:A:LEU:C	1:974:A:PRO:N	25	5.99	2.11	6.3
(1,54)	1:959:A:GLY:N	1:959:A:GLY:CA	1:959:A:GLY:C	1:960:A:LEU:N	25	4.94	1.2	5.0

Continued on next page

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Models ¹	Mean	SD ²	Med
(1,49)	1:956:A:LYS:C	1:957:A:GLU:N	1:957:A:GLU:CA	1:957:A:GLU:C	25	4.84	1.69	5.0
(1,50)	1:957:A:GLU:N	1:957:A:GLU:CA	1:957:A:GLU:C	1:958:A:VAL:N	25	3.68	0.96	3.6
(1,133)	1:1015:A:GLN:C	1:1016:A:GLU:N	1:1016:A:GLU:CA	1:1016:A:GLU:C	24	8.0	2.6	8.6
(1,5)	1:925:A:VAL:C	1:926:A:TYR:N	1:926:A:TYR:CA	1:926:A:TYR:C	24	7.39	1.54	7.5
(1,93)	1:986:A:MET:C	1:987:A:ALA:N	1:987:A:ALA:CA	1:987:A:ALA:C	24	7.36	1.95	7.6
(1,67)	1:968:A:THR:C	1:969:A:VAL:N	1:969:A:VAL:CA	1:969:A:VAL:C	24	6.55	1.05	6.5
(1,157)	1:1028:A:LEU:C	1:1029:A:ALA:N	1:1029:A:ALA:CA	1:1029:A:ALA:C	24	5.12	1.85	5.3
(1,34)	1:944:A:GLN:N	1:944:A:GLN:CA	1:944:A:GLN:C	1:945:A:PRO:N	23	8.44	3.44	9.6
(1,37)	1:948:A:PRO:C	1:949:A:GLU:N	1:949:A:GLU:CA	1:949:A:GLU:C	23	7.01	2.01	7.4
(1,27)	1:940:A:SER:C	1:941:A:SER:N	1:941:A:SER:CA	1:941:A:SER:C	23	6.58	1.06	6.3
(1,181)	1:1043:A:ARG:C	1:1044:A:LEU:N	1:1044:A:LEU:CA	1:1044:A:LEU:C	23	6.17	2.14	6.8
(1,178)	1:1042:A:ALA:N	1:1042:A:ALA:CA	1:1042:A:ALA:C	1:1043:A:ARG:N	23	5.92	2.13	6.0
(1,20)	1:935:A:ALA:N	1:935:A:ALA:CA	1:935:A:ALA:C	1:936:A:VAL:N	23	5.77	1.47	5.9
(1,85)	1:982:A:ARG:C	1:983:A:GLU:N	1:983:A:GLU:CA	1:983:A:GLU:C	23	5.74	2.27	5.6
(1,68)	1:969:A:VAL:N	1:969:A:VAL:CA	1:969:A:VAL:C	1:970:A:ASP:N	23	5.5	1.22	5.4
(1,11)	1:930:A:THR:C	1:931:A:GLY:N	1:931:A:GLY:CA	1:931:A:GLY:C	23	4.45	1.03	4.6
(1,52)	1:958:A:VAL:N	1:958:A:VAL:CA	1:958:A:VAL:C	1:959:A:GLY:N	22	6.47	2.89	7.1
(1,123)	1:1005:A:ALA:C	1:1006:A:GLN:N	1:1006:A:GLN:CA	1:1006:A:GLN:C	22	5.6	1.29	5.5
(1,89)	1:984:A:ILE:C	1:985:A:GLU:N	1:985:A:GLU:CA	1:985:A:GLU:C	22	4.79	1.68	4.9
(1,23)	1:938:A:GLU:C	1:939:A:MET:N	1:939:A:MET:CA	1:939:A:MET:C	22	4.03	1.77	3.6
(1,12)	1:931:A:GLY:N	1:931:A:GLY:CA	1:931:A:GLY:C	1:932:A:LEU:N	22	3.9	1.76	3.7
(1,124)	1:1006:A:GLN:N	1:1006:A:GLN:CA	1:1006:A:GLN:C	1:1007:A:GLN:N	21	11.72	3.64	12.1
(1,33)	1:943:A:ILE:C	1:944:A:GLN:N	1:944:A:GLN:CA	1:944:A:GLN:C	21	6.56	2.48	6.7
(1,32)	1:943:A:ILE:N	1:943:A:ILE:CA	1:943:A:ILE:C	1:944:A:GLN:N	21	5.8	2.46	6.5
(1,122)	1:1005:A:ALA:N	1:1005:A:ALA:CA	1:1005:A:ALA:C	1:1006:A:GLN:N	21	5.11	2.4	4.7
(1,35)	1:947:A:PRO:C	1:948:A:PRO:N	1:948:A:PRO:CA	1:948:A:PRO:C	21	3.42	1.44	2.8
(1,113)	1:1000:A:ASN:C	1:1001:A:LYS:N	1:1001:A:LYS:CA	1:1001:A:LYS:C	20	9.51	1.75	9.9
(1,82)	1:981:A:HIS:N	1:981:A:HIS:CA	1:981:A:HIS:C	1:982:A:ARG:N	20	8.3	2.03	8.7
(1,138)	1:1019:A:LYS:N	1:1019:A:LYS:CA	1:1019:A:LYS:C	1:1020:A:GLN:N	20	8.08	3.43	9.2
(1,118)	1:1003:A:LYS:N	1:1003:A:LYS:CA	1:1003:A:LYS:C	1:1004:A:LEU:N	20	7.5	4.11	7.1
(1,139)	1:1019:A:LYS:C	1:1020:A:GLN:N	1:1020:A:GLN:CA	1:1020:A:GLN:C	20	6.29	2.0	5.9
(1,147)	1:1023:A:THR:C	1:1024:A:ALA:N	1:1024:A:ALA:CA	1:1024:A:ALA:C	19	5.5	1.76	6.1
(1,19)	1:934:A:LYS:C	1:935:A:ALA:N	1:935:A:ALA:CA	1:935:A:ALA:C	19	4.38	1.73	3.9
(1,39)	1:951:A:TYR:C	1:952:A:VAL:N	1:952:A:VAL:CA	1:952:A:VAL:C	19	4.34	1.64	4.3
(1,176)	1:1041:A:GLN:N	1:1041:A:GLN:CA	1:1041:A:GLN:C	1:1042:A:ALA:N	18	7.34	2.75	7.9
(1,164)	1:1032:A:ALA:N	1:1032:A:ALA:CA	1:1032:A:ALA:C	1:1033:A:LYS:N	18	6.91	2.2	7.5
(1,8)	1:928:A:ASN:N	1:928:A:ASN:CA	1:928:A:ASN:C	1:929:A:VAL:N	18	4.82	1.54	4.1
(1,7)	1:927:A:GLU:C	1:928:A:ASN:N	1:928:A:ASN:CA	1:928:A:ASN:C	18	3.89	1.32	4.2
(1,128)	1:1013:A:LEU:N	1:1013:A:LEU:CA	1:1013:A:LEU:C	1:1014:A:GLN:N	17	10.16	3.69	10.1
(1,70)	1:970:A:ASP:N	1:970:A:ASP:CA	1:970:A:ASP:C	1:971:A:GLU:N	17	5.38	1.87	6.1
(1,175)	1:1040:A:ASP:C	1:1041:A:GLN:N	1:1041:A:GLN:CA	1:1041:A:GLN:C	17	5.19	2.09	5.5
(1,21)	1:937:A:ILE:C	1:938:A:GLU:N	1:938:A:GLU:CA	1:938:A:GLU:C	17	4.86	1.07	5.2
(1,162)	1:1031:A:ASP:N	1:1031:A:ASP:CA	1:1031:A:ASP:C	1:1032:A:ALA:N	17	4.79	2.49	4.1
(1,173)	1:1039:A:ILE:C	1:1040:A:ASP:N	1:1040:A:ASP:CA	1:1040:A:ASP:C	16	5.69	3.31	5.0
(1,169)	1:1034:A:ASN:C	1:1035:A:LEU:N	1:1035:A:LEU:CA	1:1035:A:LEU:C	16	4.13	1.4	4.2
(1,105)	1:992:A:ASN:C	1:993:A:SER:N	1:993:A:SER:CA	1:993:A:SER:C	16	4.12	1.45	4.4
(1,13)	1:931:A:GLY:C	1:932:A:LEU:N	1:932:A:LEU:CA	1:932:A:LEU:C	16	3.15	1.02	3.0
(1,179)	1:1042:A:ALA:C	1:1043:A:ARG:N	1:1043:A:ARG:CA	1:1043:A:ARG:C	15	5.56	3.77	4.1
(1,112)	1:997:A:GLU:N	1:997:A:GLU:CA	1:997:A:GLU:C	1:998:A:LEU:N	15	5.27	2.36	4.7
(1,83)	1:981:A:HIS:C	1:982:A:ARG:N	1:982:A:ARG:CA	1:982:A:ARG:C	15	4.93	1.57	5.2
(1,55)	1:959:A:GLY:C	1:960:A:LEU:N	1:960:A:LEU:CA	1:960:A:LEU:C	15	3.57	1.69	3.0

Continued on next page

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Models ¹	Mean	SD ²	Med
(1,60)	1:965:A:LEU:N	1:965:A:LEU:CA	1:965:A:LEU:C	1:966:A:LEU:N	15	3.19	1.13	2.9
(1,9)	1:928:A:ASN:C	1:929:A:VAL:N	1:929:A:VAL:CA	1:929:A:VAL:C	15	2.94	1.11	3.0
(1,129)	1:1013:A:LEU:C	1:1014:A:GLN:N	1:1014:A:GLN:CA	1:1014:A:GLN:C	14	5.86	3.19	5.3
(1,111)	1:996:A:ALA:C	1:997:A:GLU:N	1:997:A:GLU:CA	1:997:A:GLU:C	14	5.64	2.36	6.4
(1,120)	1:1004:A:LEU:N	1:1004:A:LEU:CA	1:1004:A:LEU:C	1:1005:A:ALA:N	14	5.57	3.36	5.5
(1,115)	1:1001:A:LYS:C	1:1002:A:MET:N	1:1002:A:MET:CA	1:1002:A:MET:C	14	5.28	1.72	5.9
(1,110)	1:996:A:ALA:N	1:996:A:ALA:CA	1:996:A:ALA:C	1:997:A:GLU:N	14	4.21	2.03	4.1
(1,107)	1:994:A:ASP:C	1:995:A:LEU:N	1:995:A:LEU:CA	1:995:A:LEU:C	14	3.92	1.89	3.6
(1,3)	1:924:A:LYS:C	1:925:A:VAL:N	1:925:A:VAL:CA	1:925:A:VAL:C	14	3.7	1.56	4.6
(1,156)	1:1028:A:LEU:N	1:1028:A:LEU:CA	1:1028:A:LEU:C	1:1029:A:ALA:N	14	3.27	1.91	2.9
(1,125)	1:1006:A:GLN:C	1:1007:A:GLN:N	1:1007:A:GLN:CA	1:1007:A:GLN:C	13	6.83	3.02	5.8
(1,79)	1:979:A:SER:C	1:980:A:THR:N	1:980:A:THR:CA	1:980:A:THR:C	13	5.61	3.49	5.3
(1,131)	1:1014:A:GLN:C	1:1015:A:GLN:N	1:1015:A:GLN:CA	1:1015:A:GLN:C	13	5.17	2.07	5.3
(1,119)	1:1003:A:LYS:C	1:1004:A:LEU:N	1:1004:A:LEU:CA	1:1004:A:LEU:C	13	5.14	2.82	4.5
(1,102)	1:991:A:LEU:N	1:991:A:LEU:CA	1:991:A:LEU:C	1:992:A:ASN:N	13	5.04	3.18	3.9
(1,109)	1:995:A:LEU:C	1:996:A:ALA:N	1:996:A:ALA:CA	1:996:A:ALA:C	13	4.83	2.08	5.0
(1,163)	1:1031:A:ASP:C	1:1032:A:ALA:N	1:1032:A:ALA:CA	1:1032:A:ALA:C	13	4.83	2.29	5.7
(1,6)	1:926:A:TYR:N	1:926:A:TYR:CA	1:926:A:TYR:C	1:927:A:GLU:N	13	4.44	2.75	3.9
(1,41)	1:952:A:VAL:C	1:953:A:PRO:N	1:953:A:PRO:CA	1:953:A:PRO:C	13	2.74	0.78	3.0
(1,127)	1:1012:A:SER:C	1:1013:A:LEU:N	1:1013:A:LEU:CA	1:1013:A:LEU:C	12	6.81	3.2	6.9
(1,174)	1:1040:A:ASP:N	1:1040:A:ASP:CA	1:1040:A:ASP:C	1:1041:A:GLN:N	12	4.97	1.61	6.0
(1,92)	1:986:A:MET:N	1:986:A:MET:CA	1:986:A:MET:C	1:987:A:ALA:N	12	4.83	2.8	4.0
(1,150)	1:1025:A:ALA:N	1:1025:A:ALA:CA	1:1025:A:ALA:C	1:1026:A:HIS:N	12	4.22	1.43	4.9
(1,78)	1:975:A:VAL:N	1:975:A:VAL:CA	1:975:A:VAL:C	1:976:A:LEU:N	12	3.68	1.42	3.8
(1,24)	1:939:A:MET:N	1:939:A:MET:CA	1:939:A:MET:C	1:940:A:SER:N	12	3.16	0.66	2.9
(1,29)	1:941:A:SER:C	1:942:A:LYS:N	1:942:A:LYS:CA	1:942:A:LYS:C	11	5.4	2.55	5.6
(1,61)	1:965:A:LEU:C	1:966:A:LEU:N	1:966:A:LEU:CA	1:966:A:LEU:C	11	5.27	1.98	6.0
(1,158)	1:1029:A:ALA:N	1:1029:A:ALA:CA	1:1029:A:ALA:C	1:1030:A:VAL:N	11	5.23	2.14	4.5
(1,170)	1:1035:A:LEU:N	1:1035:A:LEU:CA	1:1035:A:LEU:C	1:1036:A:LEU:N	11	5.15	2.46	5.4
(1,94)	1:987:A:ALA:N	1:987:A:ALA:CA	1:987:A:ALA:C	1:988:A:GLN:N	11	3.73	1.25	3.4
(1,73)	1:972:A:SER:C	1:973:A:LEU:N	1:973:A:LEU:CA	1:973:A:LEU:C	11	3.56	1.78	2.9
(1,137)	1:1018:A:LYS:C	1:1019:A:LYS:N	1:1019:A:LYS:CA	1:1019:A:LYS:C	11	3.53	1.42	4.2
(1,87)	1:983:A:GLU:C	1:984:A:ILE:N	1:984:A:ILE:CA	1:984:A:ILE:C	11	3.43	1.9	3.2
(1,104)	1:992:A:ASN:N	1:992:A:ASN:CA	1:992:A:ASN:C	1:993:A:SER:N	11	3.15	1.82	2.0
(1,167)	1:1033:A:LYS:C	1:1034:A:ASN:N	1:1034:A:ASN:CA	1:1034:A:ASN:C	11	2.79	1.02	2.6
(1,38)	1:949:A:GLU:N	1:949:A:GLU:CA	1:949:A:GLU:C	1:950:A:GLU:N	10	7.62	4.04	7.9
(1,142)	1:1021:A:MET:N	1:1021:A:MET:CA	1:1021:A:MET:C	1:1022:A:LEU:N	10	6.8	3.67	5.5
(1,134)	1:1016:A:GLU:N	1:1016:A:GLU:CA	1:1016:A:GLU:C	1:1017:A:TYR:N	10	5.78	2.58	6.6
(1,101)	1:990:A:LEU:C	1:991:A:LEU:N	1:991:A:LEU:CA	1:991:A:LEU:C	10	4.74	1.02	5.0
(1,155)	1:1027:A:ALA:C	1:1028:A:LEU:N	1:1028:A:LEU:CA	1:1028:A:LEU:C	10	3.58	1.15	3.2
(1,90)	1:985:A:GLU:N	1:985:A:GLU:CA	1:985:A:GLU:C	1:986:A:MET:N	10	3.35	1.82	2.9
(1,69)	1:969:A:VAL:C	1:970:A:ASP:N	1:970:A:ASP:CA	1:970:A:ASP:C	10	3.3	1.72	2.6
(1,95)	1:987:A:ALA:C	1:988:A:GLN:N	1:988:A:GLN:CA	1:988:A:GLN:C	10	3.13	1.43	3.0
(1,15)	1:932:A:LEU:C	1:933:A:VAL:N	1:933:A:VAL:CA	1:933:A:VAL:C	10	3.07	1.1	2.9
(1,117)	1:1002:A:MET:C	1:1003:A:LYS:N	1:1003:A:LYS:CA	1:1003:A:LYS:C	10	2.9	1.16	2.7
(1,53)	1:958:A:VAL:C	1:959:A:GLY:N	1:959:A:GLY:CA	1:959:A:GLY:C	10	2.83	0.95	3.0
(1,171)	1:1035:A:LEU:C	1:1036:A:LEU:N	1:1036:A:LEU:CA	1:1036:A:LEU:C	9	5.28	2.63	5.2
(1,98)	1:989:A:LYS:N	1:989:A:LYS:CA	1:989:A:LYS:C	1:990:A:LEU:N	9	5.26	2.71	5.8
(1,172)	1:1036:A:LEU:N	1:1036:A:LEU:CA	1:1036:A:LEU:C	1:1037:A:ASP:N	9	4.62	2.84	4.2
(1,135)	1:1017:A:TYR:C	1:1018:A:LYS:N	1:1018:A:LYS:CA	1:1018:A:LYS:C	9	4.06	2.01	4.4
(1,180)	1:1043:A:ARG:N	1:1043:A:ARG:CA	1:1043:A:ARG:C	1:1044:A:LEU:N	9	3.58	2.22	2.8

Continued on next page

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Models ¹	Mean	SD ²	Med
(1,149)	1:1024:A:ALA:C	1:1025:A:ALA:N	1:1025:A:ALA:CA	1:1025:A:ALA:C	9	2.87	1.18	2.5
(1,103)	1:991:A:LEU:C	1:992:A:ASN:N	1:992:A:ASN:CA	1:992:A:ASN:C	8	6.25	3.4	6.6
(1,57)	1:960:A:LEU:C	1:961:A:ALA:N	1:961:A:ALA:CA	1:961:A:ALA:C	8	5.02	3.07	4.2
(1,31)	1:942:A:LYS:C	1:943:A:ILE:N	1:943:A:ILE:CA	1:943:A:ILE:C	8	4.86	2.31	5.4
(1,64)	1:967:A:ALA:N	1:967:A:ALA:CA	1:967:A:ALA:C	1:968:A:THR:N	8	4.59	2.23	5.5
(1,59)	1:964:A:THR:C	1:965:A:LEU:N	1:965:A:LEU:CA	1:965:A:LEU:C	8	4.45	2.74	4.0
(1,22)	1:938:A:GLU:N	1:938:A:GLU:CA	1:938:A:GLU:C	1:939:A:MET:N	8	3.24	1.11	2.9
(1,145)	1:1022:A:LEU:C	1:1023:A:THR:N	1:1023:A:THR:CA	1:1023:A:THR:C	8	2.91	1.01	3.0
(1,25)	1:939:A:MET:C	1:940:A:SER:N	1:940:A:SER:CA	1:940:A:SER:C	8	2.0	0.73	1.8
(1,30)	1:942:A:LYS:N	1:942:A:LYS:CA	1:942:A:LYS:C	1:943:A:ILE:N	7	6.1	3.03	5.0
(1,106)	1:993:A:SER:N	1:993:A:SER:CA	1:993:A:SER:C	1:994:A:ASP:N	7	5.51	3.7	4.2
(1,130)	1:1014:A:GLN:N	1:1014:A:GLN:CA	1:1014:A:GLN:C	1:1015:A:GLN:N	7	5.45	3.44	4.0
(1,136)	1:1018:A:LYS:N	1:1018:A:LYS:CA	1:1018:A:LYS:C	1:1019:A:LYS:N	7	5.38	3.1	7.0
(1,168)	1:1034:A:ASN:N	1:1034:A:ASN:CA	1:1034:A:ASN:C	1:1035:A:LEU:N	7	4.21	2.68	2.9
(1,154)	1:1027:A:ALA:N	1:1027:A:ALA:CA	1:1027:A:ALA:C	1:1028:A:LEU:N	7	4.06	2.08	3.2
(1,140)	1:1020:A:GLN:N	1:1020:A:GLN:CA	1:1020:A:GLN:C	1:1021:A:MET:N	7	2.25	1.31	1.8
(1,108)	1:995:A:LEU:N	1:995:A:LEU:CA	1:995:A:LEU:C	1:996:A:ALA:N	6	5.06	4.02	3.9
(1,146)	1:1023:A:THR:N	1:1023:A:THR:CA	1:1023:A:THR:C	1:1024:A:ALA:N	6	5.02	1.72	5.7
(1,166)	1:1033:A:LYS:N	1:1033:A:LYS:CA	1:1033:A:LYS:C	1:1034:A:ASN:N	6	5.01	3.09	5.2
(1,165)	1:1032:A:ALA:C	1:1033:A:LYS:N	1:1033:A:LYS:CA	1:1033:A:LYS:C	6	4.92	1.84	4.8
(1,44)	1:954:A:MET:N	1:954:A:MET:CA	1:954:A:MET:C	1:955:A:VAL:N	6	4.74	2.15	3.5
(1,88)	1:984:A:ILE:N	1:984:A:ILE:CA	1:984:A:ILE:C	1:985:A:GLU:N	6	4.58	2.46	4.9
(1,86)	1:983:A:GLU:N	1:983:A:GLU:CA	1:983:A:GLU:C	1:984:A:ILE:N	6	3.6	2.5	2.9
(1,141)	1:1020:A:GLN:C	1:1021:A:MET:N	1:1021:A:MET:CA	1:1021:A:MET:C	6	3.08	1.34	2.4
(1,17)	1:933:A:VAL:C	1:934:A:LYS:N	1:934:A:LYS:CA	1:934:A:LYS:C	6	2.47	1.23	2.2
(1,97)	1:988:A:GLN:C	1:989:A:LYS:N	1:989:A:LYS:CA	1:989:A:LYS:C	6	2.19	0.94	2.1
(1,161)	1:1030:A:VAL:C	1:1031:A:ASP:N	1:1031:A:ASP:CA	1:1031:A:ASP:C	5	6.41	2.82	8.3
(1,56)	1:960:A:LEU:N	1:960:A:LEU:CA	1:960:A:LEU:C	1:961:A:ALA:N	5	6.18	5.63	2.9
(1,36)	1:948:A:PRO:N	1:948:A:PRO:CA	1:948:A:PRO:C	1:949:A:GLU:N	5	6.11	4.1	7.7
(1,40)	1:952:A:VAL:N	1:952:A:VAL:CA	1:952:A:VAL:C	1:953:A:PRO:N	5	4.53	2.13	4.9
(1,66)	1:968:A:THR:N	1:968:A:THR:CA	1:968:A:THR:C	1:969:A:VAL:N	5	3.74	1.16	3.7
(1,47)	1:955:A:VAL:C	1:956:A:LYS:N	1:956:A:LYS:CA	1:956:A:LYS:C	5	3.2	1.38	3.9
(1,126)	1:1007:A:GLN:N	1:1007:A:GLN:CA	1:1007:A:GLN:C	1:1008:A:TYR:N	4	8.07	2.36	7.3
(1,132)	1:1015:A:GLN:N	1:1015:A:GLN:CA	1:1015:A:GLN:C	1:1016:A:GLU:N	4	7.06	2.07	7.1
(1,160)	1:1030:A:VAL:N	1:1030:A:VAL:CA	1:1030:A:VAL:C	1:1031:A:ASP:N	4	5.52	4.14	5.4
(1,16)	1:933:A:VAL:N	1:933:A:VAL:CA	1:933:A:VAL:C	1:934:A:LYS:N	4	5.24	1.49	5.6
(1,14)	1:932:A:LEU:N	1:932:A:LEU:CA	1:932:A:LEU:C	1:933:A:VAL:N	4	3.23	0.99	3.2
(1,75)	1:973:A:LEU:C	1:974:A:PRO:N	1:974:A:PRO:CA	1:974:A:PRO:C	4	2.44	0.16	2.9
(1,143)	1:1021:A:MET:C	1:1022:A:LEU:N	1:1022:A:LEU:CA	1:1022:A:LEU:C	4	2.37	1.12	2.3
(1,121)	1:1004:A:LEU:C	1:1005:A:ALA:N	1:1005:A:ALA:CA	1:1005:A:ALA:C	4	2.18	0.91	2.9
(1,43)	1:953:A:PRO:C	1:954:A:MET:N	1:954:A:MET:CA	1:954:A:MET:C	4	2.16	1.12	1.7
(1,116)	1:1002:A:MET:N	1:1002:A:MET:CA	1:1002:A:MET:C	1:1003:A:LYS:N	3	6.93	3.31	7.4
(1,18)	1:934:A:LYS:N	1:934:A:LYS:CA	1:934:A:LYS:C	1:935:A:ALA:N	3	5.14	1.19	5.9
(1,96)	1:988:A:GLN:N	1:988:A:GLN:CA	1:988:A:GLN:C	1:989:A:LYS:N	3	4.92	1.9	4.9
(1,159)	1:1029:A:ALA:C	1:1030:A:VAL:N	1:1030:A:VAL:CA	1:1030:A:VAL:C	3	4.25	3.63	2.4
(1,10)	1:929:A:VAL:N	1:929:A:VAL:CA	1:929:A:VAL:C	1:930:A:THR:N	3	2.33	0.54	2.4
(1,65)	1:967:A:ALA:C	1:968:A:THR:N	1:968:A:THR:CA	1:968:A:THR:C	3	1.89	0.3	2.0
(1,100)	1:990:A:LEU:N	1:990:A:LEU:CA	1:990:A:LEU:C	1:991:A:LEU:N	2	7.94	1.6	7.9
(1,42)	1:953:A:PRO:N	1:953:A:PRO:CA	1:953:A:PRO:C	1:954:A:MET:N	2	5.94	2.55	5.9
(1,71)	1:971:A:GLU:C	1:972:A:SER:N	1:972:A:SER:CA	1:972:A:SER:C	2	4.22	1.44	4.2
(1,151)	1:1025:A:ALA:C	1:1026:A:HIS:N	1:1026:A:HIS:CA	1:1026:A:HIS:C	2	3.28	1.13	3.2

Continued on next page

Continued from previous page...

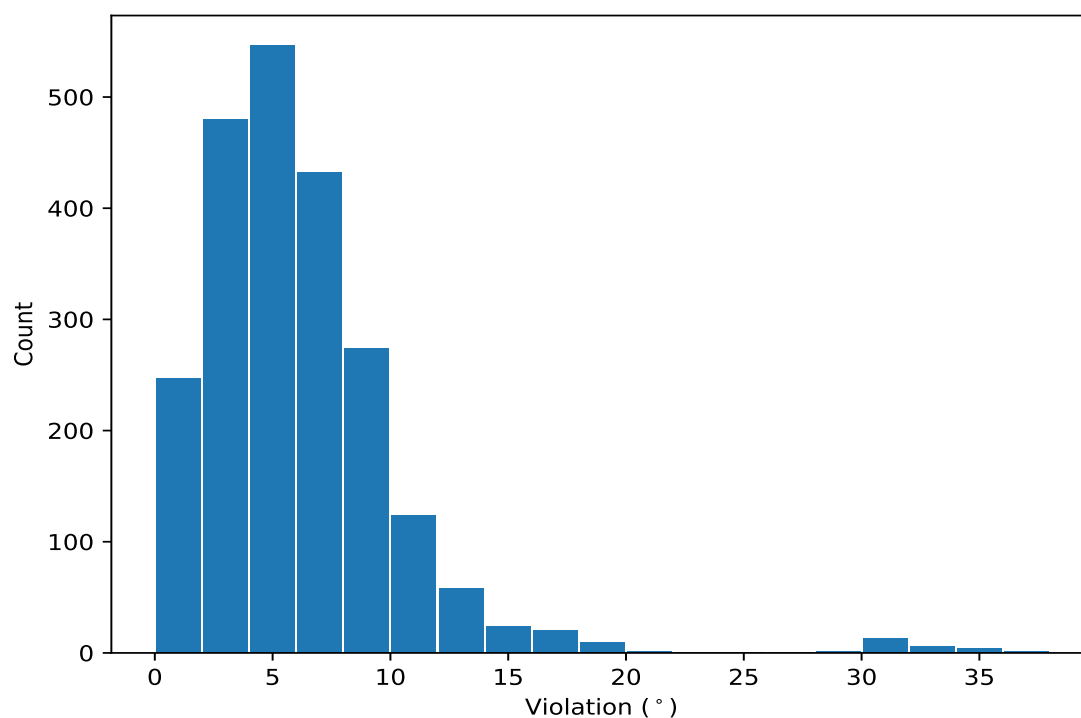
Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Models ¹	Mean	SD ²	Med
(1,183)	1:1044:A:LEU:C	1:1045:A:LYS:N	1:1045:A:LYS:CA	1:1045:A:LYS:C	2	2.6	1.3	2.5
(1,28)	1:941:A:SER:N	1:941:A:SER:CA	1:941:A:SER:C	1:942:A:LYS:N	2	2.54	0.84	2.5

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

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

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

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



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

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

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,2)	1:923:A:ASP:N	1:923:A:ASP:CA	1:923:A:ASP:C	1:924:A:LYS:N	22	36.83
(1,2)	1:923:A:ASP:N	1:923:A:ASP:CA	1:923:A:ASP:C	1:924:A:LYS:N	17	34.38
(1,2)	1:923:A:ASP:N	1:923:A:ASP:CA	1:923:A:ASP:C	1:924:A:LYS:N	20	34.24
(1,2)	1:923:A:ASP:N	1:923:A:ASP:CA	1:923:A:ASP:C	1:924:A:LYS:N	3	34.21
(1,2)	1:923:A:ASP:N	1:923:A:ASP:CA	1:923:A:ASP:C	1:924:A:LYS:N	12	34.06

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,2)	1:923:A:ASP:N	1:923:A:ASP:CA	1:923:A:ASP:C	1:924:A:LYS:N	6	33.91
(1,2)	1:923:A:ASP:N	1:923:A:ASP:CA	1:923:A:ASP:C	1:924:A:LYS:N	10	32.67
(1,2)	1:923:A:ASP:N	1:923:A:ASP:CA	1:923:A:ASP:C	1:924:A:LYS:N	8	32.57
(1,2)	1:923:A:ASP:N	1:923:A:ASP:CA	1:923:A:ASP:C	1:924:A:LYS:N	24	32.44
(1,2)	1:923:A:ASP:N	1:923:A:ASP:CA	1:923:A:ASP:C	1:924:A:LYS:N	4	32.3
(1,2)	1:923:A:ASP:N	1:923:A:ASP:CA	1:923:A:ASP:C	1:924:A:LYS:N	11	32.07
(1,2)	1:923:A:ASP:N	1:923:A:ASP:CA	1:923:A:ASP:C	1:924:A:LYS:N	9	31.92
(1,2)	1:923:A:ASP:N	1:923:A:ASP:CA	1:923:A:ASP:C	1:924:A:LYS:N	14	31.87
(1,2)	1:923:A:ASP:N	1:923:A:ASP:CA	1:923:A:ASP:C	1:924:A:LYS:N	7	31.82
(1,2)	1:923:A:ASP:N	1:923:A:ASP:CA	1:923:A:ASP:C	1:924:A:LYS:N	23	31.66
(1,2)	1:923:A:ASP:N	1:923:A:ASP:CA	1:923:A:ASP:C	1:924:A:LYS:N	21	31.14
(1,2)	1:923:A:ASP:N	1:923:A:ASP:CA	1:923:A:ASP:C	1:924:A:LYS:N	16	31.09
(1,2)	1:923:A:ASP:N	1:923:A:ASP:CA	1:923:A:ASP:C	1:924:A:LYS:N	5	31.03
(1,2)	1:923:A:ASP:N	1:923:A:ASP:CA	1:923:A:ASP:C	1:924:A:LYS:N	2	31.0
(1,2)	1:923:A:ASP:N	1:923:A:ASP:CA	1:923:A:ASP:C	1:924:A:LYS:N	15	30.79
(1,2)	1:923:A:ASP:N	1:923:A:ASP:CA	1:923:A:ASP:C	1:924:A:LYS:N	13	30.69
(1,2)	1:923:A:ASP:N	1:923:A:ASP:CA	1:923:A:ASP:C	1:924:A:LYS:N	25	30.65
(1,2)	1:923:A:ASP:N	1:923:A:ASP:CA	1:923:A:ASP:C	1:924:A:LYS:N	18	30.53
(1,2)	1:923:A:ASP:N	1:923:A:ASP:CA	1:923:A:ASP:C	1:924:A:LYS:N	1	30.34
(1,2)	1:923:A:ASP:N	1:923:A:ASP:CA	1:923:A:ASP:C	1:924:A:LYS:N	19	29.67
(1,1)	1:922:A:ASN:C	1:923:A:ASP:N	1:923:A:ASP:CA	1:923:A:ASP:C	20	20.37
(1,1)	1:922:A:ASN:C	1:923:A:ASP:N	1:923:A:ASP:CA	1:923:A:ASP:C	12	19.89
(1,1)	1:922:A:ASN:C	1:923:A:ASP:N	1:923:A:ASP:CA	1:923:A:ASP:C	1	19.55
(1,1)	1:922:A:ASN:C	1:923:A:ASP:N	1:923:A:ASP:CA	1:923:A:ASP:C	7	19.41
(1,1)	1:922:A:ASN:C	1:923:A:ASP:N	1:923:A:ASP:CA	1:923:A:ASP:C	19	18.98
(1,1)	1:922:A:ASN:C	1:923:A:ASP:N	1:923:A:ASP:CA	1:923:A:ASP:C	2	18.76
(1,1)	1:922:A:ASN:C	1:923:A:ASP:N	1:923:A:ASP:CA	1:923:A:ASP:C	13	18.47
(1,1)	1:922:A:ASN:C	1:923:A:ASP:N	1:923:A:ASP:CA	1:923:A:ASP:C	25	18.43
(1,1)	1:922:A:ASN:C	1:923:A:ASP:N	1:923:A:ASP:CA	1:923:A:ASP:C	16	18.36
(1,1)	1:922:A:ASN:C	1:923:A:ASP:N	1:923:A:ASP:CA	1:923:A:ASP:C	3	18.22
(1,1)	1:922:A:ASN:C	1:923:A:ASP:N	1:923:A:ASP:CA	1:923:A:ASP:C	8	17.98
(1,1)	1:922:A:ASN:C	1:923:A:ASP:N	1:923:A:ASP:CA	1:923:A:ASP:C	14	17.97
(1,1)	1:922:A:ASN:C	1:923:A:ASP:N	1:923:A:ASP:CA	1:923:A:ASP:C	23	17.95
(1,1)	1:922:A:ASN:C	1:923:A:ASP:N	1:923:A:ASP:CA	1:923:A:ASP:C	5	17.94
(1,1)	1:922:A:ASN:C	1:923:A:ASP:N	1:923:A:ASP:CA	1:923:A:ASP:C	21	17.83
(1,1)	1:922:A:ASN:C	1:923:A:ASP:N	1:923:A:ASP:CA	1:923:A:ASP:C	24	17.77
(1,1)	1:922:A:ASN:C	1:923:A:ASP:N	1:923:A:ASP:CA	1:923:A:ASP:C	17	17.75
(1,1)	1:922:A:ASN:C	1:923:A:ASP:N	1:923:A:ASP:CA	1:923:A:ASP:C	10	17.73
(1,124)	1:1006:A:GLN:N	1:1006:A:GLN:CA	1:1006:A:GLN:C	1:1007:A:GLN:N	16	17.72
(1,1)	1:922:A:ASN:C	1:923:A:ASP:N	1:923:A:ASP:CA	1:923:A:ASP:C	4	17.66
(1,1)	1:922:A:ASN:C	1:923:A:ASP:N	1:923:A:ASP:CA	1:923:A:ASP:C	18	17.66
(1,1)	1:922:A:ASN:C	1:923:A:ASP:N	1:923:A:ASP:CA	1:923:A:ASP:C	6	17.31
(1,1)	1:922:A:ASN:C	1:923:A:ASP:N	1:923:A:ASP:CA	1:923:A:ASP:C	15	17.19
(1,1)	1:922:A:ASN:C	1:923:A:ASP:N	1:923:A:ASP:CA	1:923:A:ASP:C	9	17.12
(1,80)	1:980:A:THR:N	1:980:A:THR:CA	1:980:A:THR:C	1:981:A:HIS:N	15	16.71
(1,124)	1:1006:A:GLN:N	1:1006:A:GLN:CA	1:1006:A:GLN:C	1:1007:A:GLN:N	24	16.69
(1,77)	1:974:A:PRO:C	1:975:A:VAL:N	1:975:A:VAL:CA	1:975:A:VAL:C	3	16.69
(1,128)	1:1013:A:LEU:N	1:1013:A:LEU:CA	1:1013:A:LEU:C	1:1014:A:GLN:N	3	16.3
(1,1)	1:922:A:ASN:C	1:923:A:ASP:N	1:923:A:ASP:CA	1:923:A:ASP:C	11	16.11
(1,38)	1:949:A:GLU:N	1:949:A:GLU:CA	1:949:A:GLU:C	1:950:A:GLU:N	21	16.0
(1,77)	1:974:A:PRO:C	1:975:A:VAL:N	1:975:A:VAL:CA	1:975:A:VAL:C	22	15.95

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,77)	1:974:A:PRO:C	1:975:A:VAL:N	1:975:A:VAL:CA	1:975:A:VAL:C	9	15.94
(1,124)	1:1006:A:GLN:N	1:1006:A:GLN:CA	1:1006:A:GLN:C	1:1007:A:GLN:N	23	15.9
(1,77)	1:974:A:PRO:C	1:975:A:VAL:N	1:975:A:VAL:CA	1:975:A:VAL:C	6	15.84
(1,77)	1:974:A:PRO:C	1:975:A:VAL:N	1:975:A:VAL:CA	1:975:A:VAL:C	14	15.8
(1,80)	1:980:A:THR:N	1:980:A:THR:CA	1:980:A:THR:C	1:981:A:HIS:N	3	15.7
(1,81)	1:980:A:THR:C	1:981:A:HIS:N	1:981:A:HIS:CA	1:981:A:HIS:C	15	15.65
(1,80)	1:980:A:THR:N	1:980:A:THR:CA	1:980:A:THR:C	1:981:A:HIS:N	14	15.41
(1,77)	1:974:A:PRO:C	1:975:A:VAL:N	1:975:A:VAL:CA	1:975:A:VAL:C	15	15.4
(1,118)	1:1003:A:LYS:N	1:1003:A:LYS:CA	1:1003:A:LYS:C	1:1004:A:LEU:N	25	15.21
(1,77)	1:974:A:PRO:C	1:975:A:VAL:N	1:975:A:VAL:CA	1:975:A:VAL:C	13	15.2
(1,80)	1:980:A:THR:N	1:980:A:THR:CA	1:980:A:THR:C	1:981:A:HIS:N	10	15.17
(1,77)	1:974:A:PRO:C	1:975:A:VAL:N	1:975:A:VAL:CA	1:975:A:VAL:C	10	15.12
(1,124)	1:1006:A:GLN:N	1:1006:A:GLN:CA	1:1006:A:GLN:C	1:1007:A:GLN:N	6	14.75
(1,77)	1:974:A:PRO:C	1:975:A:VAL:N	1:975:A:VAL:CA	1:975:A:VAL:C	8	14.69
(1,77)	1:974:A:PRO:C	1:975:A:VAL:N	1:975:A:VAL:CA	1:975:A:VAL:C	18	14.69
(1,124)	1:1006:A:GLN:N	1:1006:A:GLN:CA	1:1006:A:GLN:C	1:1007:A:GLN:N	19	14.58
(1,77)	1:974:A:PRO:C	1:975:A:VAL:N	1:975:A:VAL:CA	1:975:A:VAL:C	5	14.57
(1,118)	1:1003:A:LYS:N	1:1003:A:LYS:CA	1:1003:A:LYS:C	1:1004:A:LEU:N	8	14.56
(1,124)	1:1006:A:GLN:N	1:1006:A:GLN:CA	1:1006:A:GLN:C	1:1007:A:GLN:N	21	14.5
(1,124)	1:1006:A:GLN:N	1:1006:A:GLN:CA	1:1006:A:GLN:C	1:1007:A:GLN:N	2	14.47
(1,77)	1:974:A:PRO:C	1:975:A:VAL:N	1:975:A:VAL:CA	1:975:A:VAL:C	11	14.47
(1,77)	1:974:A:PRO:C	1:975:A:VAL:N	1:975:A:VAL:CA	1:975:A:VAL:C	17	14.29
(1,129)	1:1013:A:LEU:C	1:1014:A:GLN:N	1:1014:A:GLN:CA	1:1014:A:GLN:C	3	14.05
(1,124)	1:1006:A:GLN:N	1:1006:A:GLN:CA	1:1006:A:GLN:C	1:1007:A:GLN:N	1	13.94
(1,128)	1:1013:A:LEU:N	1:1013:A:LEU:CA	1:1013:A:LEU:C	1:1014:A:GLN:N	22	13.92
(1,81)	1:980:A:THR:C	1:981:A:HIS:N	1:981:A:HIS:CA	1:981:A:HIS:C	22	13.82
(1,80)	1:980:A:THR:N	1:980:A:THR:CA	1:980:A:THR:C	1:981:A:HIS:N	9	13.81
(1,138)	1:1019:A:LYS:N	1:1019:A:LYS:CA	1:1019:A:LYS:C	1:1020:A:GLN:N	6	13.64
(1,124)	1:1006:A:GLN:N	1:1006:A:GLN:CA	1:1006:A:GLN:C	1:1007:A:GLN:N	13	13.64
(1,77)	1:974:A:PRO:C	1:975:A:VAL:N	1:975:A:VAL:CA	1:975:A:VAL:C	4	13.58
(1,80)	1:980:A:THR:N	1:980:A:THR:CA	1:980:A:THR:C	1:981:A:HIS:N	13	13.53
(1,77)	1:974:A:PRO:C	1:975:A:VAL:N	1:975:A:VAL:CA	1:975:A:VAL:C	7	13.53
(1,81)	1:980:A:THR:C	1:981:A:HIS:N	1:981:A:HIS:CA	1:981:A:HIS:C	13	13.51
(1,77)	1:974:A:PRO:C	1:975:A:VAL:N	1:975:A:VAL:CA	1:975:A:VAL:C	25	13.43
(1,80)	1:980:A:THR:N	1:980:A:THR:CA	1:980:A:THR:C	1:981:A:HIS:N	6	13.38
(1,128)	1:1013:A:LEU:N	1:1013:A:LEU:CA	1:1013:A:LEU:C	1:1014:A:GLN:N	11	13.34
(1,34)	1:944:A:GLN:N	1:944:A:GLN:CA	1:944:A:GLN:C	1:945:A:PRO:N	12	13.3
(1,124)	1:1006:A:GLN:N	1:1006:A:GLN:CA	1:1006:A:GLN:C	1:1007:A:GLN:N	12	13.24
(1,77)	1:974:A:PRO:C	1:975:A:VAL:N	1:975:A:VAL:CA	1:975:A:VAL:C	12	13.24
(1,84)	1:982:A:ARG:N	1:982:A:ARG:CA	1:982:A:ARG:C	1:983:A:GLU:N	2	13.18
(1,77)	1:974:A:PRO:C	1:975:A:VAL:N	1:975:A:VAL:CA	1:975:A:VAL:C	16	13.14
(1,56)	1:960:A:LEU:N	1:960:A:LEU:CA	1:960:A:LEU:C	1:961:A:ALA:N	22	13.11
(1,128)	1:1013:A:LEU:N	1:1013:A:LEU:CA	1:1013:A:LEU:C	1:1014:A:GLN:N	2	13.09
(1,173)	1:1039:A:ILE:C	1:1040:A:ASP:N	1:1040:A:ASP:CA	1:1040:A:ASP:C	22	13.06
(1,77)	1:974:A:PRO:C	1:975:A:VAL:N	1:975:A:VAL:CA	1:975:A:VAL:C	24	13.06
(1,125)	1:1006:A:GLN:C	1:1007:A:GLN:N	1:1007:A:GLN:CA	1:1007:A:GLN:C	15	13.03
(1,56)	1:960:A:LEU:N	1:960:A:LEU:CA	1:960:A:LEU:C	1:961:A:ALA:N	11	13.02
(1,81)	1:980:A:THR:C	1:981:A:HIS:N	1:981:A:HIS:CA	1:981:A:HIS:C	6	13.01
(1,128)	1:1013:A:LEU:N	1:1013:A:LEU:CA	1:1013:A:LEU:C	1:1014:A:GLN:N	25	13.0
(1,81)	1:980:A:THR:C	1:981:A:HIS:N	1:981:A:HIS:CA	1:981:A:HIS:C	21	12.99
(1,118)	1:1003:A:LYS:N	1:1003:A:LYS:CA	1:1003:A:LYS:C	1:1004:A:LEU:N	4	12.95

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,81)	1:980:A:THR:C	1:981:A:HIS:N	1:981:A:HIS:CA	1:981:A:HIS:C	25	12.95
(1,81)	1:980:A:THR:C	1:981:A:HIS:N	1:981:A:HIS:CA	1:981:A:HIS:C	7	12.85
(1,77)	1:974:A:PRO:C	1:975:A:VAL:N	1:975:A:VAL:CA	1:975:A:VAL:C	23	12.83
(1,34)	1:944:A:GLN:N	1:944:A:GLN:CA	1:944:A:GLN:C	1:945:A:PRO:N	17	12.79
(1,77)	1:974:A:PRO:C	1:975:A:VAL:N	1:975:A:VAL:CA	1:975:A:VAL:C	2	12.78
(1,81)	1:980:A:THR:C	1:981:A:HIS:N	1:981:A:HIS:CA	1:981:A:HIS:C	2	12.74
(1,72)	1:972:A:SER:N	1:972:A:SER:CA	1:972:A:SER:C	1:973:A:LEU:N	3	12.68
(1,81)	1:980:A:THR:C	1:981:A:HIS:N	1:981:A:HIS:CA	1:981:A:HIS:C	18	12.67
(1,81)	1:980:A:THR:C	1:981:A:HIS:N	1:981:A:HIS:CA	1:981:A:HIS:C	16	12.64
(1,72)	1:972:A:SER:N	1:972:A:SER:CA	1:972:A:SER:C	1:973:A:LEU:N	2	12.53
(1,72)	1:972:A:SER:N	1:972:A:SER:CA	1:972:A:SER:C	1:973:A:LEU:N	9	12.48
(1,173)	1:1039:A:ILE:C	1:1040:A:ASP:N	1:1040:A:ASP:CA	1:1040:A:ASP:C	11	12.46
(1,125)	1:1006:A:GLN:C	1:1007:A:GLN:N	1:1007:A:GLN:CA	1:1007:A:GLN:C	2	12.41
(1,142)	1:1021:A:MET:N	1:1021:A:MET:CA	1:1021:A:MET:C	1:1022:A:LEU:N	17	12.38
(1,72)	1:972:A:SER:N	1:972:A:SER:CA	1:972:A:SER:C	1:973:A:LEU:N	10	12.35
(1,80)	1:980:A:THR:N	1:980:A:THR:CA	1:980:A:THR:C	1:981:A:HIS:N	21	12.34
(1,142)	1:1021:A:MET:N	1:1021:A:MET:CA	1:1021:A:MET:C	1:1022:A:LEU:N	8	12.3
(1,138)	1:1019:A:LYS:N	1:1019:A:LYS:CA	1:1019:A:LYS:C	1:1020:A:GLN:N	17	12.23
(1,179)	1:1042:A:ALA:C	1:1043:A:ARG:N	1:1043:A:ARG:CA	1:1043:A:ARG:C	3	12.22
(1,108)	1:995:A:LEU:N	1:995:A:LEU:CA	1:995:A:LEU:C	1:996:A:ALA:N	25	12.2
(1,124)	1:1006:A:GLN:N	1:1006:A:GLN:CA	1:1006:A:GLN:C	1:1007:A:GLN:N	18	12.18
(1,72)	1:972:A:SER:N	1:972:A:SER:CA	1:972:A:SER:C	1:973:A:LEU:N	22	12.14
(1,133)	1:1015:A:GLN:C	1:1016:A:GLU:N	1:1016:A:GLU:CA	1:1016:A:GLU:C	8	12.11
(1,102)	1:991:A:LEU:N	1:991:A:LEU:CA	1:991:A:LEU:C	1:992:A:ASN:N	25	12.1
(1,80)	1:980:A:THR:N	1:980:A:THR:CA	1:980:A:THR:C	1:981:A:HIS:N	7	12.1
(1,72)	1:972:A:SER:N	1:972:A:SER:CA	1:972:A:SER:C	1:973:A:LEU:N	24	12.1
(1,81)	1:980:A:THR:C	1:981:A:HIS:N	1:981:A:HIS:CA	1:981:A:HIS:C	9	12.07
(1,77)	1:974:A:PRO:C	1:975:A:VAL:N	1:975:A:VAL:CA	1:975:A:VAL:C	19	12.05
(1,4)	1:925:A:VAL:N	1:925:A:VAL:CA	1:925:A:VAL:C	1:926:A:TYR:N	9	12.03
(1,133)	1:1015:A:GLN:C	1:1016:A:GLU:N	1:1016:A:GLU:CA	1:1016:A:GLU:C	14	12.01
(1,77)	1:974:A:PRO:C	1:975:A:VAL:N	1:975:A:VAL:CA	1:975:A:VAL:C	20	11.99
(1,126)	1:1007:A:GLN:N	1:1007:A:GLN:CA	1:1007:A:GLN:C	1:1008:A:TYR:N	6	11.95
(1,77)	1:974:A:PRO:C	1:975:A:VAL:N	1:975:A:VAL:CA	1:975:A:VAL:C	21	11.89
(1,130)	1:1014:A:GLN:N	1:1014:A:GLN:CA	1:1014:A:GLN:C	1:1015:A:GLN:N	10	11.87
(1,84)	1:982:A:ARG:N	1:982:A:ARG:CA	1:982:A:ARG:C	1:983:A:GLU:N	16	11.87
(1,113)	1:1000:A:ASN:C	1:1001:A:LYS:N	1:1001:A:LYS:CA	1:1001:A:LYS:C	22	11.86
(1,72)	1:972:A:SER:N	1:972:A:SER:CA	1:972:A:SER:C	1:973:A:LEU:N	15	11.85
(1,72)	1:972:A:SER:N	1:972:A:SER:CA	1:972:A:SER:C	1:973:A:LEU:N	17	11.85
(1,84)	1:982:A:ARG:N	1:982:A:ARG:CA	1:982:A:ARG:C	1:983:A:GLU:N	22	11.84
(1,79)	1:979:A:SER:C	1:980:A:THR:N	1:980:A:THR:CA	1:980:A:THR:C	22	11.82
(1,113)	1:1000:A:ASN:C	1:1001:A:LYS:N	1:1001:A:LYS:CA	1:1001:A:LYS:C	12	11.79
(1,81)	1:980:A:THR:C	1:981:A:HIS:N	1:981:A:HIS:CA	1:981:A:HIS:C	4	11.79
(1,124)	1:1006:A:GLN:N	1:1006:A:GLN:CA	1:1006:A:GLN:C	1:1007:A:GLN:N	5	11.76
(1,85)	1:982:A:ARG:C	1:983:A:GLU:N	1:983:A:GLU:CA	1:983:A:GLU:C	2	11.76
(1,34)	1:944:A:GLN:N	1:944:A:GLN:CA	1:944:A:GLN:C	1:945:A:PRO:N	23	11.76
(1,127)	1:1012:A:SER:C	1:1013:A:LEU:N	1:1013:A:LEU:CA	1:1013:A:LEU:C	3	11.75
(1,72)	1:972:A:SER:N	1:972:A:SER:CA	1:972:A:SER:C	1:973:A:LEU:N	14	11.75
(1,72)	1:972:A:SER:N	1:972:A:SER:CA	1:972:A:SER:C	1:973:A:LEU:N	21	11.72
(1,84)	1:982:A:ARG:N	1:982:A:ARG:CA	1:982:A:ARG:C	1:983:A:GLU:N	17	11.71
(1,81)	1:980:A:THR:C	1:981:A:HIS:N	1:981:A:HIS:CA	1:981:A:HIS:C	19	11.71
(1,122)	1:1005:A:ALA:N	1:1005:A:ALA:CA	1:1005:A:ALA:C	1:1006:A:GLN:N	25	11.7

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,81)	1:980:A:THR:C	1:981:A:HIS:N	1:981:A:HIS:CA	1:981:A:HIS:C	3	11.62
(1,34)	1:944:A:GLN:N	1:944:A:GLN:CA	1:944:A:GLN:C	1:945:A:PRO:N	1	11.57
(1,179)	1:1042:A:ALA:C	1:1043:A:ARG:N	1:1043:A:ARG:CA	1:1043:A:ARG:C	17	11.55
(1,164)	1:1032:A:ALA:N	1:1032:A:ALA:CA	1:1032:A:ALA:C	1:1033:A:LYS:N	25	11.53
(1,72)	1:972:A:SER:N	1:972:A:SER:CA	1:972:A:SER:C	1:973:A:LEU:N	8	11.53
(1,77)	1:974:A:PRO:C	1:975:A:VAL:N	1:975:A:VAL:CA	1:975:A:VAL:C	1	11.5
(1,106)	1:993:A:SER:N	1:993:A:SER:CA	1:993:A:SER:C	1:994:A:ASP:N	15	11.47
(1,81)	1:980:A:THR:C	1:981:A:HIS:N	1:981:A:HIS:CA	1:981:A:HIS:C	20	11.39
(1,176)	1:1041:A:GLN:N	1:1041:A:GLN:CA	1:1041:A:GLN:C	1:1042:A:ALA:N	25	11.38
(1,34)	1:944:A:GLN:N	1:944:A:GLN:CA	1:944:A:GLN:C	1:945:A:PRO:N	3	11.34
(1,81)	1:980:A:THR:C	1:981:A:HIS:N	1:981:A:HIS:CA	1:981:A:HIS:C	14	11.3
(1,80)	1:980:A:THR:N	1:980:A:THR:CA	1:980:A:THR:C	1:981:A:HIS:N	2	11.3
(1,34)	1:944:A:GLN:N	1:944:A:GLN:CA	1:944:A:GLN:C	1:945:A:PRO:N	10	11.3
(1,84)	1:982:A:ARG:N	1:982:A:ARG:CA	1:982:A:ARG:C	1:983:A:GLU:N	25	11.29
(1,133)	1:1015:A:GLN:C	1:1016:A:GLU:N	1:1016:A:GLU:CA	1:1016:A:GLU:C	12	11.25
(1,34)	1:944:A:GLN:N	1:944:A:GLN:CA	1:944:A:GLN:C	1:945:A:PRO:N	24	11.23
(1,128)	1:1013:A:LEU:N	1:1013:A:LEU:CA	1:1013:A:LEU:C	1:1014:A:GLN:N	4	11.22
(1,4)	1:925:A:VAL:N	1:925:A:VAL:CA	1:925:A:VAL:C	1:926:A:TYR:N	2	11.22
(1,113)	1:1000:A:ASN:C	1:1001:A:LYS:N	1:1001:A:LYS:CA	1:1001:A:LYS:C	18	11.2
(1,84)	1:982:A:ARG:N	1:982:A:ARG:CA	1:982:A:ARG:C	1:983:A:GLU:N	11	11.16
(1,84)	1:982:A:ARG:N	1:982:A:ARG:CA	1:982:A:ARG:C	1:983:A:GLU:N	18	11.16
(1,38)	1:949:A:GLU:N	1:949:A:GLU:CA	1:949:A:GLU:C	1:950:A:GLU:N	14	11.12
(1,113)	1:1000:A:ASN:C	1:1001:A:LYS:N	1:1001:A:LYS:CA	1:1001:A:LYS:C	9	11.11
(1,80)	1:980:A:THR:N	1:980:A:THR:CA	1:980:A:THR:C	1:981:A:HIS:N	16	11.09
(1,128)	1:1013:A:LEU:N	1:1013:A:LEU:CA	1:1013:A:LEU:C	1:1014:A:GLN:N	10	11.08
(1,142)	1:1021:A:MET:N	1:1021:A:MET:CA	1:1021:A:MET:C	1:1022:A:LEU:N	21	11.04
(1,124)	1:1006:A:GLN:N	1:1006:A:GLN:CA	1:1006:A:GLN:C	1:1007:A:GLN:N	14	11.04
(1,80)	1:980:A:THR:N	1:980:A:THR:CA	1:980:A:THR:C	1:981:A:HIS:N	18	11.04
(1,4)	1:925:A:VAL:N	1:925:A:VAL:CA	1:925:A:VAL:C	1:926:A:TYR:N	12	11.04
(1,179)	1:1042:A:ALA:C	1:1043:A:ARG:N	1:1043:A:ARG:CA	1:1043:A:ARG:C	2	11.03
(1,128)	1:1013:A:LEU:N	1:1013:A:LEU:CA	1:1013:A:LEU:C	1:1014:A:GLN:N	13	11.03
(1,113)	1:1000:A:ASN:C	1:1001:A:LYS:N	1:1001:A:LYS:CA	1:1001:A:LYS:C	4	10.99
(1,84)	1:982:A:ARG:N	1:982:A:ARG:CA	1:982:A:ARG:C	1:983:A:GLU:N	21	10.96
(1,179)	1:1042:A:ALA:C	1:1043:A:ARG:N	1:1043:A:ARG:CA	1:1043:A:ARG:C	14	10.91
(1,166)	1:1033:A:LYS:N	1:1033:A:LYS:CA	1:1033:A:LYS:C	1:1034:A:ASN:N	3	10.87
(1,128)	1:1013:A:LEU:N	1:1013:A:LEU:CA	1:1013:A:LEU:C	1:1014:A:GLN:N	21	10.87
(1,79)	1:979:A:SER:C	1:980:A:THR:N	1:980:A:THR:CA	1:980:A:THR:C	8	10.87
(1,106)	1:993:A:SER:N	1:993:A:SER:CA	1:993:A:SER:C	1:994:A:ASP:N	11	10.84
(1,82)	1:981:A:HIS:N	1:981:A:HIS:CA	1:981:A:HIS:C	1:982:A:ARG:N	7	10.84
(1,120)	1:1004:A:LEU:N	1:1004:A:LEU:CA	1:1004:A:LEU:C	1:1005:A:ALA:N	22	10.81
(1,113)	1:1000:A:ASN:C	1:1001:A:LYS:N	1:1001:A:LYS:CA	1:1001:A:LYS:C	23	10.81
(1,124)	1:1006:A:GLN:N	1:1006:A:GLN:CA	1:1006:A:GLN:C	1:1007:A:GLN:N	15	10.76
(1,81)	1:980:A:THR:C	1:981:A:HIS:N	1:981:A:HIS:CA	1:981:A:HIS:C	24	10.73
(1,57)	1:960:A:LEU:C	1:961:A:ALA:N	1:961:A:ALA:CA	1:961:A:ALA:C	16	10.73
(1,116)	1:1002:A:MET:N	1:1002:A:MET:CA	1:1002:A:MET:C	1:1003:A:LYS:N	20	10.72
(1,112)	1:997:A:GLU:N	1:997:A:GLU:CA	1:997:A:GLU:C	1:998:A:LEU:N	14	10.71
(1,176)	1:1041:A:GLN:N	1:1041:A:GLN:CA	1:1041:A:GLN:C	1:1042:A:ALA:N	5	10.7
(1,72)	1:972:A:SER:N	1:972:A:SER:CA	1:972:A:SER:C	1:973:A:LEU:N	16	10.7
(1,84)	1:982:A:ARG:N	1:982:A:ARG:CA	1:982:A:ARG:C	1:983:A:GLU:N	7	10.66
(1,81)	1:980:A:THR:C	1:981:A:HIS:N	1:981:A:HIS:CA	1:981:A:HIS:C	23	10.66
(1,58)	1:961:A:ALA:N	1:961:A:ALA:CA	1:961:A:ALA:C	1:962:A:LEU:N	13	10.63

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,118)	1:1003:A:LYS:N	1:1003:A:LYS:CA	1:1003:A:LYS:C	1:1004:A:LEU:N	22	10.6
(1,113)	1:1000:A:ASN:C	1:1001:A:LYS:N	1:1001:A:LYS:CA	1:1001:A:LYS:C	2	10.59
(1,34)	1:944:A:GLN:N	1:944:A:GLN:CA	1:944:A:GLN:C	1:945:A:PRO:N	7	10.58
(1,36)	1:948:A:PRO:N	1:948:A:PRO:CA	1:948:A:PRO:C	1:949:A:GLU:N	7	10.56
(1,84)	1:982:A:ARG:N	1:982:A:ARG:CA	1:982:A:ARG:C	1:983:A:GLU:N	4	10.55
(1,84)	1:982:A:ARG:N	1:982:A:ARG:CA	1:982:A:ARG:C	1:983:A:GLU:N	12	10.55
(1,72)	1:972:A:SER:N	1:972:A:SER:CA	1:972:A:SER:C	1:973:A:LEU:N	4	10.55
(1,34)	1:944:A:GLN:N	1:944:A:GLN:CA	1:944:A:GLN:C	1:945:A:PRO:N	16	10.53
(1,82)	1:981:A:HIS:N	1:981:A:HIS:CA	1:981:A:HIS:C	1:982:A:ARG:N	14	10.52
(1,81)	1:980:A:THR:C	1:981:A:HIS:N	1:981:A:HIS:CA	1:981:A:HIS:C	5	10.48
(1,118)	1:1003:A:LYS:N	1:1003:A:LYS:CA	1:1003:A:LYS:C	1:1004:A:LEU:N	14	10.46
(1,58)	1:961:A:ALA:N	1:961:A:ALA:CA	1:961:A:ALA:C	1:962:A:LEU:N	6	10.44
(1,128)	1:1013:A:LEU:N	1:1013:A:LEU:CA	1:1013:A:LEU:C	1:1014:A:GLN:N	15	10.43
(1,176)	1:1041:A:GLN:N	1:1041:A:GLN:CA	1:1041:A:GLN:C	1:1042:A:ALA:N	13	10.42
(1,127)	1:1012:A:SER:C	1:1013:A:LEU:N	1:1013:A:LEU:CA	1:1013:A:LEU:C	5	10.42
(1,81)	1:980:A:THR:C	1:981:A:HIS:N	1:981:A:HIS:CA	1:981:A:HIS:C	11	10.4
(1,113)	1:1000:A:ASN:C	1:1001:A:LYS:N	1:1001:A:LYS:CA	1:1001:A:LYS:C	6	10.39
(1,34)	1:944:A:GLN:N	1:944:A:GLN:CA	1:944:A:GLN:C	1:945:A:PRO:N	19	10.39
(1,176)	1:1041:A:GLN:N	1:1041:A:GLN:CA	1:1041:A:GLN:C	1:1042:A:ALA:N	4	10.36
(1,138)	1:1019:A:LYS:N	1:1019:A:LYS:CA	1:1019:A:LYS:C	1:1020:A:GLN:N	7	10.36
(1,177)	1:1041:A:GLN:C	1:1042:A:ALA:N	1:1042:A:ALA:CA	1:1042:A:ALA:C	21	10.33
(1,122)	1:1005:A:ALA:N	1:1005:A:ALA:CA	1:1005:A:ALA:C	1:1006:A:GLN:N	2	10.33
(1,113)	1:1000:A:ASN:C	1:1001:A:LYS:N	1:1001:A:LYS:CA	1:1001:A:LYS:C	1	10.33
(1,74)	1:973:A:LEU:N	1:973:A:LEU:CA	1:973:A:LEU:C	1:974:A:PRO:N	10	10.32
(1,138)	1:1019:A:LYS:N	1:1019:A:LYS:CA	1:1019:A:LYS:C	1:1020:A:GLN:N	2	10.31
(1,138)	1:1019:A:LYS:N	1:1019:A:LYS:CA	1:1019:A:LYS:C	1:1020:A:GLN:N	3	10.31
(1,52)	1:958:A:VAL:N	1:958:A:VAL:CA	1:958:A:VAL:C	1:959:A:GLY:N	22	10.31
(1,23)	1:938:A:GLU:C	1:939:A:MET:N	1:939:A:MET:CA	1:939:A:MET:C	15	10.31
(1,103)	1:991:A:LEU:C	1:992:A:ASN:N	1:992:A:ASN:CA	1:992:A:ASN:C	16	10.3
(1,58)	1:961:A:ALA:N	1:961:A:ALA:CA	1:961:A:ALA:C	1:962:A:LEU:N	16	10.29
(1,34)	1:944:A:GLN:N	1:944:A:GLN:CA	1:944:A:GLN:C	1:945:A:PRO:N	18	10.28
(1,84)	1:982:A:ARG:N	1:982:A:ARG:CA	1:982:A:ARG:C	1:983:A:GLU:N	23	10.27
(1,72)	1:972:A:SER:N	1:972:A:SER:CA	1:972:A:SER:C	1:973:A:LEU:N	11	10.27
(1,72)	1:972:A:SER:N	1:972:A:SER:CA	1:972:A:SER:C	1:973:A:LEU:N	13	10.27
(1,5)	1:925:A:VAL:C	1:926:A:TYR:N	1:926:A:TYR:CA	1:926:A:TYR:C	3	10.23
(1,84)	1:982:A:ARG:N	1:982:A:ARG:CA	1:982:A:ARG:C	1:983:A:GLU:N	8	10.22
(1,29)	1:941:A:SER:C	1:942:A:LYS:N	1:942:A:LYS:CA	1:942:A:LYS:C	15	10.21
(1,93)	1:986:A:MET:C	1:987:A:ALA:N	1:987:A:ALA:CA	1:987:A:ALA:C	7	10.2
(1,81)	1:980:A:THR:C	1:981:A:HIS:N	1:981:A:HIS:CA	1:981:A:HIS:C	10	10.19
(1,72)	1:972:A:SER:N	1:972:A:SER:CA	1:972:A:SER:C	1:973:A:LEU:N	6	10.19
(1,68)	1:969:A:VAL:N	1:969:A:VAL:CA	1:969:A:VAL:C	1:970:A:ASP:N	1	10.17
(1,37)	1:948:A:PRO:C	1:949:A:GLU:N	1:949:A:GLU:CA	1:949:A:GLU:C	21	10.17
(1,103)	1:991:A:LEU:C	1:992:A:ASN:N	1:992:A:ASN:CA	1:992:A:ASN:C	20	10.15
(1,72)	1:972:A:SER:N	1:972:A:SER:CA	1:972:A:SER:C	1:973:A:LEU:N	19	10.14
(1,84)	1:982:A:ARG:N	1:982:A:ARG:CA	1:982:A:ARG:C	1:983:A:GLU:N	6	10.13
(1,160)	1:1030:A:VAL:N	1:1030:A:VAL:CA	1:1030:A:VAL:C	1:1031:A:ASP:N	6	10.12
(1,119)	1:1003:A:LYS:C	1:1004:A:LEU:N	1:1004:A:LEU:CA	1:1004:A:LEU:C	22	10.12
(1,46)	1:955:A:VAL:N	1:955:A:VAL:CA	1:955:A:VAL:C	1:956:A:LYS:N	22	10.12
(1,138)	1:1019:A:LYS:N	1:1019:A:LYS:CA	1:1019:A:LYS:C	1:1020:A:GLN:N	4	10.11
(1,33)	1:943:A:ILE:C	1:944:A:GLN:N	1:944:A:GLN:CA	1:944:A:GLN:C	11	10.1
(1,82)	1:981:A:HIS:N	1:981:A:HIS:CA	1:981:A:HIS:C	1:982:A:ARG:N	21	10.09

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,178)	1:1042:A:ALA:N	1:1042:A:ALA:CA	1:1042:A:ALA:C	1:1043:A:ARG:N	12	10.0
(1,92)	1:986:A:MET:N	1:986:A:MET:CA	1:986:A:MET:C	1:987:A:ALA:N	17	9.99
(1,93)	1:986:A:MET:C	1:987:A:ALA:N	1:987:A:ALA:CA	1:987:A:ALA:C	6	9.96
(1,1)	1:922:A:ASN:C	1:923:A:ASP:N	1:923:A:ASP:CA	1:923:A:ASP:C	22	9.96
(1,80)	1:980:A:THR:N	1:980:A:THR:CA	1:980:A:THR:C	1:981:A:HIS:N	25	9.95
(1,6)	1:926:A:TYR:N	1:926:A:TYR:CA	1:926:A:TYR:C	1:927:A:GLU:N	18	9.95
(1,113)	1:1000:A:ASN:C	1:1001:A:LYS:N	1:1001:A:LYS:CA	1:1001:A:LYS:C	24	9.93
(1,37)	1:948:A:PRO:C	1:949:A:GLU:N	1:949:A:GLU:CA	1:949:A:GLU:C	3	9.92
(1,72)	1:972:A:SER:N	1:972:A:SER:CA	1:972:A:SER:C	1:973:A:LEU:N	25	9.9
(1,138)	1:1019:A:LYS:N	1:1019:A:LYS:CA	1:1019:A:LYS:C	1:1020:A:GLN:N	14	9.88
(1,113)	1:1000:A:ASN:C	1:1001:A:LYS:N	1:1001:A:LYS:CA	1:1001:A:LYS:C	16	9.88
(1,58)	1:961:A:ALA:N	1:961:A:ALA:CA	1:961:A:ALA:C	1:962:A:LEU:N	15	9.88
(1,128)	1:1013:A:LEU:N	1:1013:A:LEU:CA	1:1013:A:LEU:C	1:1014:A:GLN:N	14	9.87
(1,124)	1:1006:A:GLN:N	1:1006:A:GLN:CA	1:1006:A:GLN:C	1:1007:A:GLN:N	17	9.86
(1,36)	1:948:A:PRO:N	1:948:A:PRO:CA	1:948:A:PRO:C	1:949:A:GLU:N	18	9.83
(1,58)	1:961:A:ALA:N	1:961:A:ALA:CA	1:961:A:ALA:C	1:962:A:LEU:N	2	9.82
(1,133)	1:1015:A:GLN:C	1:1016:A:GLU:N	1:1016:A:GLU:CA	1:1016:A:GLU:C	17	9.81
(1,38)	1:949:A:GLU:N	1:949:A:GLU:CA	1:949:A:GLU:C	1:950:A:GLU:N	19	9.81
(1,128)	1:1013:A:LEU:N	1:1013:A:LEU:CA	1:1013:A:LEU:C	1:1014:A:GLN:N	16	9.79
(1,46)	1:955:A:VAL:N	1:955:A:VAL:CA	1:955:A:VAL:C	1:956:A:LYS:N	19	9.79
(1,118)	1:1003:A:LYS:N	1:1003:A:LYS:CA	1:1003:A:LYS:C	1:1004:A:LEU:N	20	9.73
(1,81)	1:980:A:THR:C	1:981:A:HIS:N	1:981:A:HIS:CA	1:981:A:HIS:C	8	9.73
(1,4)	1:925:A:VAL:N	1:925:A:VAL:CA	1:925:A:VAL:C	1:926:A:TYR:N	21	9.73
(1,58)	1:961:A:ALA:N	1:961:A:ALA:CA	1:961:A:ALA:C	1:962:A:LEU:N	12	9.72
(1,58)	1:961:A:ALA:N	1:961:A:ALA:CA	1:961:A:ALA:C	1:962:A:LEU:N	14	9.72
(1,177)	1:1041:A:GLN:C	1:1042:A:ALA:N	1:1042:A:ALA:CA	1:1042:A:ALA:C	24	9.71
(1,138)	1:1019:A:LYS:N	1:1019:A:LYS:CA	1:1019:A:LYS:C	1:1020:A:GLN:N	21	9.7
(1,33)	1:943:A:ILE:C	1:944:A:GLN:N	1:944:A:GLN:CA	1:944:A:GLN:C	20	9.7
(1,30)	1:942:A:LYS:N	1:942:A:LYS:CA	1:942:A:LYS:C	1:943:A:ILE:N	17	9.7
(1,164)	1:1032:A:ALA:N	1:1032:A:ALA:CA	1:1032:A:ALA:C	1:1033:A:LYS:N	17	9.69
(1,34)	1:944:A:GLN:N	1:944:A:GLN:CA	1:944:A:GLN:C	1:945:A:PRO:N	4	9.66
(1,80)	1:980:A:THR:N	1:980:A:THR:CA	1:980:A:THR:C	1:981:A:HIS:N	19	9.61
(1,177)	1:1041:A:GLN:C	1:1042:A:ALA:N	1:1042:A:ALA:CA	1:1042:A:ALA:C	2	9.6
(1,32)	1:943:A:ILE:N	1:943:A:ILE:CA	1:943:A:ILE:C	1:944:A:GLN:N	1	9.6
(1,177)	1:1041:A:GLN:C	1:1042:A:ALA:N	1:1042:A:ALA:CA	1:1042:A:ALA:C	1	9.57
(1,133)	1:1015:A:GLN:C	1:1016:A:GLU:N	1:1016:A:GLU:CA	1:1016:A:GLU:C	7	9.57
(1,127)	1:1012:A:SER:C	1:1013:A:LEU:N	1:1013:A:LEU:CA	1:1013:A:LEU:C	4	9.57
(1,82)	1:981:A:HIS:N	1:981:A:HIS:CA	1:981:A:HIS:C	1:982:A:ARG:N	25	9.56
(1,82)	1:981:A:HIS:N	1:981:A:HIS:CA	1:981:A:HIS:C	1:982:A:ARG:N	1	9.55
(1,100)	1:990:A:LEU:N	1:990:A:LEU:CA	1:990:A:LEU:C	1:991:A:LEU:N	4	9.54
(1,82)	1:981:A:HIS:N	1:981:A:HIS:CA	1:981:A:HIS:C	1:982:A:ARG:N	8	9.53
(1,4)	1:925:A:VAL:N	1:925:A:VAL:CA	1:925:A:VAL:C	1:926:A:TYR:N	14	9.52
(1,118)	1:1003:A:LYS:N	1:1003:A:LYS:CA	1:1003:A:LYS:C	1:1004:A:LEU:N	23	9.51
(1,72)	1:972:A:SER:N	1:972:A:SER:CA	1:972:A:SER:C	1:973:A:LEU:N	5	9.51
(1,139)	1:1019:A:LYS:C	1:1020:A:GLN:N	1:1020:A:GLN:CA	1:1020:A:GLN:C	19	9.5
(1,128)	1:1013:A:LEU:N	1:1013:A:LEU:CA	1:1013:A:LEU:C	1:1014:A:GLN:N	23	9.5
(1,175)	1:1040:A:ASP:C	1:1041:A:GLN:N	1:1041:A:GLN:CA	1:1041:A:GLN:C	16	9.49
(1,129)	1:1013:A:LEU:C	1:1014:A:GLN:N	1:1014:A:GLN:CA	1:1014:A:GLN:C	22	9.49
(1,82)	1:981:A:HIS:N	1:981:A:HIS:CA	1:981:A:HIS:C	1:982:A:ARG:N	18	9.49
(1,33)	1:943:A:ILE:C	1:944:A:GLN:N	1:944:A:GLN:CA	1:944:A:GLN:C	19	9.49
(1,172)	1:1036:A:LEU:N	1:1036:A:LEU:CA	1:1036:A:LEU:C	1:1037:A:ASP:N	21	9.47

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,138)	1:1019:A:LYS:N	1:1019:A:LYS:CA	1:1019:A:LYS:C	1:1020:A:GLN:N	1	9.47
(1,46)	1:955:A:VAL:N	1:955:A:VAL:CA	1:955:A:VAL:C	1:956:A:LYS:N	20	9.44
(1,30)	1:942:A:LYS:N	1:942:A:LYS:CA	1:942:A:LYS:C	1:943:A:ILE:N	21	9.44
(1,118)	1:1003:A:LYS:N	1:1003:A:LYS:CA	1:1003:A:LYS:C	1:1004:A:LEU:N	17	9.43
(1,5)	1:925:A:VAL:C	1:926:A:TYR:N	1:926:A:TYR:CA	1:926:A:TYR:C	9	9.43
(1,133)	1:1015:A:GLN:C	1:1016:A:GLU:N	1:1016:A:GLU:CA	1:1016:A:GLU:C	6	9.42
(1,176)	1:1041:A:GLN:N	1:1041:A:GLN:CA	1:1041:A:GLN:C	1:1042:A:ALA:N	19	9.41
(1,119)	1:1003:A:LYS:C	1:1004:A:LEU:N	1:1004:A:LEU:CA	1:1004:A:LEU:C	4	9.41
(1,132)	1:1015:A:GLN:N	1:1015:A:GLN:CA	1:1015:A:GLN:C	1:1016:A:GLU:N	24	9.4
(1,72)	1:972:A:SER:N	1:972:A:SER:CA	1:972:A:SER:C	1:973:A:LEU:N	18	9.4
(1,38)	1:949:A:GLU:N	1:949:A:GLU:CA	1:949:A:GLU:C	1:950:A:GLU:N	5	9.4
(1,170)	1:1035:A:LEU:N	1:1035:A:LEU:CA	1:1035:A:LEU:C	1:1036:A:LEU:N	3	9.39
(1,72)	1:972:A:SER:N	1:972:A:SER:CA	1:972:A:SER:C	1:973:A:LEU:N	7	9.39
(1,52)	1:958:A:VAL:N	1:958:A:VAL:CA	1:958:A:VAL:C	1:959:A:GLY:N	1	9.37
(1,113)	1:1000:A:ASN:C	1:1001:A:LYS:N	1:1001:A:LYS:CA	1:1001:A:LYS:C	10	9.36
(1,84)	1:982:A:ARG:N	1:982:A:ARG:CA	1:982:A:ARG:C	1:983:A:GLU:N	9	9.36
(1,59)	1:964:A:THR:C	1:965:A:LEU:N	1:965:A:LEU:CA	1:965:A:LEU:C	16	9.35
(1,52)	1:958:A:VAL:N	1:958:A:VAL:CA	1:958:A:VAL:C	1:959:A:GLY:N	5	9.35
(1,33)	1:943:A:ILE:C	1:944:A:GLN:N	1:944:A:GLN:CA	1:944:A:GLN:C	4	9.34
(1,5)	1:925:A:VAL:C	1:926:A:TYR:N	1:926:A:TYR:CA	1:926:A:TYR:C	14	9.34
(1,46)	1:955:A:VAL:N	1:955:A:VAL:CA	1:955:A:VAL:C	1:956:A:LYS:N	4	9.33
(1,80)	1:980:A:THR:N	1:980:A:THR:CA	1:980:A:THR:C	1:981:A:HIS:N	4	9.32
(1,159)	1:1029:A:ALA:C	1:1030:A:VAL:N	1:1030:A:VAL:CA	1:1030:A:VAL:C	17	9.31
(1,138)	1:1019:A:LYS:N	1:1019:A:LYS:CA	1:1019:A:LYS:C	1:1020:A:GLN:N	12	9.31
(1,120)	1:1004:A:LEU:N	1:1004:A:LEU:CA	1:1004:A:LEU:C	1:1005:A:ALA:N	12	9.31
(1,33)	1:943:A:ILE:C	1:944:A:GLN:N	1:944:A:GLN:CA	1:944:A:GLN:C	5	9.31
(1,127)	1:1012:A:SER:C	1:1013:A:LEU:N	1:1013:A:LEU:CA	1:1013:A:LEU:C	7	9.3
(1,84)	1:982:A:ARG:N	1:982:A:ARG:CA	1:982:A:ARG:C	1:983:A:GLU:N	15	9.3
(1,177)	1:1041:A:GLN:C	1:1042:A:ALA:N	1:1042:A:ALA:CA	1:1042:A:ALA:C	18	9.29
(1,58)	1:961:A:ALA:N	1:961:A:ALA:CA	1:961:A:ALA:C	1:962:A:LEU:N	23	9.29
(1,79)	1:979:A:SER:C	1:980:A:THR:N	1:980:A:THR:CA	1:980:A:THR:C	20	9.25
(1,52)	1:958:A:VAL:N	1:958:A:VAL:CA	1:958:A:VAL:C	1:959:A:GLY:N	21	9.25
(1,46)	1:955:A:VAL:N	1:955:A:VAL:CA	1:955:A:VAL:C	1:956:A:LYS:N	16	9.25
(1,34)	1:944:A:GLN:N	1:944:A:GLN:CA	1:944:A:GLN:C	1:945:A:PRO:N	13	9.24
(1,138)	1:1019:A:LYS:N	1:1019:A:LYS:CA	1:1019:A:LYS:C	1:1020:A:GLN:N	18	9.22
(1,133)	1:1015:A:GLN:C	1:1016:A:GLU:N	1:1016:A:GLU:CA	1:1016:A:GLU:C	4	9.21
(1,58)	1:961:A:ALA:N	1:961:A:ALA:CA	1:961:A:ALA:C	1:962:A:LEU:N	22	9.21
(1,84)	1:982:A:ARG:N	1:982:A:ARG:CA	1:982:A:ARG:C	1:983:A:GLU:N	3	9.2
(1,82)	1:981:A:HIS:N	1:981:A:HIS:CA	1:981:A:HIS:C	1:982:A:ARG:N	17	9.2
(1,58)	1:961:A:ALA:N	1:961:A:ALA:CA	1:961:A:ALA:C	1:962:A:LEU:N	20	9.2
(1,176)	1:1041:A:GLN:N	1:1041:A:GLN:CA	1:1041:A:GLN:C	1:1042:A:ALA:N	22	9.19
(1,177)	1:1041:A:GLN:C	1:1042:A:ALA:N	1:1042:A:ALA:CA	1:1042:A:ALA:C	7	9.18
(1,92)	1:986:A:MET:N	1:986:A:MET:CA	1:986:A:MET:C	1:987:A:ALA:N	15	9.18
(1,58)	1:961:A:ALA:N	1:961:A:ALA:CA	1:961:A:ALA:C	1:962:A:LEU:N	1	9.17
(1,161)	1:1030:A:VAL:C	1:1031:A:ASP:N	1:1031:A:ASP:CA	1:1031:A:ASP:C	6	9.16
(1,160)	1:1030:A:VAL:N	1:1030:A:VAL:CA	1:1030:A:VAL:C	1:1031:A:ASP:N	18	9.16
(1,119)	1:1003:A:LYS:C	1:1004:A:LEU:N	1:1004:A:LEU:CA	1:1004:A:LEU:C	12	9.16
(1,177)	1:1041:A:GLN:C	1:1042:A:ALA:N	1:1042:A:ALA:CA	1:1042:A:ALA:C	23	9.15
(1,5)	1:925:A:VAL:C	1:926:A:TYR:N	1:926:A:TYR:CA	1:926:A:TYR:C	2	9.13
(1,133)	1:1015:A:GLN:C	1:1016:A:GLU:N	1:1016:A:GLU:CA	1:1016:A:GLU:C	23	9.11
(1,33)	1:943:A:ILE:C	1:944:A:GLN:N	1:944:A:GLN:CA	1:944:A:GLN:C	13	9.11

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,120)	1:1004:A:LEU:N	1:1004:A:LEU:CA	1:1004:A:LEU:C	1:1005:A:ALA:N	25	9.1
(1,113)	1:1000:A:ASN:C	1:1001:A:LYS:N	1:1001:A:LYS:CA	1:1001:A:LYS:C	15	9.1
(1,133)	1:1015:A:GLN:C	1:1016:A:GLU:N	1:1016:A:GLU:CA	1:1016:A:GLU:C	25	9.08
(1,67)	1:968:A:THR:C	1:969:A:VAL:N	1:969:A:VAL:CA	1:969:A:VAL:C	15	9.08
(1,52)	1:958:A:VAL:N	1:958:A:VAL:CA	1:958:A:VAL:C	1:959:A:GLY:N	12	9.08
(1,80)	1:980:A:THR:N	1:980:A:THR:CA	1:980:A:THR:C	1:981:A:HIS:N	8	9.07
(1,138)	1:1019:A:LYS:N	1:1019:A:LYS:CA	1:1019:A:LYS:C	1:1020:A:GLN:N	25	9.06
(1,128)	1:1013:A:LEU:N	1:1013:A:LEU:CA	1:1013:A:LEU:C	1:1014:A:GLN:N	7	9.06
(1,177)	1:1041:A:GLN:C	1:1042:A:ALA:N	1:1042:A:ALA:CA	1:1042:A:ALA:C	25	9.05
(1,58)	1:961:A:ALA:N	1:961:A:ALA:CA	1:961:A:ALA:C	1:962:A:LEU:N	11	9.05
(1,113)	1:1000:A:ASN:C	1:1001:A:LYS:N	1:1001:A:LYS:CA	1:1001:A:LYS:C	13	9.04
(1,37)	1:948:A:PRO:C	1:949:A:GLU:N	1:949:A:GLU:CA	1:949:A:GLU:C	24	9.04
(1,133)	1:1015:A:GLN:C	1:1016:A:GLU:N	1:1016:A:GLU:CA	1:1016:A:GLU:C	9	9.03
(1,139)	1:1019:A:LYS:C	1:1020:A:GLN:N	1:1020:A:GLN:CA	1:1020:A:GLN:C	5	9.02
(1,98)	1:989:A:LYS:N	1:989:A:LYS:CA	1:989:A:LYS:C	1:990:A:LEU:N	17	9.02
(1,131)	1:1014:A:GLN:C	1:1015:A:GLN:N	1:1015:A:GLN:CA	1:1015:A:GLN:C	22	9.01
(1,120)	1:1004:A:LEU:N	1:1004:A:LEU:CA	1:1004:A:LEU:C	1:1005:A:ALA:N	8	9.01
(1,57)	1:960:A:LEU:C	1:961:A:ALA:N	1:961:A:ALA:CA	1:961:A:ALA:C	17	9.0
(1,176)	1:1041:A:GLN:N	1:1041:A:GLN:CA	1:1041:A:GLN:C	1:1042:A:ALA:N	10	8.99
(1,30)	1:942:A:LYS:N	1:942:A:LYS:CA	1:942:A:LYS:C	1:943:A:ILE:N	15	8.99
(1,124)	1:1006:A:GLN:N	1:1006:A:GLN:CA	1:1006:A:GLN:C	1:1007:A:GLN:N	22	8.98
(1,27)	1:940:A:SER:C	1:941:A:SER:N	1:941:A:SER:CA	1:941:A:SER:C	19	8.97
(1,181)	1:1043:A:ARG:C	1:1044:A:LEU:N	1:1044:A:LEU:CA	1:1044:A:LEU:C	21	8.96
(1,93)	1:986:A:MET:C	1:987:A:ALA:N	1:987:A:ALA:CA	1:987:A:ALA:C	3	8.96
(1,93)	1:986:A:MET:C	1:987:A:ALA:N	1:987:A:ALA:CA	1:987:A:ALA:C	5	8.95
(1,86)	1:983:A:GLU:N	1:983:A:GLU:CA	1:983:A:GLU:C	1:984:A:ILE:N	1	8.94
(1,58)	1:961:A:ALA:N	1:961:A:ALA:CA	1:961:A:ALA:C	1:962:A:LEU:N	4	8.94
(1,82)	1:981:A:HIS:N	1:981:A:HIS:CA	1:981:A:HIS:C	1:982:A:ARG:N	2	8.93
(1,180)	1:1043:A:ARG:N	1:1043:A:ARG:CA	1:1043:A:ARG:C	1:1044:A:LEU:N	22	8.92
(1,6)	1:926:A:TYR:N	1:926:A:TYR:CA	1:926:A:TYR:C	1:927:A:GLU:N	20	8.92
(1,82)	1:981:A:HIS:N	1:981:A:HIS:CA	1:981:A:HIS:C	1:982:A:ARG:N	13	8.9
(1,72)	1:972:A:SER:N	1:972:A:SER:CA	1:972:A:SER:C	1:973:A:LEU:N	23	8.88
(1,181)	1:1043:A:ARG:C	1:1044:A:LEU:N	1:1044:A:LEU:CA	1:1044:A:LEU:C	2	8.86
(1,133)	1:1015:A:GLN:C	1:1016:A:GLU:N	1:1016:A:GLU:CA	1:1016:A:GLU:C	13	8.86
(1,5)	1:925:A:VAL:C	1:926:A:TYR:N	1:926:A:TYR:CA	1:926:A:TYR:C	13	8.86
(1,58)	1:961:A:ALA:N	1:961:A:ALA:CA	1:961:A:ALA:C	1:962:A:LEU:N	19	8.85
(1,93)	1:986:A:MET:C	1:987:A:ALA:N	1:987:A:ALA:CA	1:987:A:ALA:C	24	8.83
(1,52)	1:958:A:VAL:N	1:958:A:VAL:CA	1:958:A:VAL:C	1:959:A:GLY:N	3	8.82
(1,52)	1:958:A:VAL:N	1:958:A:VAL:CA	1:958:A:VAL:C	1:959:A:GLY:N	14	8.82
(1,132)	1:1015:A:GLN:N	1:1015:A:GLN:CA	1:1015:A:GLN:C	1:1016:A:GLU:N	20	8.81
(1,102)	1:991:A:LEU:N	1:991:A:LEU:CA	1:991:A:LEU:C	1:992:A:ASN:N	15	8.81
(1,164)	1:1032:A:ALA:N	1:1032:A:ALA:CA	1:1032:A:ALA:C	1:1033:A:LYS:N	24	8.8
(1,81)	1:980:A:THR:C	1:981:A:HIS:N	1:981:A:HIS:CA	1:981:A:HIS:C	17	8.79
(1,52)	1:958:A:VAL:N	1:958:A:VAL:CA	1:958:A:VAL:C	1:959:A:GLY:N	6	8.79
(1,103)	1:991:A:LEU:C	1:992:A:ASN:N	1:992:A:ASN:CA	1:992:A:ASN:C	15	8.78
(1,118)	1:1003:A:LYS:N	1:1003:A:LYS:CA	1:1003:A:LYS:C	1:1004:A:LEU:N	9	8.76
(1,32)	1:943:A:ILE:N	1:943:A:ILE:CA	1:943:A:ILE:C	1:944:A:GLN:N	16	8.76
(1,79)	1:979:A:SER:C	1:980:A:THR:N	1:980:A:THR:CA	1:980:A:THR:C	24	8.74
(1,84)	1:982:A:ARG:N	1:982:A:ARG:CA	1:982:A:ARG:C	1:983:A:GLU:N	19	8.73
(1,74)	1:973:A:LEU:N	1:973:A:LEU:CA	1:973:A:LEU:C	1:974:A:PRO:N	2	8.73
(1,58)	1:961:A:ALA:N	1:961:A:ALA:CA	1:961:A:ALA:C	1:962:A:LEU:N	9	8.73

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,52)	1:958:A:VAL:N	1:958:A:VAL:CA	1:958:A:VAL:C	1:959:A:GLY:N	13	8.73
(1,133)	1:1015:A:GLN:C	1:1016:A:GLU:N	1:1016:A:GLU:CA	1:1016:A:GLU:C	19	8.72
(1,84)	1:982:A:ARG:N	1:982:A:ARG:CA	1:982:A:ARG:C	1:983:A:GLU:N	24	8.72
(1,4)	1:925:A:VAL:N	1:925:A:VAL:CA	1:925:A:VAL:C	1:926:A:TYR:N	3	8.71
(1,88)	1:984:A:ILE:N	1:984:A:ILE:CA	1:984:A:ILE:C	1:985:A:GLU:N	8	8.7
(1,111)	1:996:A:ALA:C	1:997:A:GLU:N	1:997:A:GLU:CA	1:997:A:GLU:C	7	8.69
(1,85)	1:982:A:ARG:C	1:983:A:GLU:N	1:983:A:GLU:CA	1:983:A:GLU:C	7	8.69
(1,37)	1:948:A:PRO:C	1:949:A:GLU:N	1:949:A:GLU:CA	1:949:A:GLU:C	9	8.68
(1,4)	1:925:A:VAL:N	1:925:A:VAL:CA	1:925:A:VAL:C	1:926:A:TYR:N	17	8.68
(1,37)	1:948:A:PRO:C	1:949:A:GLU:N	1:949:A:GLU:CA	1:949:A:GLU:C	4	8.67
(1,58)	1:961:A:ALA:N	1:961:A:ALA:CA	1:961:A:ALA:C	1:962:A:LEU:N	17	8.66
(1,82)	1:981:A:HIS:N	1:981:A:HIS:CA	1:981:A:HIS:C	1:982:A:ARG:N	9	8.65
(1,46)	1:955:A:VAL:N	1:955:A:VAL:CA	1:955:A:VAL:C	1:956:A:LYS:N	15	8.65
(1,84)	1:982:A:ARG:N	1:982:A:ARG:CA	1:982:A:ARG:C	1:983:A:GLU:N	20	8.63
(1,161)	1:1030:A:VAL:C	1:1031:A:ASP:N	1:1031:A:ASP:CA	1:1031:A:ASP:C	13	8.62
(1,158)	1:1029:A:ALA:N	1:1029:A:ALA:CA	1:1029:A:ALA:C	1:1030:A:VAL:N	16	8.62
(1,93)	1:986:A:MET:C	1:987:A:ALA:N	1:987:A:ALA:CA	1:987:A:ALA:C	19	8.62
(1,52)	1:958:A:VAL:N	1:958:A:VAL:CA	1:958:A:VAL:C	1:959:A:GLY:N	20	8.61
(1,129)	1:1013:A:LEU:C	1:1014:A:GLN:N	1:1014:A:GLN:CA	1:1014:A:GLN:C	12	8.6
(1,125)	1:1006:A:GLN:C	1:1007:A:GLN:N	1:1007:A:GLN:CA	1:1007:A:GLN:C	19	8.6
(1,80)	1:980:A:THR:N	1:980:A:THR:CA	1:980:A:THR:C	1:981:A:HIS:N	23	8.6
(1,157)	1:1028:A:LEU:C	1:1029:A:ALA:N	1:1029:A:ALA:CA	1:1029:A:ALA:C	11	8.59
(1,81)	1:980:A:THR:C	1:981:A:HIS:N	1:981:A:HIS:CA	1:981:A:HIS:C	1	8.59
(1,34)	1:944:A:GLN:N	1:944:A:GLN:CA	1:944:A:GLN:C	1:945:A:PRO:N	5	8.56
(1,46)	1:955:A:VAL:N	1:955:A:VAL:CA	1:955:A:VAL:C	1:956:A:LYS:N	17	8.55
(1,133)	1:1015:A:GLN:C	1:1016:A:GLU:N	1:1016:A:GLU:CA	1:1016:A:GLU:C	21	8.53
(1,82)	1:981:A:HIS:N	1:981:A:HIS:CA	1:981:A:HIS:C	1:982:A:ARG:N	19	8.53
(1,46)	1:955:A:VAL:N	1:955:A:VAL:CA	1:955:A:VAL:C	1:956:A:LYS:N	6	8.53
(1,133)	1:1015:A:GLN:C	1:1016:A:GLU:N	1:1016:A:GLU:CA	1:1016:A:GLU:C	5	8.52
(1,80)	1:980:A:THR:N	1:980:A:THR:CA	1:980:A:THR:C	1:981:A:HIS:N	1	8.52
(1,108)	1:995:A:LEU:N	1:995:A:LEU:CA	1:995:A:LEU:C	1:996:A:ALA:N	16	8.51
(1,27)	1:940:A:SER:C	1:941:A:SER:N	1:941:A:SER:CA	1:941:A:SER:C	5	8.51
(1,4)	1:925:A:VAL:N	1:925:A:VAL:CA	1:925:A:VAL:C	1:926:A:TYR:N	23	8.51
(1,177)	1:1041:A:GLN:C	1:1042:A:ALA:N	1:1042:A:ALA:CA	1:1042:A:ALA:C	15	8.5
(1,42)	1:953:A:PRO:N	1:953:A:PRO:CA	1:953:A:PRO:C	1:954:A:MET:N	21	8.5
(1,176)	1:1041:A:GLN:N	1:1041:A:GLN:CA	1:1041:A:GLN:C	1:1042:A:ALA:N	6	8.49
(1,164)	1:1032:A:ALA:N	1:1032:A:ALA:CA	1:1032:A:ALA:C	1:1033:A:LYS:N	15	8.49
(1,84)	1:982:A:ARG:N	1:982:A:ARG:CA	1:982:A:ARG:C	1:983:A:GLU:N	14	8.49
(1,58)	1:961:A:ALA:N	1:961:A:ALA:CA	1:961:A:ALA:C	1:962:A:LEU:N	5	8.48
(1,5)	1:925:A:VAL:C	1:926:A:TYR:N	1:926:A:TYR:CA	1:926:A:TYR:C	12	8.48
(1,177)	1:1041:A:GLN:C	1:1042:A:ALA:N	1:1042:A:ALA:CA	1:1042:A:ALA:C	4	8.47
(1,87)	1:983:A:GLU:C	1:984:A:ILE:N	1:984:A:ILE:CA	1:984:A:ILE:C	22	8.47
(1,33)	1:943:A:ILE:C	1:944:A:GLN:N	1:944:A:GLN:CA	1:944:A:GLN:C	9	8.47
(1,181)	1:1043:A:ARG:C	1:1044:A:LEU:N	1:1044:A:LEU:CA	1:1044:A:LEU:C	14	8.46
(1,173)	1:1039:A:ILE:C	1:1040:A:ASP:N	1:1040:A:ASP:CA	1:1040:A:ASP:C	20	8.46
(1,93)	1:986:A:MET:C	1:987:A:ALA:N	1:987:A:ALA:CA	1:987:A:ALA:C	22	8.46
(1,136)	1:1018:A:LYS:N	1:1018:A:LYS:CA	1:1018:A:LYS:C	1:1019:A:LYS:N	10	8.45
(1,171)	1:1035:A:LEU:C	1:1036:A:LEU:N	1:1036:A:LEU:CA	1:1036:A:LEU:C	24	8.42
(1,139)	1:1019:A:LYS:C	1:1020:A:GLN:N	1:1020:A:GLN:CA	1:1020:A:GLN:C	25	8.42
(1,133)	1:1015:A:GLN:C	1:1016:A:GLU:N	1:1016:A:GLU:CA	1:1016:A:GLU:C	3	8.42
(1,85)	1:982:A:ARG:C	1:983:A:GLU:N	1:983:A:GLU:CA	1:983:A:GLU:C	25	8.42

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,80)	1:980:A:THR:N	1:980:A:THR:CA	1:980:A:THR:C	1:981:A:HIS:N	22	8.42
(1,74)	1:973:A:LEU:N	1:973:A:LEU:CA	1:973:A:LEU:C	1:974:A:PRO:N	17	8.4
(1,139)	1:1019:A:LYS:C	1:1020:A:GLN:N	1:1020:A:GLN:CA	1:1020:A:GLN:C	14	8.39
(1,46)	1:955:A:VAL:N	1:955:A:VAL:CA	1:955:A:VAL:C	1:956:A:LYS:N	1	8.39
(1,136)	1:1018:A:LYS:N	1:1018:A:LYS:CA	1:1018:A:LYS:C	1:1019:A:LYS:N	6	8.38
(1,134)	1:1016:A:GLU:N	1:1016:A:GLU:CA	1:1016:A:GLU:C	1:1017:A:TYR:N	22	8.38
(1,72)	1:972:A:SER:N	1:972:A:SER:CA	1:972:A:SER:C	1:973:A:LEU:N	1	8.37
(1,5)	1:925:A:VAL:C	1:926:A:TYR:N	1:926:A:TYR:CA	1:926:A:TYR:C	8	8.37
(1,46)	1:955:A:VAL:N	1:955:A:VAL:CA	1:955:A:VAL:C	1:956:A:LYS:N	13	8.36
(1,32)	1:943:A:ILE:N	1:943:A:ILE:CA	1:943:A:ILE:C	1:944:A:GLN:N	11	8.36
(1,46)	1:955:A:VAL:N	1:955:A:VAL:CA	1:955:A:VAL:C	1:956:A:LYS:N	23	8.35
(1,181)	1:1043:A:ARG:C	1:1044:A:LEU:N	1:1044:A:LEU:CA	1:1044:A:LEU:C	9	8.34
(1,139)	1:1019:A:LYS:C	1:1020:A:GLN:N	1:1020:A:GLN:CA	1:1020:A:GLN:C	6	8.33
(1,118)	1:1003:A:LYS:N	1:1003:A:LYS:CA	1:1003:A:LYS:C	1:1004:A:LEU:N	21	8.33
(1,170)	1:1035:A:LEU:N	1:1035:A:LEU:CA	1:1035:A:LEU:C	1:1036:A:LEU:N	9	8.32
(1,134)	1:1016:A:GLU:N	1:1016:A:GLU:CA	1:1016:A:GLU:C	1:1017:A:TYR:N	17	8.32
(1,134)	1:1016:A:GLU:N	1:1016:A:GLU:CA	1:1016:A:GLU:C	1:1017:A:TYR:N	20	8.3
(1,46)	1:955:A:VAL:N	1:955:A:VAL:CA	1:955:A:VAL:C	1:956:A:LYS:N	12	8.3
(1,178)	1:1042:A:ALA:N	1:1042:A:ALA:CA	1:1042:A:ALA:C	1:1043:A:ARG:N	1	8.28
(1,172)	1:1036:A:LEU:N	1:1036:A:LEU:CA	1:1036:A:LEU:C	1:1037:A:ASP:N	2	8.27
(1,111)	1:996:A:ALA:C	1:997:A:GLU:N	1:997:A:GLU:CA	1:997:A:GLU:C	2	8.27
(1,85)	1:982:A:ARG:C	1:983:A:GLU:N	1:983:A:GLU:CA	1:983:A:GLU:C	21	8.26
(1,4)	1:925:A:VAL:N	1:925:A:VAL:CA	1:925:A:VAL:C	1:926:A:TYR:N	13	8.25
(1,92)	1:986:A:MET:N	1:986:A:MET:CA	1:986:A:MET:C	1:987:A:ALA:N	6	8.24
(1,81)	1:980:A:THR:C	1:981:A:HIS:N	1:981:A:HIS:CA	1:981:A:HIS:C	12	8.24
(1,37)	1:948:A:PRO:C	1:949:A:GLU:N	1:949:A:GLU:CA	1:949:A:GLU:C	18	8.24
(1,29)	1:941:A:SER:C	1:942:A:LYS:N	1:942:A:LYS:CA	1:942:A:LYS:C	1	8.24
(1,58)	1:961:A:ALA:N	1:961:A:ALA:CA	1:961:A:ALA:C	1:962:A:LEU:N	21	8.22
(1,136)	1:1018:A:LYS:N	1:1018:A:LYS:CA	1:1018:A:LYS:C	1:1019:A:LYS:N	2	8.21
(1,161)	1:1030:A:VAL:C	1:1031:A:ASP:N	1:1031:A:ASP:CA	1:1031:A:ASP:C	10	8.2
(1,176)	1:1041:A:GLN:N	1:1041:A:GLN:CA	1:1041:A:GLN:C	1:1042:A:ALA:N	20	8.19
(1,120)	1:1004:A:LEU:N	1:1004:A:LEU:CA	1:1004:A:LEU:C	1:1005:A:ALA:N	14	8.19
(1,164)	1:1032:A:ALA:N	1:1032:A:ALA:CA	1:1032:A:ALA:C	1:1033:A:LYS:N	5	8.18
(1,177)	1:1041:A:GLN:C	1:1042:A:ALA:N	1:1042:A:ALA:CA	1:1042:A:ALA:C	8	8.17
(1,4)	1:925:A:VAL:N	1:925:A:VAL:CA	1:925:A:VAL:C	1:926:A:TYR:N	7	8.17
(1,125)	1:1006:A:GLN:C	1:1007:A:GLN:N	1:1007:A:GLN:CA	1:1007:A:GLN:C	16	8.16
(1,93)	1:986:A:MET:C	1:987:A:ALA:N	1:987:A:ALA:CA	1:987:A:ALA:C	18	8.16
(1,67)	1:968:A:THR:C	1:969:A:VAL:N	1:969:A:VAL:CA	1:969:A:VAL:C	20	8.15
(1,138)	1:1019:A:LYS:N	1:1019:A:LYS:CA	1:1019:A:LYS:C	1:1020:A:GLN:N	24	8.14
(1,98)	1:989:A:LYS:N	1:989:A:LYS:CA	1:989:A:LYS:C	1:990:A:LEU:N	22	8.14
(1,181)	1:1043:A:ARG:C	1:1044:A:LEU:N	1:1044:A:LEU:CA	1:1044:A:LEU:C	3	8.13
(1,158)	1:1029:A:ALA:N	1:1029:A:ALA:CA	1:1029:A:ALA:C	1:1030:A:VAL:N	11	8.13
(1,123)	1:1005:A:ALA:C	1:1006:A:GLN:N	1:1006:A:GLN:CA	1:1006:A:GLN:C	22	8.13
(1,82)	1:981:A:HIS:N	1:981:A:HIS:CA	1:981:A:HIS:C	1:982:A:ARG:N	6	8.13
(1,82)	1:981:A:HIS:N	1:981:A:HIS:CA	1:981:A:HIS:C	1:982:A:ARG:N	12	8.12
(1,37)	1:948:A:PRO:C	1:949:A:GLU:N	1:949:A:GLU:CA	1:949:A:GLU:C	12	8.12
(1,44)	1:954:A:MET:N	1:954:A:MET:CA	1:954:A:MET:C	1:955:A:VAL:N	23	8.11
(1,113)	1:1000:A:ASN:C	1:1001:A:LYS:N	1:1001:A:LYS:CA	1:1001:A:LYS:C	3	8.1
(1,4)	1:925:A:VAL:N	1:925:A:VAL:CA	1:925:A:VAL:C	1:926:A:TYR:N	10	8.1
(1,178)	1:1042:A:ALA:N	1:1042:A:ALA:CA	1:1042:A:ALA:C	1:1043:A:ARG:N	11	8.09
(1,61)	1:965:A:LEU:C	1:966:A:LEU:N	1:966:A:LEU:CA	1:966:A:LEU:C	15	8.09

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,46)	1:955:A:VAL:N	1:955:A:VAL:CA	1:955:A:VAL:C	1:956:A:LYS:N	10	8.09
(1,34)	1:944:A:GLN:N	1:944:A:GLN:CA	1:944:A:GLN:C	1:945:A:PRO:N	22	8.09
(1,178)	1:1042:A:ALA:N	1:1042:A:ALA:CA	1:1042:A:ALA:C	1:1043:A:ARG:N	8	8.08
(1,5)	1:925:A:VAL:C	1:926:A:TYR:N	1:926:A:TYR:CA	1:926:A:TYR:C	7	8.08
(1,74)	1:973:A:LEU:N	1:973:A:LEU:CA	1:973:A:LEU:C	1:974:A:PRO:N	9	8.07
(1,37)	1:948:A:PRO:C	1:949:A:GLU:N	1:949:A:GLU:CA	1:949:A:GLU:C	5	8.07
(1,5)	1:925:A:VAL:C	1:926:A:TYR:N	1:926:A:TYR:CA	1:926:A:TYR:C	1	8.07
(1,134)	1:1016:A:GLU:N	1:1016:A:GLU:CA	1:1016:A:GLU:C	1:1017:A:TYR:N	16	8.06
(1,37)	1:948:A:PRO:C	1:949:A:GLU:N	1:949:A:GLU:CA	1:949:A:GLU:C	10	8.05
(1,5)	1:925:A:VAL:C	1:926:A:TYR:N	1:926:A:TYR:CA	1:926:A:TYR:C	22	8.05
(1,58)	1:961:A:ALA:N	1:961:A:ALA:CA	1:961:A:ALA:C	1:962:A:LEU:N	8	8.04
(1,46)	1:955:A:VAL:N	1:955:A:VAL:CA	1:955:A:VAL:C	1:956:A:LYS:N	25	8.03
(1,164)	1:1032:A:ALA:N	1:1032:A:ALA:CA	1:1032:A:ALA:C	1:1033:A:LYS:N	8	8.02
(1,162)	1:1031:A:ASP:N	1:1031:A:ASP:CA	1:1031:A:ASP:C	1:1032:A:ALA:N	10	8.02
(1,27)	1:940:A:SER:C	1:941:A:SER:N	1:941:A:SER:CA	1:941:A:SER:C	8	8.02
(1,171)	1:1035:A:LEU:C	1:1036:A:LEU:N	1:1036:A:LEU:CA	1:1036:A:LEU:C	17	8.01
(1,84)	1:982:A:ARG:N	1:982:A:ARG:CA	1:982:A:ARG:C	1:983:A:GLU:N	13	8.01
(1,72)	1:972:A:SER:N	1:972:A:SER:CA	1:972:A:SER:C	1:973:A:LEU:N	20	8.01
(1,33)	1:943:A:ILE:C	1:944:A:GLN:N	1:944:A:GLN:CA	1:944:A:GLN:C	6	8.01
(1,5)	1:925:A:VAL:C	1:926:A:TYR:N	1:926:A:TYR:CA	1:926:A:TYR:C	10	8.01
(1,139)	1:1019:A:LYS:C	1:1020:A:GLN:N	1:1020:A:GLN:CA	1:1020:A:GLN:C	23	7.99
(1,178)	1:1042:A:ALA:N	1:1042:A:ALA:CA	1:1042:A:ALA:C	1:1043:A:ARG:N	6	7.98
(1,177)	1:1041:A:GLN:C	1:1042:A:ALA:N	1:1042:A:ALA:CA	1:1042:A:ALA:C	20	7.98
(1,113)	1:1000:A:ASN:C	1:1001:A:LYS:N	1:1001:A:LYS:CA	1:1001:A:LYS:C	7	7.98
(1,93)	1:986:A:MET:C	1:987:A:ALA:N	1:987:A:ALA:CA	1:987:A:ALA:C	12	7.98
(1,158)	1:1029:A:ALA:N	1:1029:A:ALA:CA	1:1029:A:ALA:C	1:1030:A:VAL:N	20	7.97
(1,157)	1:1028:A:LEU:C	1:1029:A:ALA:N	1:1029:A:ALA:CA	1:1029:A:ALA:C	16	7.97
(1,113)	1:1000:A:ASN:C	1:1001:A:LYS:N	1:1001:A:LYS:CA	1:1001:A:LYS:C	19	7.97
(1,177)	1:1041:A:GLN:C	1:1042:A:ALA:N	1:1042:A:ALA:CA	1:1042:A:ALA:C	12	7.96
(1,89)	1:984:A:ILE:C	1:985:A:GLU:N	1:985:A:GLU:CA	1:985:A:GLU:C	21	7.96
(1,178)	1:1042:A:ALA:N	1:1042:A:ALA:CA	1:1042:A:ALA:C	1:1043:A:ARG:N	23	7.95
(1,133)	1:1015:A:GLN:C	1:1016:A:GLU:N	1:1016:A:GLU:CA	1:1016:A:GLU:C	18	7.95
(1,38)	1:949:A:GLU:N	1:949:A:GLU:CA	1:949:A:GLU:C	1:950:A:GLU:N	20	7.94
(1,133)	1:1015:A:GLN:C	1:1016:A:GLU:N	1:1016:A:GLU:CA	1:1016:A:GLU:C	16	7.93
(1,164)	1:1032:A:ALA:N	1:1032:A:ALA:CA	1:1032:A:ALA:C	1:1033:A:LYS:N	21	7.92
(1,102)	1:991:A:LEU:N	1:991:A:LEU:CA	1:991:A:LEU:C	1:992:A:ASN:N	4	7.92
(1,32)	1:943:A:ILE:N	1:943:A:ILE:CA	1:943:A:ILE:C	1:944:A:GLN:N	25	7.92
(1,133)	1:1015:A:GLN:C	1:1016:A:GLU:N	1:1016:A:GLU:CA	1:1016:A:GLU:C	1	7.91
(1,139)	1:1019:A:LYS:C	1:1020:A:GLN:N	1:1020:A:GLN:CA	1:1020:A:GLN:C	13	7.9
(1,138)	1:1019:A:LYS:N	1:1019:A:LYS:CA	1:1019:A:LYS:C	1:1020:A:GLN:N	23	7.9
(1,181)	1:1043:A:ARG:C	1:1044:A:LEU:N	1:1044:A:LEU:CA	1:1044:A:LEU:C	17	7.89
(1,171)	1:1035:A:LEU:C	1:1036:A:LEU:N	1:1036:A:LEU:CA	1:1036:A:LEU:C	19	7.89
(1,72)	1:972:A:SER:N	1:972:A:SER:CA	1:972:A:SER:C	1:973:A:LEU:N	12	7.89
(1,38)	1:949:A:GLU:N	1:949:A:GLU:CA	1:949:A:GLU:C	1:950:A:GLU:N	8	7.89
(1,127)	1:1012:A:SER:C	1:1013:A:LEU:N	1:1013:A:LEU:CA	1:1013:A:LEU:C	23	7.87
(1,165)	1:1032:A:ALA:C	1:1033:A:LYS:N	1:1033:A:LYS:CA	1:1033:A:LYS:C	16	7.86
(1,103)	1:991:A:LEU:C	1:992:A:ASN:N	1:992:A:ASN:CA	1:992:A:ASN:C	22	7.86
(1,82)	1:981:A:HIS:N	1:981:A:HIS:CA	1:981:A:HIS:C	1:982:A:ARG:N	3	7.86
(1,126)	1:1007:A:GLN:N	1:1007:A:GLN:CA	1:1007:A:GLN:C	1:1008:A:TYR:N	24	7.85
(1,46)	1:955:A:VAL:N	1:955:A:VAL:CA	1:955:A:VAL:C	1:956:A:LYS:N	14	7.85
(1,32)	1:943:A:ILE:N	1:943:A:ILE:CA	1:943:A:ILE:C	1:944:A:GLN:N	10	7.85

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,52)	1:958:A:VAL:N	1:958:A:VAL:CA	1:958:A:VAL:C	1:959:A:GLY:N	11	7.84
(1,4)	1:925:A:VAL:N	1:925:A:VAL:CA	1:925:A:VAL:C	1:926:A:TYR:N	20	7.84
(1,74)	1:973:A:LEU:N	1:973:A:LEU:CA	1:973:A:LEU:C	1:974:A:PRO:N	8	7.83
(1,109)	1:995:A:LEU:C	1:996:A:ALA:N	1:996:A:ALA:CA	1:996:A:ALA:C	17	7.82
(1,32)	1:943:A:ILE:N	1:943:A:ILE:CA	1:943:A:ILE:C	1:944:A:GLN:N	14	7.82
(1,102)	1:991:A:LEU:N	1:991:A:LEU:CA	1:991:A:LEU:C	1:992:A:ASN:N	11	7.81
(1,175)	1:1040:A:ASP:C	1:1041:A:GLN:N	1:1041:A:GLN:CA	1:1041:A:GLN:C	10	7.79
(1,162)	1:1031:A:ASP:N	1:1031:A:ASP:CA	1:1031:A:ASP:C	1:1032:A:ALA:N	7	7.79
(1,154)	1:1027:A:ALA:N	1:1027:A:ALA:CA	1:1027:A:ALA:C	1:1028:A:LEU:N	15	7.78
(1,74)	1:973:A:LEU:N	1:973:A:LEU:CA	1:973:A:LEU:C	1:974:A:PRO:N	3	7.78
(1,93)	1:986:A:MET:C	1:987:A:ALA:N	1:987:A:ALA:CA	1:987:A:ALA:C	15	7.77
(1,82)	1:981:A:HIS:N	1:981:A:HIS:CA	1:981:A:HIS:C	1:982:A:ARG:N	23	7.77
(1,49)	1:956:A:LYS:C	1:957:A:GLU:N	1:957:A:GLU:CA	1:957:A:GLU:C	16	7.77
(1,39)	1:951:A:TYR:C	1:952:A:VAL:N	1:952:A:VAL:CA	1:952:A:VAL:C	13	7.76
(1,110)	1:996:A:ALA:N	1:996:A:ALA:CA	1:996:A:ALA:C	1:997:A:GLU:N	3	7.75
(1,36)	1:948:A:PRO:N	1:948:A:PRO:CA	1:948:A:PRO:C	1:949:A:GLU:N	14	7.75
(1,164)	1:1032:A:ALA:N	1:1032:A:ALA:CA	1:1032:A:ALA:C	1:1033:A:LYS:N	13	7.74
(1,130)	1:1014:A:GLN:N	1:1014:A:GLN:CA	1:1014:A:GLN:C	1:1015:A:GLN:N	14	7.74
(1,124)	1:1006:A:GLN:N	1:1006:A:GLN:CA	1:1006:A:GLN:C	1:1007:A:GLN:N	11	7.74
(1,5)	1:925:A:VAL:C	1:926:A:TYR:N	1:926:A:TYR:CA	1:926:A:TYR:C	6	7.74
(1,93)	1:986:A:MET:C	1:987:A:ALA:N	1:987:A:ALA:CA	1:987:A:ALA:C	10	7.72
(1,123)	1:1005:A:ALA:C	1:1006:A:GLN:N	1:1006:A:GLN:CA	1:1006:A:GLN:C	21	7.71
(1,46)	1:955:A:VAL:N	1:955:A:VAL:CA	1:955:A:VAL:C	1:956:A:LYS:N	9	7.71
(1,27)	1:940:A:SER:C	1:941:A:SER:N	1:941:A:SER:CA	1:941:A:SER:C	4	7.71
(1,27)	1:940:A:SER:C	1:941:A:SER:N	1:941:A:SER:CA	1:941:A:SER:C	6	7.71
(1,93)	1:986:A:MET:C	1:987:A:ALA:N	1:987:A:ALA:CA	1:987:A:ALA:C	9	7.7
(1,4)	1:925:A:VAL:N	1:925:A:VAL:CA	1:925:A:VAL:C	1:926:A:TYR:N	8	7.69
(1,4)	1:925:A:VAL:N	1:925:A:VAL:CA	1:925:A:VAL:C	1:926:A:TYR:N	22	7.66
(1,176)	1:1041:A:GLN:N	1:1041:A:GLN:CA	1:1041:A:GLN:C	1:1042:A:ALA:N	1	7.65
(1,168)	1:1034:A:ASN:N	1:1034:A:ASN:CA	1:1034:A:ASN:C	1:1035:A:LEU:N	22	7.65
(1,164)	1:1032:A:ALA:N	1:1032:A:ALA:CA	1:1032:A:ALA:C	1:1033:A:LYS:N	12	7.65
(1,120)	1:1004:A:LEU:N	1:1004:A:LEU:CA	1:1004:A:LEU:C	1:1005:A:ALA:N	4	7.65
(1,93)	1:986:A:MET:C	1:987:A:ALA:N	1:987:A:ALA:CA	1:987:A:ALA:C	11	7.65
(1,142)	1:1021:A:MET:N	1:1021:A:MET:CA	1:1021:A:MET:C	1:1022:A:LEU:N	23	7.63
(1,111)	1:996:A:ALA:C	1:997:A:GLU:N	1:997:A:GLU:CA	1:997:A:GLU:C	13	7.63
(1,46)	1:955:A:VAL:N	1:955:A:VAL:CA	1:955:A:VAL:C	1:956:A:LYS:N	11	7.63
(1,177)	1:1041:A:GLN:C	1:1042:A:ALA:N	1:1042:A:ALA:CA	1:1042:A:ALA:C	19	7.61
(1,147)	1:1023:A:THR:C	1:1024:A:ALA:N	1:1024:A:ALA:CA	1:1024:A:ALA:C	18	7.61
(1,113)	1:1000:A:ASN:C	1:1001:A:LYS:N	1:1001:A:LYS:CA	1:1001:A:LYS:C	14	7.61
(1,37)	1:948:A:PRO:C	1:949:A:GLU:N	1:949:A:GLU:CA	1:949:A:GLU:C	16	7.61
(1,170)	1:1035:A:LEU:N	1:1035:A:LEU:CA	1:1035:A:LEU:C	1:1036:A:LEU:N	7	7.6
(1,163)	1:1031:A:ASP:C	1:1032:A:ALA:N	1:1032:A:ALA:CA	1:1032:A:ALA:C	3	7.6
(1,37)	1:948:A:PRO:C	1:949:A:GLU:N	1:949:A:GLU:CA	1:949:A:GLU:C	20	7.6
(1,162)	1:1031:A:ASP:N	1:1031:A:ASP:CA	1:1031:A:ASP:C	1:1032:A:ALA:N	16	7.58
(1,181)	1:1043:A:ARG:C	1:1044:A:LEU:N	1:1044:A:LEU:CA	1:1044:A:LEU:C	16	7.57
(1,19)	1:934:A:LYS:C	1:935:A:ALA:N	1:935:A:ALA:CA	1:935:A:ALA:C	1	7.57
(1,131)	1:1014:A:GLN:C	1:1015:A:GLN:N	1:1015:A:GLN:CA	1:1015:A:GLN:C	8	7.56
(1,112)	1:997:A:GLU:N	1:997:A:GLU:CA	1:997:A:GLU:C	1:998:A:LEU:N	19	7.55
(1,138)	1:1019:A:LYS:N	1:1019:A:LYS:CA	1:1019:A:LYS:C	1:1020:A:GLN:N	11	7.54
(1,111)	1:996:A:ALA:C	1:997:A:GLU:N	1:997:A:GLU:CA	1:997:A:GLU:C	12	7.52
(1,4)	1:925:A:VAL:N	1:925:A:VAL:CA	1:925:A:VAL:C	1:926:A:TYR:N	6	7.52

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,139)	1:1019:A:LYS:C	1:1020:A:GLN:N	1:1020:A:GLN:CA	1:1020:A:GLN:C	21	7.51
(1,74)	1:973:A:LEU:N	1:973:A:LEU:CA	1:973:A:LEU:C	1:974:A:PRO:N	5	7.5
(1,125)	1:1006:A:GLN:C	1:1007:A:GLN:N	1:1007:A:GLN:CA	1:1007:A:GLN:C	23	7.49
(1,85)	1:982:A:ARG:C	1:983:A:GLU:N	1:983:A:GLU:CA	1:983:A:GLU:C	8	7.49
(1,82)	1:981:A:HIS:N	1:981:A:HIS:CA	1:981:A:HIS:C	1:982:A:ARG:N	4	7.49
(1,37)	1:948:A:PRO:C	1:949:A:GLU:N	1:949:A:GLU:CA	1:949:A:GLU:C	15	7.49
(1,32)	1:943:A:ILE:N	1:943:A:ILE:CA	1:943:A:ILE:C	1:944:A:GLN:N	3	7.49
(1,33)	1:943:A:ILE:C	1:944:A:GLN:N	1:944:A:GLN:CA	1:944:A:GLN:C	22	7.48
(1,171)	1:1035:A:LEU:C	1:1036:A:LEU:N	1:1036:A:LEU:CA	1:1036:A:LEU:C	1	7.47
(1,162)	1:1031:A:ASP:N	1:1031:A:ASP:CA	1:1031:A:ASP:C	1:1032:A:ALA:N	22	7.47
(1,164)	1:1032:A:ALA:N	1:1032:A:ALA:CA	1:1032:A:ALA:C	1:1033:A:LYS:N	4	7.46
(1,67)	1:968:A:THR:C	1:969:A:VAL:N	1:969:A:VAL:CA	1:969:A:VAL:C	10	7.46
(1,181)	1:1043:A:ARG:C	1:1044:A:LEU:N	1:1044:A:LEU:CA	1:1044:A:LEU:C	10	7.44
(1,67)	1:968:A:THR:C	1:969:A:VAL:N	1:969:A:VAL:CA	1:969:A:VAL:C	13	7.44
(1,20)	1:935:A:ALA:N	1:935:A:ALA:CA	1:935:A:ALA:C	1:936:A:VAL:N	19	7.44
(1,84)	1:982:A:ARG:N	1:982:A:ARG:CA	1:982:A:ARG:C	1:983:A:GLU:N	1	7.43
(1,80)	1:980:A:THR:N	1:980:A:THR:CA	1:980:A:THR:C	1:981:A:HIS:N	17	7.43
(1,178)	1:1042:A:ALA:N	1:1042:A:ALA:CA	1:1042:A:ALA:C	1:1043:A:ARG:N	24	7.42
(1,70)	1:970:A:ASP:N	1:970:A:ASP:CA	1:970:A:ASP:C	1:971:A:GLU:N	5	7.42
(1,40)	1:952:A:VAL:N	1:952:A:VAL:CA	1:952:A:VAL:C	1:953:A:PRO:N	14	7.42
(1,32)	1:943:A:ILE:N	1:943:A:ILE:CA	1:943:A:ILE:C	1:944:A:GLN:N	18	7.42
(1,5)	1:925:A:VAL:C	1:926:A:TYR:N	1:926:A:TYR:CA	1:926:A:TYR:C	18	7.42
(1,177)	1:1041:A:GLN:C	1:1042:A:ALA:N	1:1042:A:ALA:CA	1:1042:A:ALA:C	13	7.41
(1,130)	1:1014:A:GLN:N	1:1014:A:GLN:CA	1:1014:A:GLN:C	1:1015:A:GLN:N	23	7.41
(1,122)	1:1005:A:ALA:N	1:1005:A:ALA:CA	1:1005:A:ALA:C	1:1006:A:GLN:N	3	7.41
(1,116)	1:1002:A:MET:N	1:1002:A:MET:CA	1:1002:A:MET:C	1:1003:A:LYS:N	5	7.41
(1,29)	1:941:A:SER:C	1:942:A:LYS:N	1:942:A:LYS:CA	1:942:A:LYS:C	21	7.41
(1,20)	1:935:A:ALA:N	1:935:A:ALA:CA	1:935:A:ALA:C	1:936:A:VAL:N	6	7.4
(1,5)	1:925:A:VAL:C	1:926:A:TYR:N	1:926:A:TYR:CA	1:926:A:TYR:C	25	7.4
(1,89)	1:984:A:ILE:C	1:985:A:GLU:N	1:985:A:GLU:CA	1:985:A:GLU:C	25	7.39
(1,33)	1:943:A:ILE:C	1:944:A:GLN:N	1:944:A:GLN:CA	1:944:A:GLN:C	8	7.39
(1,27)	1:940:A:SER:C	1:941:A:SER:N	1:941:A:SER:CA	1:941:A:SER:C	16	7.39
(1,110)	1:996:A:ALA:N	1:996:A:ALA:CA	1:996:A:ALA:C	1:997:A:GLU:N	14	7.38
(1,98)	1:989:A:LYS:N	1:989:A:LYS:CA	1:989:A:LYS:C	1:990:A:LEU:N	7	7.38
(1,70)	1:970:A:ASP:N	1:970:A:ASP:CA	1:970:A:ASP:C	1:971:A:GLU:N	7	7.38
(1,46)	1:955:A:VAL:N	1:955:A:VAL:CA	1:955:A:VAL:C	1:956:A:LYS:N	3	7.38
(1,182)	1:1044:A:LEU:N	1:1044:A:LEU:CA	1:1044:A:LEU:C	1:1045:A:LYS:N	11	7.37
(1,157)	1:1028:A:LEU:C	1:1029:A:ALA:N	1:1029:A:ALA:CA	1:1029:A:ALA:C	17	7.37
(1,113)	1:1000:A:ASN:C	1:1001:A:LYS:N	1:1001:A:LYS:CA	1:1001:A:LYS:C	5	7.37
(1,32)	1:943:A:ILE:N	1:943:A:ILE:CA	1:943:A:ILE:C	1:944:A:GLN:N	12	7.37
(1,181)	1:1043:A:ARG:C	1:1044:A:LEU:N	1:1044:A:LEU:CA	1:1044:A:LEU:C	11	7.36
(1,46)	1:955:A:VAL:N	1:955:A:VAL:CA	1:955:A:VAL:C	1:956:A:LYS:N	7	7.36
(1,74)	1:973:A:LEU:N	1:973:A:LEU:CA	1:973:A:LEU:C	1:974:A:PRO:N	15	7.35
(1,52)	1:958:A:VAL:N	1:958:A:VAL:CA	1:958:A:VAL:C	1:959:A:GLY:N	23	7.35
(1,59)	1:964:A:THR:C	1:965:A:LEU:N	1:965:A:LEU:CA	1:965:A:LEU:C	17	7.34
(1,178)	1:1042:A:ALA:N	1:1042:A:ALA:CA	1:1042:A:ALA:C	1:1043:A:ARG:N	19	7.33
(1,173)	1:1039:A:ILE:C	1:1040:A:ASP:N	1:1040:A:ASP:CA	1:1040:A:ASP:C	6	7.33
(1,127)	1:1012:A:SER:C	1:1013:A:LEU:N	1:1013:A:LEU:CA	1:1013:A:LEU:C	11	7.33
(1,80)	1:980:A:THR:N	1:980:A:THR:CA	1:980:A:THR:C	1:981:A:HIS:N	12	7.33
(1,44)	1:954:A:MET:N	1:954:A:MET:CA	1:954:A:MET:C	1:955:A:VAL:N	5	7.33
(1,178)	1:1042:A:ALA:N	1:1042:A:ALA:CA	1:1042:A:ALA:C	1:1043:A:ARG:N	13	7.32

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,177)	1:1041:A:GLN:C	1:1042:A:ALA:N	1:1042:A:ALA:CA	1:1042:A:ALA:C	11	7.31
(1,67)	1:968:A:THR:C	1:969:A:VAL:N	1:969:A:VAL:CA	1:969:A:VAL:C	9	7.31
(1,93)	1:986:A:MET:C	1:987:A:ALA:N	1:987:A:ALA:CA	1:987:A:ALA:C	13	7.3
(1,70)	1:970:A:ASP:N	1:970:A:ASP:CA	1:970:A:ASP:C	1:971:A:GLU:N	6	7.29
(1,4)	1:925:A:VAL:N	1:925:A:VAL:CA	1:925:A:VAL:C	1:926:A:TYR:N	18	7.28
(1,93)	1:986:A:MET:C	1:987:A:ALA:N	1:987:A:ALA:CA	1:987:A:ALA:C	8	7.27
(1,134)	1:1016:A:GLU:N	1:1016:A:GLU:CA	1:1016:A:GLU:C	1:1017:A:TYR:N	15	7.26
(1,112)	1:997:A:GLU:N	1:997:A:GLU:CA	1:997:A:GLU:C	1:998:A:LEU:N	8	7.26
(1,20)	1:935:A:ALA:N	1:935:A:ALA:CA	1:935:A:ALA:C	1:936:A:VAL:N	3	7.26
(1,181)	1:1043:A:ARG:C	1:1044:A:LEU:N	1:1044:A:LEU:CA	1:1044:A:LEU:C	5	7.25
(1,111)	1:996:A:ALA:C	1:997:A:GLU:N	1:997:A:GLU:CA	1:997:A:GLU:C	10	7.25
(1,93)	1:986:A:MET:C	1:987:A:ALA:N	1:987:A:ALA:CA	1:987:A:ALA:C	2	7.25
(1,162)	1:1031:A:ASP:N	1:1031:A:ASP:CA	1:1031:A:ASP:C	1:1032:A:ALA:N	8	7.24
(1,162)	1:1031:A:ASP:N	1:1031:A:ASP:CA	1:1031:A:ASP:C	1:1032:A:ALA:N	11	7.24
(1,109)	1:995:A:LEU:C	1:996:A:ALA:N	1:996:A:ALA:CA	1:996:A:ALA:C	20	7.24
(1,96)	1:988:A:GLN:N	1:988:A:GLN:CA	1:988:A:GLN:C	1:989:A:LYS:N	4	7.24
(1,109)	1:995:A:LEU:C	1:996:A:ALA:N	1:996:A:ALA:CA	1:996:A:ALA:C	22	7.23
(1,70)	1:970:A:ASP:N	1:970:A:ASP:CA	1:970:A:ASP:C	1:971:A:GLU:N	16	7.23
(1,156)	1:1028:A:LEU:N	1:1028:A:LEU:CA	1:1028:A:LEU:C	1:1029:A:ALA:N	11	7.22
(1,27)	1:940:A:SER:C	1:941:A:SER:N	1:941:A:SER:CA	1:941:A:SER:C	10	7.22
(1,163)	1:1031:A:ASP:C	1:1032:A:ALA:N	1:1032:A:ALA:CA	1:1032:A:ALA:C	17	7.21
(1,112)	1:997:A:GLU:N	1:997:A:GLU:CA	1:997:A:GLU:C	1:998:A:LEU:N	21	7.21
(1,58)	1:961:A:ALA:N	1:961:A:ALA:CA	1:961:A:ALA:C	1:962:A:LEU:N	3	7.21
(1,46)	1:955:A:VAL:N	1:955:A:VAL:CA	1:955:A:VAL:C	1:956:A:LYS:N	21	7.21
(1,31)	1:942:A:LYS:C	1:943:A:ILE:N	1:943:A:ILE:CA	1:943:A:ILE:C	11	7.21
(1,115)	1:1001:A:LYS:C	1:1002:A:MET:N	1:1002:A:MET:CA	1:1002:A:MET:C	24	7.2
(1,19)	1:934:A:LYS:C	1:935:A:ALA:N	1:935:A:ALA:CA	1:935:A:ALA:C	5	7.2
(1,139)	1:1019:A:LYS:C	1:1020:A:GLN:N	1:1020:A:GLN:CA	1:1020:A:GLN:C	8	7.19
(1,93)	1:986:A:MET:C	1:987:A:ALA:N	1:987:A:ALA:CA	1:987:A:ALA:C	1	7.19
(1,46)	1:955:A:VAL:N	1:955:A:VAL:CA	1:955:A:VAL:C	1:956:A:LYS:N	24	7.19
(1,37)	1:948:A:PRO:C	1:949:A:GLU:N	1:949:A:GLU:CA	1:949:A:GLU:C	2	7.19
(1,177)	1:1041:A:GLN:C	1:1042:A:ALA:N	1:1042:A:ALA:CA	1:1042:A:ALA:C	3	7.18
(1,4)	1:925:A:VAL:N	1:925:A:VAL:CA	1:925:A:VAL:C	1:926:A:TYR:N	19	7.17
(1,168)	1:1034:A:ASN:N	1:1034:A:ASN:CA	1:1034:A:ASN:C	1:1035:A:LEU:N	15	7.16
(1,147)	1:1023:A:THR:C	1:1024:A:ALA:N	1:1024:A:ALA:CA	1:1024:A:ALA:C	6	7.16
(1,5)	1:925:A:VAL:C	1:926:A:TYR:N	1:926:A:TYR:CA	1:926:A:TYR:C	17	7.15
(1,175)	1:1040:A:ASP:C	1:1041:A:GLN:N	1:1041:A:GLN:CA	1:1041:A:GLN:C	20	7.14
(1,93)	1:986:A:MET:C	1:987:A:ALA:N	1:987:A:ALA:CA	1:987:A:ALA:C	25	7.14
(1,177)	1:1041:A:GLN:C	1:1042:A:ALA:N	1:1042:A:ALA:CA	1:1042:A:ALA:C	17	7.13
(1,164)	1:1032:A:ALA:N	1:1032:A:ALA:CA	1:1032:A:ALA:C	1:1033:A:LYS:N	23	7.13
(1,34)	1:944:A:GLN:N	1:944:A:GLN:CA	1:944:A:GLN:C	1:945:A:PRO:N	8	7.13
(1,27)	1:940:A:SER:C	1:941:A:SER:N	1:941:A:SER:CA	1:941:A:SER:C	20	7.13
(1,93)	1:986:A:MET:C	1:987:A:ALA:N	1:987:A:ALA:CA	1:987:A:ALA:C	21	7.12
(1,177)	1:1041:A:GLN:C	1:1042:A:ALA:N	1:1042:A:ALA:CA	1:1042:A:ALA:C	6	7.11
(1,29)	1:941:A:SER:C	1:942:A:LYS:N	1:942:A:LYS:CA	1:942:A:LYS:C	22	7.1
(1,176)	1:1041:A:GLN:N	1:1041:A:GLN:CA	1:1041:A:GLN:C	1:1042:A:ALA:N	18	7.09
(1,163)	1:1031:A:ASP:C	1:1032:A:ALA:N	1:1032:A:ALA:CA	1:1032:A:ALA:C	22	7.09
(1,136)	1:1018:A:LYS:N	1:1018:A:LYS:CA	1:1018:A:LYS:C	1:1019:A:LYS:N	14	7.09
(1,83)	1:981:A:HIS:C	1:982:A:ARG:N	1:982:A:ARG:CA	1:982:A:ARG:C	10	7.09
(1,67)	1:968:A:THR:C	1:969:A:VAL:N	1:969:A:VAL:CA	1:969:A:VAL:C	11	7.09
(1,83)	1:981:A:HIS:C	1:982:A:ARG:N	1:982:A:ARG:CA	1:982:A:ARG:C	3	7.08

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,37)	1:948:A:PRO:C	1:949:A:GLU:N	1:949:A:GLU:CA	1:949:A:GLU:C	25	7.07
(1,174)	1:1040:A:ASP:N	1:1040:A:ASP:CA	1:1040:A:ASP:C	1:1041:A:GLN:N	11	7.06
(1,111)	1:996:A:ALA:C	1:997:A:GLU:N	1:997:A:GLU:CA	1:997:A:GLU:C	4	7.05
(1,109)	1:995:A:LEU:C	1:996:A:ALA:N	1:996:A:ALA:CA	1:996:A:ALA:C	15	7.04
(1,67)	1:968:A:THR:C	1:969:A:VAL:N	1:969:A:VAL:CA	1:969:A:VAL:C	17	7.02
(1,54)	1:959:A:GLY:N	1:959:A:GLY:CA	1:959:A:GLY:C	1:960:A:LEU:N	2	7.02
(1,37)	1:948:A:PRO:C	1:949:A:GLU:N	1:949:A:GLU:CA	1:949:A:GLU:C	17	7.02
(1,4)	1:925:A:VAL:N	1:925:A:VAL:CA	1:925:A:VAL:C	1:926:A:TYR:N	24	7.02
(1,177)	1:1041:A:GLN:C	1:1042:A:ALA:N	1:1042:A:ALA:CA	1:1042:A:ALA:C	14	7.01
(1,64)	1:967:A:ALA:N	1:967:A:ALA:CA	1:967:A:ALA:C	1:968:A:THR:N	22	7.01
(1,8)	1:928:A:ASN:N	1:928:A:ASN:CA	1:928:A:ASN:C	1:929:A:VAL:N	22	7.01
(1,54)	1:959:A:GLY:N	1:959:A:GLY:CA	1:959:A:GLY:C	1:960:A:LEU:N	14	7.0
(1,178)	1:1042:A:ALA:N	1:1042:A:ALA:CA	1:1042:A:ALA:C	1:1043:A:ARG:N	20	6.99
(1,177)	1:1041:A:GLN:C	1:1042:A:ALA:N	1:1042:A:ALA:CA	1:1042:A:ALA:C	9	6.98
(1,135)	1:1017:A:TYR:C	1:1018:A:LYS:N	1:1018:A:LYS:CA	1:1018:A:LYS:C	16	6.98
(1,147)	1:1023:A:THR:C	1:1024:A:ALA:N	1:1024:A:ALA:CA	1:1024:A:ALA:C	5	6.97
(1,112)	1:997:A:GLU:N	1:997:A:GLU:CA	1:997:A:GLU:C	1:998:A:LEU:N	6	6.97
(1,31)	1:942:A:LYS:C	1:943:A:ILE:N	1:943:A:ILE:CA	1:943:A:ILE:C	21	6.97
(1,74)	1:973:A:LEU:N	1:973:A:LEU:CA	1:973:A:LEU:C	1:974:A:PRO:N	20	6.96
(1,181)	1:1043:A:ARG:C	1:1044:A:LEU:N	1:1044:A:LEU:CA	1:1044:A:LEU:C	1	6.95
(1,129)	1:1013:A:LEU:C	1:1014:A:GLN:N	1:1014:A:GLN:CA	1:1014:A:GLN:C	15	6.95
(1,84)	1:982:A:ARG:N	1:982:A:ARG:CA	1:982:A:ARG:C	1:983:A:GLU:N	10	6.95
(1,70)	1:970:A:ASP:N	1:970:A:ASP:CA	1:970:A:ASP:C	1:971:A:GLU:N	18	6.94
(1,68)	1:969:A:VAL:N	1:969:A:VAL:CA	1:969:A:VAL:C	1:970:A:ASP:N	10	6.94
(1,37)	1:948:A:PRO:C	1:949:A:GLU:N	1:949:A:GLU:CA	1:949:A:GLU:C	23	6.94
(1,115)	1:1001:A:LYS:C	1:1002:A:MET:N	1:1002:A:MET:CA	1:1002:A:MET:C	5	6.93
(1,70)	1:970:A:ASP:N	1:970:A:ASP:CA	1:970:A:ASP:C	1:971:A:GLU:N	25	6.93
(1,61)	1:965:A:LEU:C	1:966:A:LEU:N	1:966:A:LEU:CA	1:966:A:LEU:C	4	6.93
(1,173)	1:1039:A:ILE:C	1:1040:A:ASP:N	1:1040:A:ASP:CA	1:1040:A:ASP:C	23	6.92
(1,129)	1:1013:A:LEU:C	1:1014:A:GLN:N	1:1014:A:GLN:CA	1:1014:A:GLN:C	1	6.91
(1,8)	1:928:A:ASN:N	1:928:A:ASN:CA	1:928:A:ASN:C	1:929:A:VAL:N	15	6.91
(1,49)	1:956:A:LYS:C	1:957:A:GLU:N	1:957:A:GLU:CA	1:957:A:GLU:C	11	6.9
(1,20)	1:935:A:ALA:N	1:935:A:ALA:CA	1:935:A:ALA:C	1:936:A:VAL:N	14	6.9
(1,125)	1:1006:A:GLN:C	1:1007:A:GLN:N	1:1007:A:GLN:CA	1:1007:A:GLN:C	24	6.89
(1,107)	1:994:A:ASP:C	1:995:A:LEU:N	1:995:A:LEU:CA	1:995:A:LEU:C	22	6.89
(1,67)	1:968:A:THR:C	1:969:A:VAL:N	1:969:A:VAL:CA	1:969:A:VAL:C	18	6.89
(1,61)	1:965:A:LEU:C	1:966:A:LEU:N	1:966:A:LEU:CA	1:966:A:LEU:C	10	6.89
(1,55)	1:959:A:GLY:C	1:960:A:LEU:N	1:960:A:LEU:CA	1:960:A:LEU:C	19	6.89
(1,157)	1:1028:A:LEU:C	1:1029:A:ALA:N	1:1029:A:ALA:CA	1:1029:A:ALA:C	22	6.88
(1,181)	1:1043:A:ARG:C	1:1044:A:LEU:N	1:1044:A:LEU:CA	1:1044:A:LEU:C	22	6.87
(1,163)	1:1031:A:ASP:C	1:1032:A:ALA:N	1:1032:A:ALA:CA	1:1032:A:ALA:C	16	6.87
(1,74)	1:973:A:LEU:N	1:973:A:LEU:CA	1:973:A:LEU:C	1:974:A:PRO:N	14	6.87
(1,168)	1:1034:A:ASN:N	1:1034:A:ASN:CA	1:1034:A:ASN:C	1:1035:A:LEU:N	20	6.86
(1,118)	1:1003:A:LYS:N	1:1003:A:LYS:CA	1:1003:A:LYS:C	1:1004:A:LEU:N	18	6.86
(1,104)	1:992:A:ASN:N	1:992:A:ASN:CA	1:992:A:ASN:C	1:993:A:SER:N	16	6.86
(1,16)	1:933:A:VAL:N	1:933:A:VAL:CA	1:933:A:VAL:C	1:934:A:LYS:N	16	6.86
(1,123)	1:1005:A:ALA:C	1:1006:A:GLN:N	1:1006:A:GLN:CA	1:1006:A:GLN:C	17	6.85
(1,85)	1:982:A:ARG:C	1:983:A:GLU:N	1:983:A:GLU:CA	1:983:A:GLU:C	23	6.84
(1,46)	1:955:A:VAL:N	1:955:A:VAL:CA	1:955:A:VAL:C	1:956:A:LYS:N	2	6.84
(1,147)	1:1023:A:THR:C	1:1024:A:ALA:N	1:1024:A:ALA:CA	1:1024:A:ALA:C	4	6.82
(1,69)	1:969:A:VAL:C	1:970:A:ASP:N	1:970:A:ASP:CA	1:970:A:ASP:C	24	6.82

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,177)	1:1041:A:GLN:C	1:1042:A:ALA:N	1:1042:A:ALA:CA	1:1042:A:ALA:C	16	6.81
(1,80)	1:980:A:THR:N	1:980:A:THR:CA	1:980:A:THR:C	1:981:A:HIS:N	11	6.81
(1,70)	1:970:A:ASP:N	1:970:A:ASP:CA	1:970:A:ASP:C	1:971:A:GLU:N	1	6.81
(1,31)	1:942:A:LYS:C	1:943:A:ILE:N	1:943:A:ILE:CA	1:943:A:ILE:C	14	6.81
(1,82)	1:981:A:HIS:N	1:981:A:HIS:CA	1:981:A:HIS:C	1:982:A:ARG:N	10	6.8
(1,131)	1:1014:A:GLN:C	1:1015:A:GLN:N	1:1015:A:GLN:CA	1:1015:A:GLN:C	16	6.79
(1,138)	1:1019:A:LYS:N	1:1019:A:LYS:CA	1:1019:A:LYS:C	1:1020:A:GLN:N	10	6.78
(1,64)	1:967:A:ALA:N	1:967:A:ALA:CA	1:967:A:ALA:C	1:968:A:THR:N	20	6.78
(1,20)	1:935:A:ALA:N	1:935:A:ALA:CA	1:935:A:ALA:C	1:936:A:VAL:N	16	6.78
(1,147)	1:1023:A:THR:C	1:1024:A:ALA:N	1:1024:A:ALA:CA	1:1024:A:ALA:C	24	6.76
(1,126)	1:1007:A:GLN:N	1:1007:A:GLN:CA	1:1007:A:GLN:C	1:1008:A:TYR:N	19	6.76
(1,175)	1:1040:A:ASP:C	1:1041:A:GLN:N	1:1041:A:GLN:CA	1:1041:A:GLN:C	6	6.75
(1,173)	1:1039:A:ILE:C	1:1040:A:ASP:N	1:1040:A:ASP:CA	1:1040:A:ASP:C	24	6.74
(1,32)	1:943:A:ILE:N	1:943:A:ILE:CA	1:943:A:ILE:C	1:944:A:GLN:N	2	6.74
(1,12)	1:931:A:GLY:N	1:931:A:GLY:CA	1:931:A:GLY:C	1:932:A:LEU:N	11	6.74
(1,93)	1:986:A:MET:C	1:987:A:ALA:N	1:987:A:ALA:CA	1:987:A:ALA:C	23	6.73
(1,67)	1:968:A:THR:C	1:969:A:VAL:N	1:969:A:VAL:CA	1:969:A:VAL:C	16	6.72
(1,67)	1:968:A:THR:C	1:969:A:VAL:N	1:969:A:VAL:CA	1:969:A:VAL:C	22	6.72
(1,49)	1:956:A:LYS:C	1:957:A:GLU:N	1:957:A:GLU:CA	1:957:A:GLU:C	14	6.72
(1,46)	1:955:A:VAL:N	1:955:A:VAL:CA	1:955:A:VAL:C	1:956:A:LYS:N	8	6.72
(1,33)	1:943:A:ILE:C	1:944:A:GLN:N	1:944:A:GLN:CA	1:944:A:GLN:C	18	6.72
(1,20)	1:935:A:ALA:N	1:935:A:ALA:CA	1:935:A:ALA:C	1:936:A:VAL:N	7	6.72
(1,162)	1:1031:A:ASP:N	1:1031:A:ASP:CA	1:1031:A:ASP:C	1:1032:A:ALA:N	13	6.71
(1,49)	1:956:A:LYS:C	1:957:A:GLU:N	1:957:A:GLU:CA	1:957:A:GLU:C	22	6.71
(1,20)	1:935:A:ALA:N	1:935:A:ALA:CA	1:935:A:ALA:C	1:936:A:VAL:N	5	6.71
(1,19)	1:934:A:LYS:C	1:935:A:ALA:N	1:935:A:ALA:CA	1:935:A:ALA:C	12	6.71
(1,142)	1:1021:A:MET:N	1:1021:A:MET:CA	1:1021:A:MET:C	1:1022:A:LEU:N	25	6.7
(1,35)	1:947:A:PRO:C	1:948:A:PRO:N	1:948:A:PRO:CA	1:948:A:PRO:C	21	6.69
(1,107)	1:994:A:ASP:C	1:995:A:LEU:N	1:995:A:LEU:CA	1:995:A:LEU:C	6	6.68
(1,46)	1:955:A:VAL:N	1:955:A:VAL:CA	1:955:A:VAL:C	1:956:A:LYS:N	5	6.68
(1,124)	1:1006:A:GLN:N	1:1006:A:GLN:CA	1:1006:A:GLN:C	1:1007:A:GLN:N	3	6.66
(1,93)	1:986:A:MET:C	1:987:A:ALA:N	1:987:A:ALA:CA	1:987:A:ALA:C	17	6.66
(1,178)	1:1042:A:ALA:N	1:1042:A:ALA:CA	1:1042:A:ALA:C	1:1043:A:ARG:N	18	6.65
(1,123)	1:1005:A:ALA:C	1:1006:A:GLN:N	1:1006:A:GLN:CA	1:1006:A:GLN:C	6	6.65
(1,107)	1:994:A:ASP:C	1:995:A:LEU:N	1:995:A:LEU:CA	1:995:A:LEU:C	11	6.63
(1,67)	1:968:A:THR:C	1:969:A:VAL:N	1:969:A:VAL:CA	1:969:A:VAL:C	14	6.63
(1,67)	1:968:A:THR:C	1:969:A:VAL:N	1:969:A:VAL:CA	1:969:A:VAL:C	19	6.63
(1,84)	1:982:A:ARG:N	1:982:A:ARG:CA	1:982:A:ARG:C	1:983:A:GLU:N	5	6.62
(1,129)	1:1013:A:LEU:C	1:1014:A:GLN:N	1:1014:A:GLN:CA	1:1014:A:GLN:C	18	6.61
(1,127)	1:1012:A:SER:C	1:1013:A:LEU:N	1:1013:A:LEU:CA	1:1013:A:LEU:C	1	6.61
(1,8)	1:928:A:ASN:N	1:928:A:ASN:CA	1:928:A:ASN:C	1:929:A:VAL:N	24	6.61
(1,147)	1:1023:A:THR:C	1:1024:A:ALA:N	1:1024:A:ALA:CA	1:1024:A:ALA:C	23	6.6
(1,131)	1:1014:A:GLN:C	1:1015:A:GLN:N	1:1015:A:GLN:CA	1:1015:A:GLN:C	17	6.6
(1,85)	1:982:A:ARG:C	1:983:A:GLU:N	1:983:A:GLU:CA	1:983:A:GLU:C	19	6.6
(1,177)	1:1041:A:GLN:C	1:1042:A:ALA:N	1:1042:A:ALA:CA	1:1042:A:ALA:C	5	6.59
(1,20)	1:935:A:ALA:N	1:935:A:ALA:CA	1:935:A:ALA:C	1:936:A:VAL:N	2	6.59
(1,74)	1:973:A:LEU:N	1:973:A:LEU:CA	1:973:A:LEU:C	1:974:A:PRO:N	24	6.57
(1,64)	1:967:A:ALA:N	1:967:A:ALA:CA	1:967:A:ALA:C	1:968:A:THR:N	11	6.57
(1,85)	1:982:A:ARG:C	1:983:A:GLU:N	1:983:A:GLU:CA	1:983:A:GLU:C	18	6.56
(1,67)	1:968:A:THR:C	1:969:A:VAL:N	1:969:A:VAL:CA	1:969:A:VAL:C	3	6.56
(1,32)	1:943:A:ILE:N	1:943:A:ILE:CA	1:943:A:ILE:C	1:944:A:GLN:N	24	6.56

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,27)	1:940:A:SER:C	1:941:A:SER:N	1:941:A:SER:CA	1:941:A:SER:C	25	6.56
(1,6)	1:926:A:TYR:N	1:926:A:TYR:CA	1:926:A:TYR:C	1:927:A:GLU:N	19	6.56
(1,54)	1:959:A:GLY:N	1:959:A:GLY:CA	1:959:A:GLY:C	1:960:A:LEU:N	21	6.55
(1,154)	1:1027:A:ALA:N	1:1027:A:ALA:CA	1:1027:A:ALA:C	1:1028:A:LEU:N	17	6.53
(1,115)	1:1001:A:LYS:C	1:1002:A:MET:N	1:1002:A:MET:CA	1:1002:A:MET:C	16	6.53
(1,49)	1:956:A:LYS:C	1:957:A:GLU:N	1:957:A:GLU:CA	1:957:A:GLU:C	4	6.53
(1,27)	1:940:A:SER:C	1:941:A:SER:N	1:941:A:SER:CA	1:941:A:SER:C	9	6.53
(1,127)	1:1012:A:SER:C	1:1013:A:LEU:N	1:1013:A:LEU:CA	1:1013:A:LEU:C	16	6.52
(1,70)	1:970:A:ASP:N	1:970:A:ASP:CA	1:970:A:ASP:C	1:971:A:GLU:N	14	6.52
(1,83)	1:981:A:HIS:C	1:982:A:ARG:N	1:982:A:ARG:CA	1:982:A:ARG:C	18	6.51
(1,175)	1:1040:A:ASP:C	1:1041:A:GLN:N	1:1041:A:GLN:CA	1:1041:A:GLN:C	13	6.5
(1,54)	1:959:A:GLY:N	1:959:A:GLY:CA	1:959:A:GLY:C	1:960:A:LEU:N	10	6.5
(1,118)	1:1003:A:LYS:N	1:1003:A:LYS:CA	1:1003:A:LYS:C	1:1004:A:LEU:N	1	6.49
(1,73)	1:972:A:SER:C	1:973:A:LEU:N	1:973:A:LEU:CA	1:973:A:LEU:C	2	6.49
(1,27)	1:940:A:SER:C	1:941:A:SER:N	1:941:A:SER:CA	1:941:A:SER:C	11	6.49
(1,181)	1:1043:A:ARG:C	1:1044:A:LEU:N	1:1044:A:LEU:CA	1:1044:A:LEU:C	20	6.48
(1,147)	1:1023:A:THR:C	1:1024:A:ALA:N	1:1024:A:ALA:CA	1:1024:A:ALA:C	9	6.48
(1,122)	1:1005:A:ALA:N	1:1005:A:ALA:CA	1:1005:A:ALA:C	1:1006:A:GLN:N	22	6.48
(1,4)	1:925:A:VAL:N	1:925:A:VAL:CA	1:925:A:VAL:C	1:926:A:TYR:N	1	6.48
(1,175)	1:1040:A:ASP:C	1:1041:A:GLN:N	1:1041:A:GLN:CA	1:1041:A:GLN:C	11	6.47
(1,39)	1:951:A:TYR:C	1:952:A:VAL:N	1:952:A:VAL:CA	1:952:A:VAL:C	10	6.47
(1,120)	1:1004:A:LEU:N	1:1004:A:LEU:CA	1:1004:A:LEU:C	1:1005:A:ALA:N	7	6.46
(1,20)	1:935:A:ALA:N	1:935:A:ALA:CA	1:935:A:ALA:C	1:936:A:VAL:N	4	6.46
(1,123)	1:1005:A:ALA:C	1:1006:A:GLN:N	1:1006:A:GLN:CA	1:1006:A:GLN:C	24	6.45
(1,4)	1:925:A:VAL:N	1:925:A:VAL:CA	1:925:A:VAL:C	1:926:A:TYR:N	11	6.45
(1,110)	1:996:A:ALA:N	1:996:A:ALA:CA	1:996:A:ALA:C	1:997:A:GLU:N	16	6.44
(1,52)	1:958:A:VAL:N	1:958:A:VAL:CA	1:958:A:VAL:C	1:959:A:GLY:N	24	6.44
(1,111)	1:996:A:ALA:C	1:997:A:GLU:N	1:997:A:GLU:CA	1:997:A:GLU:C	5	6.43
(1,34)	1:944:A:GLN:N	1:944:A:GLN:CA	1:944:A:GLN:C	1:945:A:PRO:N	2	6.43
(1,111)	1:996:A:ALA:C	1:997:A:GLU:N	1:997:A:GLU:CA	1:997:A:GLU:C	11	6.42
(1,89)	1:984:A:ILE:C	1:985:A:GLU:N	1:985:A:GLU:CA	1:985:A:GLU:C	2	6.41
(1,67)	1:968:A:THR:C	1:969:A:VAL:N	1:969:A:VAL:CA	1:969:A:VAL:C	2	6.4
(1,67)	1:968:A:THR:C	1:969:A:VAL:N	1:969:A:VAL:CA	1:969:A:VAL:C	12	6.39
(1,55)	1:959:A:GLY:C	1:960:A:LEU:N	1:960:A:LEU:CA	1:960:A:LEU:C	23	6.39
(1,49)	1:956:A:LYS:C	1:957:A:GLU:N	1:957:A:GLU:CA	1:957:A:GLU:C	18	6.39
(1,5)	1:925:A:VAL:C	1:926:A:TYR:N	1:926:A:TYR:CA	1:926:A:TYR:C	4	6.39
(1,90)	1:985:A:GLU:N	1:985:A:GLU:CA	1:985:A:GLU:C	1:986:A:MET:N	20	6.38
(1,5)	1:925:A:VAL:C	1:926:A:TYR:N	1:926:A:TYR:CA	1:926:A:TYR:C	19	6.38
(1,181)	1:1043:A:ARG:C	1:1044:A:LEU:N	1:1044:A:LEU:CA	1:1044:A:LEU:C	15	6.37
(1,157)	1:1028:A:LEU:C	1:1029:A:ALA:N	1:1029:A:ALA:CA	1:1029:A:ALA:C	5	6.37
(1,112)	1:997:A:GLU:N	1:997:A:GLU:CA	1:997:A:GLU:C	1:998:A:LEU:N	25	6.36
(1,98)	1:989:A:LYS:N	1:989:A:LYS:CA	1:989:A:LYS:C	1:990:A:LEU:N	19	6.36
(1,27)	1:940:A:SER:C	1:941:A:SER:N	1:941:A:SER:CA	1:941:A:SER:C	7	6.35
(1,27)	1:940:A:SER:C	1:941:A:SER:N	1:941:A:SER:CA	1:941:A:SER:C	14	6.35
(1,5)	1:925:A:VAL:C	1:926:A:TYR:N	1:926:A:TYR:CA	1:926:A:TYR:C	20	6.35
(1,100)	1:990:A:LEU:N	1:990:A:LEU:CA	1:990:A:LEU:C	1:991:A:LEU:N	25	6.34
(1,147)	1:1023:A:THR:C	1:1024:A:ALA:N	1:1024:A:ALA:CA	1:1024:A:ALA:C	12	6.33
(1,85)	1:982:A:ARG:C	1:983:A:GLU:N	1:983:A:GLU:CA	1:983:A:GLU:C	3	6.33
(1,74)	1:973:A:LEU:N	1:973:A:LEU:CA	1:973:A:LEU:C	1:974:A:PRO:N	4	6.32
(1,74)	1:973:A:LEU:N	1:973:A:LEU:CA	1:973:A:LEU:C	1:974:A:PRO:N	23	6.32
(1,8)	1:928:A:ASN:N	1:928:A:ASN:CA	1:928:A:ASN:C	1:929:A:VAL:N	11	6.32

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,124)	1:1006:A:GLN:N	1:1006:A:GLN:CA	1:1006:A:GLN:C	1:1007:A:GLN:N	25	6.31
(1,31)	1:942:A:LYS:C	1:943:A:ILE:N	1:943:A:ILE:CA	1:943:A:ILE:C	9	6.31
(1,4)	1:925:A:VAL:N	1:925:A:VAL:CA	1:925:A:VAL:C	1:926:A:TYR:N	15	6.31
(1,169)	1:1034:A:ASN:C	1:1035:A:LEU:N	1:1035:A:LEU:CA	1:1035:A:LEU:C	9	6.3
(1,8)	1:928:A:ASN:N	1:928:A:ASN:CA	1:928:A:ASN:C	1:929:A:VAL:N	17	6.3
(1,174)	1:1040:A:ASP:N	1:1040:A:ASP:CA	1:1040:A:ASP:C	1:1041:A:GLN:N	24	6.29
(1,173)	1:1039:A:ILE:C	1:1040:A:ASP:N	1:1040:A:ASP:CA	1:1040:A:ASP:C	12	6.29
(1,164)	1:1032:A:ALA:N	1:1032:A:ALA:CA	1:1032:A:ALA:C	1:1033:A:LYS:N	1	6.29
(1,80)	1:980:A:THR:N	1:980:A:THR:CA	1:980:A:THR:C	1:981:A:HIS:N	24	6.28
(1,52)	1:958:A:VAL:N	1:958:A:VAL:CA	1:958:A:VAL:C	1:959:A:GLY:N	2	6.28
(1,127)	1:1012:A:SER:C	1:1013:A:LEU:N	1:1013:A:LEU:CA	1:1013:A:LEU:C	13	6.27
(1,175)	1:1040:A:ASP:C	1:1041:A:GLN:N	1:1041:A:GLN:CA	1:1041:A:GLN:C	22	6.26
(1,169)	1:1034:A:ASN:C	1:1035:A:LEU:N	1:1035:A:LEU:CA	1:1035:A:LEU:C	13	6.26
(1,156)	1:1028:A:LEU:N	1:1028:A:LEU:CA	1:1028:A:LEU:C	1:1029:A:ALA:N	3	6.26
(1,123)	1:1005:A:ALA:C	1:1006:A:GLN:N	1:1006:A:GLN:CA	1:1006:A:GLN:C	9	6.26
(1,119)	1:1003:A:LYS:C	1:1004:A:LEU:N	1:1004:A:LEU:CA	1:1004:A:LEU:C	25	6.26
(1,79)	1:979:A:SER:C	1:980:A:THR:N	1:980:A:THR:CA	1:980:A:THR:C	5	6.26
(1,68)	1:969:A:VAL:N	1:969:A:VAL:CA	1:969:A:VAL:C	1:970:A:ASP:N	15	6.26
(1,67)	1:968:A:THR:C	1:969:A:VAL:N	1:969:A:VAL:CA	1:969:A:VAL:C	25	6.26
(1,172)	1:1036:A:LEU:N	1:1036:A:LEU:CA	1:1036:A:LEU:C	1:1037:A:ASP:N	12	6.25
(1,147)	1:1023:A:THR:C	1:1024:A:ALA:N	1:1024:A:ALA:CA	1:1024:A:ALA:C	25	6.25
(1,124)	1:1006:A:GLN:N	1:1006:A:GLN:CA	1:1006:A:GLN:C	1:1007:A:GLN:N	7	6.25
(1,46)	1:955:A:VAL:N	1:955:A:VAL:CA	1:955:A:VAL:C	1:956:A:LYS:N	18	6.25
(1,27)	1:940:A:SER:C	1:941:A:SER:N	1:941:A:SER:CA	1:941:A:SER:C	24	6.25
(1,174)	1:1040:A:ASP:N	1:1040:A:ASP:CA	1:1040:A:ASP:C	1:1041:A:GLN:N	5	6.23
(1,79)	1:979:A:SER:C	1:980:A:THR:N	1:980:A:THR:CA	1:980:A:THR:C	1	6.23
(1,68)	1:969:A:VAL:N	1:969:A:VAL:CA	1:969:A:VAL:C	1:970:A:ASP:N	24	6.23
(1,20)	1:935:A:ALA:N	1:935:A:ALA:CA	1:935:A:ALA:C	1:936:A:VAL:N	24	6.23
(1,174)	1:1040:A:ASP:N	1:1040:A:ASP:CA	1:1040:A:ASP:C	1:1041:A:GLN:N	18	6.21
(1,67)	1:968:A:THR:C	1:969:A:VAL:N	1:969:A:VAL:CA	1:969:A:VAL:C	7	6.21
(1,135)	1:1017:A:TYR:C	1:1018:A:LYS:N	1:1018:A:LYS:CA	1:1018:A:LYS:C	10	6.2
(1,111)	1:996:A:ALA:C	1:997:A:GLU:N	1:997:A:GLU:CA	1:997:A:GLU:C	17	6.2
(1,5)	1:925:A:VAL:C	1:926:A:TYR:N	1:926:A:TYR:CA	1:926:A:TYR:C	23	6.2
(1,61)	1:965:A:LEU:C	1:966:A:LEU:N	1:966:A:LEU:CA	1:966:A:LEU:C	11	6.19
(1,27)	1:940:A:SER:C	1:941:A:SER:N	1:941:A:SER:CA	1:941:A:SER:C	13	6.19
(1,6)	1:926:A:TYR:N	1:926:A:TYR:CA	1:926:A:TYR:C	1:927:A:GLU:N	2	6.19
(1,174)	1:1040:A:ASP:N	1:1040:A:ASP:CA	1:1040:A:ASP:C	1:1041:A:GLN:N	22	6.18
(1,146)	1:1023:A:THR:N	1:1023:A:THR:CA	1:1023:A:THR:C	1:1024:A:ALA:N	22	6.18
(1,61)	1:965:A:LEU:C	1:966:A:LEU:N	1:966:A:LEU:CA	1:966:A:LEU:C	25	6.18
(1,19)	1:934:A:LYS:C	1:935:A:ALA:N	1:935:A:ALA:CA	1:935:A:ALA:C	19	6.18
(1,176)	1:1041:A:GLN:N	1:1041:A:GLN:CA	1:1041:A:GLN:C	1:1042:A:ALA:N	9	6.17
(1,157)	1:1028:A:LEU:C	1:1029:A:ALA:N	1:1029:A:ALA:CA	1:1029:A:ALA:C	15	6.16
(1,147)	1:1023:A:THR:C	1:1024:A:ALA:N	1:1024:A:ALA:CA	1:1024:A:ALA:C	19	6.16
(1,67)	1:968:A:THR:C	1:969:A:VAL:N	1:969:A:VAL:CA	1:969:A:VAL:C	21	6.16
(1,35)	1:947:A:PRO:C	1:948:A:PRO:N	1:948:A:PRO:CA	1:948:A:PRO:C	14	6.16
(1,170)	1:1035:A:LEU:N	1:1035:A:LEU:CA	1:1035:A:LEU:C	1:1036:A:LEU:N	6	6.14
(1,147)	1:1023:A:THR:C	1:1024:A:ALA:N	1:1024:A:ALA:CA	1:1024:A:ALA:C	3	6.14
(1,123)	1:1005:A:ALA:C	1:1006:A:GLN:N	1:1006:A:GLN:CA	1:1006:A:GLN:C	16	6.14
(1,54)	1:959:A:GLY:N	1:959:A:GLY:CA	1:959:A:GLY:C	1:960:A:LEU:N	8	6.13
(1,40)	1:952:A:VAL:N	1:952:A:VAL:CA	1:952:A:VAL:C	1:953:A:PRO:N	21	6.13
(1,33)	1:943:A:ILE:C	1:944:A:GLN:N	1:944:A:GLN:CA	1:944:A:GLN:C	7	6.12

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,32)	1:943:A:ILE:N	1:943:A:ILE:CA	1:943:A:ILE:C	1:944:A:GLN:N	6	6.12
(1,78)	1:975:A:VAL:N	1:975:A:VAL:CA	1:975:A:VAL:C	1:976:A:LEU:N	1	6.11
(1,67)	1:968:A:THR:C	1:969:A:VAL:N	1:969:A:VAL:CA	1:969:A:VAL:C	8	6.11
(1,23)	1:938:A:GLU:C	1:939:A:MET:N	1:939:A:MET:CA	1:939:A:MET:C	20	6.11
(1,139)	1:1019:A:LYS:C	1:1020:A:GLN:N	1:1020:A:GLN:CA	1:1020:A:GLN:C	2	6.1
(1,134)	1:1016:A:GLU:N	1:1016:A:GLU:CA	1:1016:A:GLU:C	1:1017:A:TYR:N	18	6.1
(1,88)	1:984:A:ILE:N	1:984:A:ILE:CA	1:984:A:ILE:C	1:985:A:GLU:N	2	6.1
(1,74)	1:973:A:LEU:N	1:973:A:LEU:CA	1:973:A:LEU:C	1:974:A:PRO:N	12	6.1
(1,70)	1:970:A:ASP:N	1:970:A:ASP:CA	1:970:A:ASP:C	1:971:A:GLU:N	23	6.1
(1,95)	1:987:A:ALA:C	1:988:A:GLN:N	1:988:A:GLN:CA	1:988:A:GLN:C	22	6.09
(1,78)	1:975:A:VAL:N	1:975:A:VAL:CA	1:975:A:VAL:C	1:976:A:LEU:N	10	6.09
(1,74)	1:973:A:LEU:N	1:973:A:LEU:CA	1:973:A:LEU:C	1:974:A:PRO:N	11	6.09
(1,29)	1:941:A:SER:C	1:942:A:LYS:N	1:942:A:LYS:CA	1:942:A:LYS:C	9	6.09
(1,5)	1:925:A:VAL:C	1:926:A:TYR:N	1:926:A:TYR:CA	1:926:A:TYR:C	15	6.09
(1,109)	1:995:A:LEU:C	1:996:A:ALA:N	1:996:A:ALA:CA	1:996:A:ALA:C	1	6.08
(1,89)	1:984:A:ILE:C	1:985:A:GLU:N	1:985:A:GLU:CA	1:985:A:GLU:C	18	6.08
(1,158)	1:1029:A:ALA:N	1:1029:A:ALA:CA	1:1029:A:ALA:C	1:1030:A:VAL:N	10	6.07
(1,115)	1:1001:A:LYS:C	1:1002:A:MET:N	1:1002:A:MET:CA	1:1002:A:MET:C	6	6.07
(1,49)	1:956:A:LYS:C	1:957:A:GLU:N	1:957:A:GLU:CA	1:957:A:GLU:C	9	6.07
(1,11)	1:930:A:THR:C	1:931:A:GLY:N	1:931:A:GLY:CA	1:931:A:GLY:C	7	6.07
(1,163)	1:1031:A:ASP:C	1:1032:A:ALA:N	1:1032:A:ALA:CA	1:1032:A:ALA:C	11	6.06
(1,115)	1:1001:A:LYS:C	1:1002:A:MET:N	1:1002:A:MET:CA	1:1002:A:MET:C	13	6.06
(1,83)	1:981:A:HIS:C	1:982:A:ARG:N	1:982:A:ARG:CA	1:982:A:ARG:C	6	6.06
(1,61)	1:965:A:LEU:C	1:966:A:LEU:N	1:966:A:LEU:CA	1:966:A:LEU:C	20	6.06
(1,174)	1:1040:A:ASP:N	1:1040:A:ASP:CA	1:1040:A:ASP:C	1:1041:A:GLN:N	25	6.05
(1,115)	1:1001:A:LYS:C	1:1002:A:MET:N	1:1002:A:MET:CA	1:1002:A:MET:C	15	6.04
(1,74)	1:973:A:LEU:N	1:973:A:LEU:CA	1:973:A:LEU:C	1:974:A:PRO:N	21	6.04
(1,23)	1:938:A:GLU:C	1:939:A:MET:N	1:939:A:MET:CA	1:939:A:MET:C	11	6.04
(1,18)	1:934:A:LYS:N	1:934:A:LYS:CA	1:934:A:LYS:C	1:935:A:ALA:N	5	6.04
(1,147)	1:1023:A:THR:C	1:1024:A:ALA:N	1:1024:A:ALA:CA	1:1024:A:ALA:C	2	6.03
(1,69)	1:969:A:VAL:C	1:970:A:ASP:N	1:970:A:ASP:CA	1:970:A:ASP:C	21	6.03
(1,122)	1:1005:A:ALA:N	1:1005:A:ALA:CA	1:1005:A:ALA:C	1:1006:A:GLN:N	17	6.02
(1,118)	1:1003:A:LYS:N	1:1003:A:LYS:CA	1:1003:A:LYS:C	1:1004:A:LEU:N	2	6.02
(1,83)	1:981:A:HIS:C	1:982:A:ARG:N	1:982:A:ARG:CA	1:982:A:ARG:C	7	6.02
(1,178)	1:1042:A:ALA:N	1:1042:A:ALA:CA	1:1042:A:ALA:C	1:1043:A:ARG:N	25	6.01
(1,174)	1:1040:A:ASP:N	1:1040:A:ASP:CA	1:1040:A:ASP:C	1:1041:A:GLN:N	6	6.01
(1,157)	1:1028:A:LEU:C	1:1029:A:ALA:N	1:1029:A:ALA:CA	1:1029:A:ALA:C	12	6.01
(1,67)	1:968:A:THR:C	1:969:A:VAL:N	1:969:A:VAL:CA	1:969:A:VAL:C	4	6.01
(1,64)	1:967:A:ALA:N	1:967:A:ALA:CA	1:967:A:ALA:C	1:968:A:THR:N	15	6.01
(1,20)	1:935:A:ALA:N	1:935:A:ALA:CA	1:935:A:ALA:C	1:936:A:VAL:N	12	6.01
(1,163)	1:1031:A:ASP:C	1:1032:A:ALA:N	1:1032:A:ALA:CA	1:1032:A:ALA:C	6	6.0
(1,89)	1:984:A:ILE:C	1:985:A:GLU:N	1:985:A:GLU:CA	1:985:A:GLU:C	23	6.0
(1,27)	1:940:A:SER:C	1:941:A:SER:N	1:941:A:SER:CA	1:941:A:SER:C	12	6.0
(1,21)	1:937:A:ILE:C	1:938:A:GLU:N	1:938:A:GLU:CA	1:938:A:GLU:C	6	6.0
(1,115)	1:1001:A:LYS:C	1:1002:A:MET:N	1:1002:A:MET:CA	1:1002:A:MET:C	21	5.99
(1,85)	1:982:A:ARG:C	1:983:A:GLU:N	1:983:A:GLU:CA	1:983:A:GLU:C	4	5.99
(1,16)	1:933:A:VAL:N	1:933:A:VAL:CA	1:933:A:VAL:C	1:934:A:LYS:N	12	5.99
(1,12)	1:931:A:GLY:N	1:931:A:GLY:CA	1:931:A:GLY:C	1:932:A:LEU:N	1	5.99
(1,12)	1:931:A:GLY:N	1:931:A:GLY:CA	1:931:A:GLY:C	1:932:A:LEU:N	6	5.99
(1,165)	1:1032:A:ALA:C	1:1033:A:LYS:N	1:1033:A:LYS:CA	1:1033:A:LYS:C	17	5.98
(1,21)	1:937:A:ILE:C	1:938:A:GLU:N	1:938:A:GLU:CA	1:938:A:GLU:C	3	5.97

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,90)	1:985:A:GLU:N	1:985:A:GLU:CA	1:985:A:GLU:C	1:986:A:MET:N	24	5.96
(1,68)	1:969:A:VAL:N	1:969:A:VAL:CA	1:969:A:VAL:C	1:970:A:ASP:N	13	5.96
(1,20)	1:935:A:ALA:N	1:935:A:ALA:CA	1:935:A:ALA:C	1:936:A:VAL:N	22	5.96
(1,129)	1:1013:A:LEU:C	1:1014:A:GLN:N	1:1014:A:GLN:CA	1:1014:A:GLN:C	21	5.95
(1,5)	1:925:A:VAL:C	1:926:A:TYR:N	1:926:A:TYR:CA	1:926:A:TYR:C	11	5.95
(1,105)	1:992:A:ASN:C	1:993:A:SER:N	1:993:A:SER:CA	1:993:A:SER:C	1	5.94
(1,27)	1:940:A:SER:C	1:941:A:SER:N	1:941:A:SER:CA	1:941:A:SER:C	3	5.94
(1,118)	1:1003:A:LYS:N	1:1003:A:LYS:CA	1:1003:A:LYS:C	1:1004:A:LEU:N	12	5.93
(1,101)	1:990:A:LEU:C	1:991:A:LEU:N	1:991:A:LEU:CA	1:991:A:LEU:C	24	5.93
(1,21)	1:937:A:ILE:C	1:938:A:GLU:N	1:938:A:GLU:CA	1:938:A:GLU:C	21	5.93
(1,18)	1:934:A:LYS:N	1:934:A:LYS:CA	1:934:A:LYS:C	1:935:A:ALA:N	1	5.93
(1,3)	1:924:A:LYS:C	1:925:A:VAL:N	1:925:A:VAL:CA	1:925:A:VAL:C	23	5.93
(1,59)	1:964:A:THR:C	1:965:A:LEU:N	1:965:A:LEU:CA	1:965:A:LEU:C	24	5.92
(1,181)	1:1043:A:ARG:C	1:1044:A:LEU:N	1:1044:A:LEU:CA	1:1044:A:LEU:C	12	5.91
(1,20)	1:935:A:ALA:N	1:935:A:ALA:CA	1:935:A:ALA:C	1:936:A:VAL:N	13	5.91
(1,157)	1:1028:A:LEU:C	1:1029:A:ALA:N	1:1029:A:ALA:CA	1:1029:A:ALA:C	10	5.9
(1,115)	1:1001:A:LYS:C	1:1002:A:MET:N	1:1002:A:MET:CA	1:1002:A:MET:C	11	5.9
(1,110)	1:996:A:ALA:N	1:996:A:ALA:CA	1:996:A:ALA:C	1:997:A:GLU:N	21	5.9
(1,85)	1:982:A:ARG:C	1:983:A:GLU:N	1:983:A:GLU:CA	1:983:A:GLU:C	14	5.9
(1,179)	1:1042:A:ALA:C	1:1043:A:ARG:N	1:1043:A:ARG:CA	1:1043:A:ARG:C	21	5.89
(1,157)	1:1028:A:LEU:C	1:1029:A:ALA:N	1:1029:A:ALA:CA	1:1029:A:ALA:C	19	5.89
(1,104)	1:992:A:ASN:N	1:992:A:ASN:CA	1:992:A:ASN:C	1:993:A:SER:N	6	5.89
(1,68)	1:969:A:VAL:N	1:969:A:VAL:CA	1:969:A:VAL:C	1:970:A:ASP:N	17	5.89
(1,67)	1:968:A:THR:C	1:969:A:VAL:N	1:969:A:VAL:CA	1:969:A:VAL:C	6	5.89
(1,33)	1:943:A:ILE:C	1:944:A:GLN:N	1:944:A:GLN:CA	1:944:A:GLN:C	25	5.88
(1,21)	1:937:A:ILE:C	1:938:A:GLU:N	1:938:A:GLU:CA	1:938:A:GLU:C	18	5.88
(1,119)	1:1003:A:LYS:C	1:1004:A:LEU:N	1:1004:A:LEU:CA	1:1004:A:LEU:C	20	5.87
(1,98)	1:989:A:LYS:N	1:989:A:LYS:CA	1:989:A:LYS:C	1:990:A:LEU:N	13	5.87
(1,20)	1:935:A:ALA:N	1:935:A:ALA:CA	1:935:A:ALA:C	1:936:A:VAL:N	20	5.87
(1,146)	1:1023:A:THR:N	1:1023:A:THR:CA	1:1023:A:THR:C	1:1024:A:ALA:N	15	5.86
(1,115)	1:1001:A:LYS:C	1:1002:A:MET:N	1:1002:A:MET:CA	1:1002:A:MET:C	19	5.86
(1,58)	1:961:A:ALA:N	1:961:A:ALA:CA	1:961:A:ALA:C	1:962:A:LEU:N	18	5.86
(1,107)	1:994:A:ASP:C	1:995:A:LEU:N	1:995:A:LEU:CA	1:995:A:LEU:C	1	5.85
(1,37)	1:948:A:PRO:C	1:949:A:GLU:N	1:949:A:GLU:CA	1:949:A:GLU:C	1	5.85
(1,32)	1:943:A:ILE:N	1:943:A:ILE:CA	1:943:A:ILE:C	1:944:A:GLN:N	22	5.85
(1,21)	1:937:A:ILE:C	1:938:A:GLU:N	1:938:A:GLU:CA	1:938:A:GLU:C	25	5.85
(1,19)	1:934:A:LYS:C	1:935:A:ALA:N	1:935:A:ALA:CA	1:935:A:ALA:C	20	5.85
(1,158)	1:1029:A:ALA:N	1:1029:A:ALA:CA	1:1029:A:ALA:C	1:1030:A:VAL:N	13	5.83
(1,39)	1:951:A:TYR:C	1:952:A:VAL:N	1:952:A:VAL:CA	1:952:A:VAL:C	16	5.83
(1,20)	1:935:A:ALA:N	1:935:A:ALA:CA	1:935:A:ALA:C	1:936:A:VAL:N	23	5.83
(1,155)	1:1027:A:ALA:C	1:1028:A:LEU:N	1:1028:A:LEU:CA	1:1028:A:LEU:C	9	5.82
(1,147)	1:1023:A:THR:C	1:1024:A:ALA:N	1:1024:A:ALA:CA	1:1024:A:ALA:C	13	5.82
(1,146)	1:1023:A:THR:N	1:1023:A:THR:CA	1:1023:A:THR:C	1:1024:A:ALA:N	11	5.82
(1,27)	1:940:A:SER:C	1:941:A:SER:N	1:941:A:SER:CA	1:941:A:SER:C	2	5.82
(1,125)	1:1006:A:GLN:C	1:1007:A:GLN:N	1:1007:A:GLN:CA	1:1007:A:GLN:C	1	5.81
(1,123)	1:1005:A:ALA:C	1:1006:A:GLN:N	1:1006:A:GLN:CA	1:1006:A:GLN:C	20	5.81
(1,122)	1:1005:A:ALA:N	1:1005:A:ALA:CA	1:1005:A:ALA:C	1:1006:A:GLN:N	21	5.81
(1,102)	1:991:A:LEU:N	1:991:A:LEU:CA	1:991:A:LEU:C	1:992:A:ASN:N	16	5.8
(1,92)	1:986:A:MET:N	1:986:A:MET:CA	1:986:A:MET:C	1:987:A:ALA:N	16	5.8
(1,83)	1:981:A:HIS:C	1:982:A:ARG:N	1:982:A:ARG:CA	1:982:A:ARG:C	25	5.8
(1,172)	1:1036:A:LEU:N	1:1036:A:LEU:CA	1:1036:A:LEU:C	1:1037:A:ASP:N	9	5.79

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,58)	1:961:A:ALA:N	1:961:A:ALA:CA	1:961:A:ALA:C	1:962:A:LEU:N	25	5.79
(1,139)	1:1019:A:LYS:C	1:1020:A:GLN:N	1:1020:A:GLN:CA	1:1020:A:GLN:C	3	5.78
(1,105)	1:992:A:ASN:C	1:993:A:SER:N	1:993:A:SER:CA	1:993:A:SER:C	3	5.77
(1,157)	1:1028:A:LEU:C	1:1029:A:ALA:N	1:1029:A:ALA:CA	1:1029:A:ALA:C	21	5.76
(1,137)	1:1018:A:LYS:C	1:1019:A:LYS:N	1:1019:A:LYS:CA	1:1019:A:LYS:C	8	5.75
(1,39)	1:951:A:TYR:C	1:952:A:VAL:N	1:952:A:VAL:CA	1:952:A:VAL:C	8	5.75
(1,157)	1:1028:A:LEU:C	1:1029:A:ALA:N	1:1029:A:ALA:CA	1:1029:A:ALA:C	1	5.73
(1,147)	1:1023:A:THR:C	1:1024:A:ALA:N	1:1024:A:ALA:CA	1:1024:A:ALA:C	8	5.73
(1,33)	1:943:A:ILE:C	1:944:A:GLN:N	1:944:A:GLN:CA	1:944:A:GLN:C	10	5.73
(1,128)	1:1013:A:LEU:N	1:1013:A:LEU:CA	1:1013:A:LEU:C	1:1014:A:GLN:N	20	5.72
(1,126)	1:1007:A:GLN:N	1:1007:A:GLN:CA	1:1007:A:GLN:C	1:1008:A:TYR:N	20	5.72
(1,123)	1:1005:A:ALA:C	1:1006:A:GLN:N	1:1006:A:GLN:CA	1:1006:A:GLN:C	14	5.72
(1,105)	1:992:A:ASN:C	1:993:A:SER:N	1:993:A:SER:CA	1:993:A:SER:C	25	5.72
(1,68)	1:969:A:VAL:N	1:969:A:VAL:CA	1:969:A:VAL:C	1:970:A:ASP:N	8	5.72
(1,163)	1:1031:A:ASP:C	1:1032:A:ALA:N	1:1032:A:ALA:CA	1:1032:A:ALA:C	9	5.71
(1,89)	1:984:A:ILE:C	1:985:A:GLU:N	1:985:A:GLU:CA	1:985:A:GLU:C	15	5.71
(1,20)	1:935:A:ALA:N	1:935:A:ALA:CA	1:935:A:ALA:C	1:936:A:VAL:N	8	5.71
(1,177)	1:1041:A:GLN:C	1:1042:A:ALA:N	1:1042:A:ALA:CA	1:1042:A:ALA:C	22	5.7
(1,176)	1:1041:A:GLN:N	1:1041:A:GLN:CA	1:1041:A:GLN:C	1:1042:A:ALA:N	11	5.7
(1,123)	1:1005:A:ALA:C	1:1006:A:GLN:N	1:1006:A:GLN:CA	1:1006:A:GLN:C	13	5.7
(1,68)	1:969:A:VAL:N	1:969:A:VAL:CA	1:969:A:VAL:C	1:970:A:ASP:N	20	5.7
(1,67)	1:968:A:THR:C	1:969:A:VAL:N	1:969:A:VAL:CA	1:969:A:VAL:C	24	5.7
(1,146)	1:1023:A:THR:N	1:1023:A:THR:CA	1:1023:A:THR:C	1:1024:A:ALA:N	20	5.69
(1,94)	1:987:A:ALA:N	1:987:A:ALA:CA	1:987:A:ALA:C	1:988:A:GLN:N	25	5.68
(1,21)	1:937:A:ILE:C	1:938:A:GLU:N	1:938:A:GLU:CA	1:938:A:GLU:C	8	5.68
(1,157)	1:1028:A:LEU:C	1:1029:A:ALA:N	1:1029:A:ALA:CA	1:1029:A:ALA:C	14	5.67
(1,54)	1:959:A:GLY:N	1:959:A:GLY:CA	1:959:A:GLY:C	1:960:A:LEU:N	9	5.67
(1,12)	1:931:A:GLY:N	1:931:A:GLY:CA	1:931:A:GLY:C	1:932:A:LEU:N	20	5.67
(1,170)	1:1035:A:LEU:N	1:1035:A:LEU:CA	1:1035:A:LEU:C	1:1036:A:LEU:N	5	5.66
(1,71)	1:971:A:GLU:C	1:972:A:SER:N	1:972:A:SER:CA	1:972:A:SER:C	20	5.66
(1,55)	1:959:A:GLY:C	1:960:A:LEU:N	1:960:A:LEU:CA	1:960:A:LEU:C	7	5.66
(1,70)	1:970:A:ASP:N	1:970:A:ASP:CA	1:970:A:ASP:C	1:971:A:GLU:N	13	5.65
(1,51)	1:957:A:GLU:C	1:958:A:VAL:N	1:958:A:VAL:CA	1:958:A:VAL:C	21	5.65
(1,12)	1:931:A:GLY:N	1:931:A:GLY:CA	1:931:A:GLY:C	1:932:A:LEU:N	22	5.65
(1,175)	1:1040:A:ASP:C	1:1041:A:GLN:N	1:1041:A:GLN:CA	1:1041:A:GLN:C	4	5.64
(1,115)	1:1001:A:LYS:C	1:1002:A:MET:N	1:1002:A:MET:CA	1:1002:A:MET:C	17	5.64
(1,85)	1:982:A:ARG:C	1:983:A:GLU:N	1:983:A:GLU:CA	1:983:A:GLU:C	22	5.64
(1,125)	1:1006:A:GLN:C	1:1007:A:GLN:N	1:1007:A:GLN:CA	1:1007:A:GLN:C	25	5.63
(1,54)	1:959:A:GLY:N	1:959:A:GLY:CA	1:959:A:GLY:C	1:960:A:LEU:N	3	5.63
(1,49)	1:956:A:LYS:C	1:957:A:GLU:N	1:957:A:GLU:CA	1:957:A:GLU:C	17	5.63
(1,12)	1:931:A:GLY:N	1:931:A:GLY:CA	1:931:A:GLY:C	1:932:A:LEU:N	12	5.62
(1,29)	1:941:A:SER:C	1:942:A:LYS:N	1:942:A:LYS:CA	1:942:A:LYS:C	13	5.61
(1,85)	1:982:A:ARG:C	1:983:A:GLU:N	1:983:A:GLU:CA	1:983:A:GLU:C	9	5.6
(1,61)	1:965:A:LEU:C	1:966:A:LEU:N	1:966:A:LEU:CA	1:966:A:LEU:C	22	5.6
(1,21)	1:937:A:ILE:C	1:938:A:GLU:N	1:938:A:GLU:CA	1:938:A:GLU:C	4	5.6
(1,58)	1:961:A:ALA:N	1:961:A:ALA:CA	1:961:A:ALA:C	1:962:A:LEU:N	10	5.59
(1,12)	1:931:A:GLY:N	1:931:A:GLY:CA	1:931:A:GLY:C	1:932:A:LEU:N	5	5.59
(1,101)	1:990:A:LEU:C	1:991:A:LEU:N	1:991:A:LEU:CA	1:991:A:LEU:C	1	5.58
(1,68)	1:969:A:VAL:N	1:969:A:VAL:CA	1:969:A:VAL:C	1:970:A:ASP:N	5	5.58
(1,173)	1:1039:A:ILE:C	1:1040:A:ASP:N	1:1040:A:ASP:CA	1:1040:A:ASP:C	18	5.57
(1,139)	1:1019:A:LYS:C	1:1020:A:GLN:N	1:1020:A:GLN:CA	1:1020:A:GLN:C	12	5.56

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,133)	1:1015:A:GLN:C	1:1016:A:GLU:N	1:1016:A:GLU:CA	1:1016:A:GLU:C	2	5.56
(1,123)	1:1005:A:ALA:C	1:1006:A:GLN:N	1:1006:A:GLN:CA	1:1006:A:GLN:C	5	5.56
(1,123)	1:1005:A:ALA:C	1:1006:A:GLN:N	1:1006:A:GLN:CA	1:1006:A:GLN:C	12	5.56
(1,68)	1:969:A:VAL:N	1:969:A:VAL:CA	1:969:A:VAL:C	1:970:A:ASP:N	11	5.55
(1,50)	1:957:A:GLU:N	1:957:A:GLU:CA	1:957:A:GLU:C	1:958:A:VAL:N	17	5.55
(1,8)	1:928:A:ASN:N	1:928:A:ASN:CA	1:928:A:ASN:C	1:929:A:VAL:N	20	5.55
(1,155)	1:1027:A:ALA:C	1:1028:A:LEU:N	1:1028:A:LEU:CA	1:1028:A:LEU:C	18	5.54
(1,57)	1:960:A:LEU:C	1:961:A:ALA:N	1:961:A:ALA:CA	1:961:A:ALA:C	15	5.54
(1,5)	1:925:A:VAL:C	1:926:A:TYR:N	1:926:A:TYR:CA	1:926:A:TYR:C	5	5.54
(1,175)	1:1040:A:ASP:C	1:1041:A:GLN:N	1:1041:A:GLN:CA	1:1041:A:GLN:C	17	5.53
(1,4)	1:925:A:VAL:N	1:925:A:VAL:CA	1:925:A:VAL:C	1:926:A:TYR:N	25	5.53
(1,131)	1:1014:A:GLN:C	1:1015:A:GLN:N	1:1015:A:GLN:CA	1:1015:A:GLN:C	1	5.52
(1,68)	1:969:A:VAL:N	1:969:A:VAL:CA	1:969:A:VAL:C	1:970:A:ASP:N	12	5.52
(1,122)	1:1005:A:ALA:N	1:1005:A:ALA:CA	1:1005:A:ALA:C	1:1006:A:GLN:N	14	5.51
(1,39)	1:951:A:TYR:C	1:952:A:VAL:N	1:952:A:VAL:CA	1:952:A:VAL:C	17	5.51
(1,11)	1:930:A:THR:C	1:931:A:GLY:N	1:931:A:GLY:CA	1:931:A:GLY:C	14	5.51
(1,149)	1:1024:A:ALA:C	1:1025:A:ALA:N	1:1025:A:ALA:CA	1:1025:A:ALA:C	9	5.5
(1,123)	1:1005:A:ALA:C	1:1006:A:GLN:N	1:1006:A:GLN:CA	1:1006:A:GLN:C	11	5.5
(1,89)	1:984:A:ILE:C	1:985:A:GLU:N	1:985:A:GLU:CA	1:985:A:GLU:C	4	5.5
(1,85)	1:982:A:ARG:C	1:983:A:GLU:N	1:983:A:GLU:CA	1:983:A:GLU:C	6	5.5
(1,37)	1:948:A:PRO:C	1:949:A:GLU:N	1:949:A:GLU:CA	1:949:A:GLU:C	19	5.5
(1,20)	1:935:A:ALA:N	1:935:A:ALA:CA	1:935:A:ALA:C	1:936:A:VAL:N	1	5.5
(1,150)	1:1025:A:ALA:N	1:1025:A:ALA:CA	1:1025:A:ALA:C	1:1026:A:HIS:N	21	5.49
(1,139)	1:1019:A:LYS:C	1:1020:A:GLN:N	1:1020:A:GLN:CA	1:1020:A:GLN:C	1	5.49
(1,112)	1:997:A:GLU:N	1:997:A:GLU:CA	1:997:A:GLU:C	1:998:A:LEU:N	20	5.49
(1,32)	1:943:A:ILE:N	1:943:A:ILE:CA	1:943:A:ILE:C	1:944:A:GLN:N	9	5.49
(1,20)	1:935:A:ALA:N	1:935:A:ALA:CA	1:935:A:ALA:C	1:936:A:VAL:N	15	5.49
(1,54)	1:959:A:GLY:N	1:959:A:GLY:CA	1:959:A:GLY:C	1:960:A:LEU:N	13	5.48
(1,20)	1:935:A:ALA:N	1:935:A:ALA:CA	1:935:A:ALA:C	1:936:A:VAL:N	21	5.48
(1,139)	1:1019:A:LYS:C	1:1020:A:GLN:N	1:1020:A:GLN:CA	1:1020:A:GLN:C	18	5.47
(1,122)	1:1005:A:ALA:N	1:1005:A:ALA:CA	1:1005:A:ALA:C	1:1006:A:GLN:N	23	5.47
(1,105)	1:992:A:ASN:C	1:993:A:SER:N	1:993:A:SER:CA	1:993:A:SER:C	17	5.46
(1,85)	1:982:A:ARG:C	1:983:A:GLU:N	1:983:A:GLU:CA	1:983:A:GLU:C	13	5.46
(1,73)	1:972:A:SER:C	1:973:A:LEU:N	1:973:A:LEU:CA	1:973:A:LEU:C	3	5.45
(1,170)	1:1035:A:LEU:N	1:1035:A:LEU:CA	1:1035:A:LEU:C	1:1036:A:LEU:N	18	5.44
(1,163)	1:1031:A:ASP:C	1:1032:A:ALA:N	1:1032:A:ALA:CA	1:1032:A:ALA:C	25	5.44
(1,141)	1:1020:A:GLN:C	1:1021:A:MET:N	1:1021:A:MET:CA	1:1021:A:MET:C	14	5.44
(1,89)	1:984:A:ILE:C	1:985:A:GLU:N	1:985:A:GLU:CA	1:985:A:GLU:C	19	5.44
(1,169)	1:1034:A:ASN:C	1:1035:A:LEU:N	1:1035:A:LEU:CA	1:1035:A:LEU:C	21	5.43
(1,132)	1:1015:A:GLN:N	1:1015:A:GLN:CA	1:1015:A:GLN:C	1:1016:A:GLU:N	15	5.43
(1,39)	1:951:A:TYR:C	1:952:A:VAL:N	1:952:A:VAL:CA	1:952:A:VAL:C	24	5.43
(1,68)	1:969:A:VAL:N	1:969:A:VAL:CA	1:969:A:VAL:C	1:970:A:ASP:N	3	5.42
(1,101)	1:990:A:LEU:C	1:991:A:LEU:N	1:991:A:LEU:CA	1:991:A:LEU:C	3	5.41
(1,66)	1:968:A:THR:N	1:968:A:THR:CA	1:968:A:THR:C	1:969:A:VAL:N	4	5.41
(1,20)	1:935:A:ALA:N	1:935:A:ALA:CA	1:935:A:ALA:C	1:936:A:VAL:N	18	5.41
(1,6)	1:926:A:TYR:N	1:926:A:TYR:CA	1:926:A:TYR:C	1:927:A:GLU:N	16	5.41
(1,164)	1:1032:A:ALA:N	1:1032:A:ALA:CA	1:1032:A:ALA:C	1:1033:A:LYS:N	3	5.4
(1,131)	1:1014:A:GLN:C	1:1015:A:GLN:N	1:1015:A:GLN:CA	1:1015:A:GLN:C	9	5.4
(1,80)	1:980:A:THR:N	1:980:A:THR:CA	1:980:A:THR:C	1:981:A:HIS:N	20	5.4
(1,166)	1:1033:A:LYS:N	1:1033:A:LYS:CA	1:1033:A:LYS:C	1:1034:A:ASN:N	24	5.39
(1,119)	1:1003:A:LYS:C	1:1004:A:LEU:N	1:1004:A:LEU:CA	1:1004:A:LEU:C	2	5.39

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,49)	1:956:A:LYS:C	1:957:A:GLU:N	1:957:A:GLU:CA	1:957:A:GLU:C	12	5.39
(1,123)	1:1005:A:ALA:C	1:1006:A:GLN:N	1:1006:A:GLN:CA	1:1006:A:GLN:C	4	5.38
(1,103)	1:991:A:LEU:C	1:992:A:ASN:N	1:992:A:ASN:CA	1:992:A:ASN:C	17	5.38
(1,27)	1:940:A:SER:C	1:941:A:SER:N	1:941:A:SER:CA	1:941:A:SER:C	18	5.38
(1,74)	1:973:A:LEU:N	1:973:A:LEU:CA	1:973:A:LEU:C	1:974:A:PRO:N	1	5.37
(1,7)	1:927:A:GLU:C	1:928:A:ASN:N	1:928:A:ASN:CA	1:928:A:ASN:C	23	5.37
(1,123)	1:1005:A:ALA:C	1:1006:A:GLN:N	1:1006:A:GLN:CA	1:1006:A:GLN:C	18	5.36
(1,73)	1:972:A:SER:C	1:973:A:LEU:N	1:973:A:LEU:CA	1:973:A:LEU:C	17	5.36
(1,7)	1:927:A:GLU:C	1:928:A:ASN:N	1:928:A:ASN:CA	1:928:A:ASN:C	22	5.36
(1,35)	1:947:A:PRO:C	1:948:A:PRO:N	1:948:A:PRO:CA	1:948:A:PRO:C	18	5.35
(1,27)	1:940:A:SER:C	1:941:A:SER:N	1:941:A:SER:CA	1:941:A:SER:C	17	5.35
(1,12)	1:931:A:GLY:N	1:931:A:GLY:CA	1:931:A:GLY:C	1:932:A:LEU:N	24	5.35
(1,146)	1:1023:A:THR:N	1:1023:A:THR:CA	1:1023:A:THR:C	1:1024:A:ALA:N	14	5.34
(1,73)	1:972:A:SER:C	1:973:A:LEU:N	1:973:A:LEU:CA	1:973:A:LEU:C	10	5.34
(1,79)	1:979:A:SER:C	1:980:A:THR:N	1:980:A:THR:CA	1:980:A:THR:C	4	5.33
(1,90)	1:985:A:GLU:N	1:985:A:GLU:CA	1:985:A:GLU:C	1:986:A:MET:N	2	5.32
(1,85)	1:982:A:ARG:C	1:983:A:GLU:N	1:983:A:GLU:CA	1:983:A:GLU:C	11	5.32
(1,54)	1:959:A:GLY:N	1:959:A:GLY:CA	1:959:A:GLY:C	1:960:A:LEU:N	25	5.32
(1,27)	1:940:A:SER:C	1:941:A:SER:N	1:941:A:SER:CA	1:941:A:SER:C	22	5.32
(1,169)	1:1034:A:ASN:C	1:1035:A:LEU:N	1:1035:A:LEU:CA	1:1035:A:LEU:C	7	5.31
(1,133)	1:1015:A:GLN:C	1:1016:A:GLU:N	1:1016:A:GLU:CA	1:1016:A:GLU:C	20	5.31
(1,131)	1:1014:A:GLN:C	1:1015:A:GLN:N	1:1015:A:GLN:CA	1:1015:A:GLN:C	12	5.31
(1,181)	1:1043:A:ARG:C	1:1044:A:LEU:N	1:1044:A:LEU:CA	1:1044:A:LEU:C	7	5.3
(1,101)	1:990:A:LEU:C	1:991:A:LEU:N	1:991:A:LEU:CA	1:991:A:LEU:C	5	5.3
(1,54)	1:959:A:GLY:N	1:959:A:GLY:CA	1:959:A:GLY:C	1:960:A:LEU:N	18	5.3
(1,21)	1:937:A:ILE:C	1:938:A:GLU:N	1:938:A:GLU:CA	1:938:A:GLU:C	14	5.3
(1,171)	1:1035:A:LEU:C	1:1036:A:LEU:N	1:1036:A:LEU:CA	1:1036:A:LEU:C	22	5.29
(1,166)	1:1033:A:LYS:N	1:1033:A:LYS:CA	1:1033:A:LYS:C	1:1034:A:ASN:N	25	5.29
(1,150)	1:1025:A:ALA:N	1:1025:A:ALA:CA	1:1025:A:ALA:C	1:1026:A:HIS:N	3	5.29
(1,150)	1:1025:A:ALA:N	1:1025:A:ALA:CA	1:1025:A:ALA:C	1:1026:A:HIS:N	24	5.28
(1,135)	1:1017:A:TYR:C	1:1018:A:LYS:N	1:1018:A:LYS:CA	1:1018:A:LYS:C	8	5.28
(1,27)	1:940:A:SER:C	1:941:A:SER:N	1:941:A:SER:CA	1:941:A:SER:C	23	5.28
(1,15)	1:932:A:LEU:C	1:933:A:VAL:N	1:933:A:VAL:CA	1:933:A:VAL:C	4	5.28
(1,140)	1:1020:A:GLN:N	1:1020:A:GLN:CA	1:1020:A:GLN:C	1:1021:A:MET:N	21	5.27
(1,49)	1:956:A:LYS:C	1:957:A:GLU:N	1:957:A:GLU:CA	1:957:A:GLU:C	10	5.27
(1,83)	1:981:A:HIS:C	1:982:A:ARG:N	1:982:A:ARG:CA	1:982:A:ARG:C	13	5.26
(1,68)	1:969:A:VAL:N	1:969:A:VAL:CA	1:969:A:VAL:C	1:970:A:ASP:N	23	5.26
(1,11)	1:930:A:THR:C	1:931:A:GLY:N	1:931:A:GLY:CA	1:931:A:GLY:C	8	5.26
(1,68)	1:969:A:VAL:N	1:969:A:VAL:CA	1:969:A:VAL:C	1:970:A:ASP:N	6	5.25
(1,11)	1:930:A:THR:C	1:931:A:GLY:N	1:931:A:GLY:CA	1:931:A:GLY:C	1	5.25
(1,16)	1:933:A:VAL:N	1:933:A:VAL:CA	1:933:A:VAL:C	1:934:A:LYS:N	17	5.24
(1,131)	1:1014:A:GLN:C	1:1015:A:GLN:N	1:1015:A:GLN:CA	1:1015:A:GLN:C	21	5.23
(1,88)	1:984:A:ILE:N	1:984:A:ILE:CA	1:984:A:ILE:C	1:985:A:GLU:N	13	5.23
(1,83)	1:981:A:HIS:C	1:982:A:ARG:N	1:982:A:ARG:CA	1:982:A:ARG:C	1	5.23
(1,12)	1:931:A:GLY:N	1:931:A:GLY:CA	1:931:A:GLY:C	1:932:A:LEU:N	13	5.23
(1,135)	1:1017:A:TYR:C	1:1018:A:LYS:N	1:1018:A:LYS:CA	1:1018:A:LYS:C	20	5.22
(1,123)	1:1005:A:ALA:C	1:1006:A:GLN:N	1:1006:A:GLN:CA	1:1006:A:GLN:C	15	5.21
(1,83)	1:981:A:HIS:C	1:982:A:ARG:N	1:982:A:ARG:CA	1:982:A:ARG:C	8	5.21
(1,54)	1:959:A:GLY:N	1:959:A:GLY:CA	1:959:A:GLY:C	1:960:A:LEU:N	12	5.21
(1,39)	1:951:A:TYR:C	1:952:A:VAL:N	1:952:A:VAL:CA	1:952:A:VAL:C	3	5.21
(1,23)	1:938:A:GLU:C	1:939:A:MET:N	1:939:A:MET:CA	1:939:A:MET:C	16	5.21

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,21)	1:937:A:ILE:C	1:938:A:GLU:N	1:938:A:GLU:CA	1:938:A:GLU:C	7	5.21
(1,166)	1:1033:A:LYS:N	1:1033:A:LYS:CA	1:1033:A:LYS:C	1:1034:A:ASN:N	9	5.2
(1,150)	1:1025:A:ALA:N	1:1025:A:ALA:CA	1:1025:A:ALA:C	1:1026:A:HIS:N	11	5.2
(1,101)	1:990:A:LEU:C	1:991:A:LEU:N	1:991:A:LEU:CA	1:991:A:LEU:C	22	5.2
(1,19)	1:934:A:LYS:C	1:935:A:ALA:N	1:935:A:ALA:CA	1:935:A:ALA:C	21	5.2
(1,178)	1:1042:A:ALA:N	1:1042:A:ALA:CA	1:1042:A:ALA:C	1:1043:A:ARG:N	21	5.19
(1,109)	1:995:A:LEU:C	1:996:A:ALA:N	1:996:A:ALA:CA	1:996:A:ALA:C	11	5.19
(1,94)	1:987:A:ALA:N	1:987:A:ALA:CA	1:987:A:ALA:C	1:988:A:GLN:N	11	5.19
(1,150)	1:1025:A:ALA:N	1:1025:A:ALA:CA	1:1025:A:ALA:C	1:1026:A:HIS:N	4	5.18
(1,123)	1:1005:A:ALA:C	1:1006:A:GLN:N	1:1006:A:GLN:CA	1:1006:A:GLN:C	8	5.17
(1,49)	1:956:A:LYS:C	1:957:A:GLU:N	1:957:A:GLU:CA	1:957:A:GLU:C	15	5.17
(1,7)	1:927:A:GLU:C	1:928:A:ASN:N	1:928:A:ASN:CA	1:928:A:ASN:C	19	5.17
(1,89)	1:984:A:ILE:C	1:985:A:GLU:N	1:985:A:GLU:CA	1:985:A:GLU:C	9	5.16
(1,52)	1:958:A:VAL:N	1:958:A:VAL:CA	1:958:A:VAL:C	1:959:A:GLY:N	25	5.16
(1,178)	1:1042:A:ALA:N	1:1042:A:ALA:CA	1:1042:A:ALA:C	1:1043:A:ARG:N	7	5.15
(1,169)	1:1034:A:ASN:C	1:1035:A:LEU:N	1:1035:A:LEU:CA	1:1035:A:LEU:C	20	5.15
(1,4)	1:925:A:VAL:N	1:925:A:VAL:CA	1:925:A:VAL:C	1:926:A:TYR:N	5	5.15
(1,179)	1:1042:A:ALA:C	1:1043:A:ARG:N	1:1043:A:ARG:CA	1:1043:A:ARG:C	25	5.14
(1,102)	1:991:A:LEU:N	1:991:A:LEU:CA	1:991:A:LEU:C	1:992:A:ASN:N	20	5.14
(1,60)	1:965:A:LEU:N	1:965:A:LEU:CA	1:965:A:LEU:C	1:966:A:LEU:N	2	5.14
(1,50)	1:957:A:GLU:N	1:957:A:GLU:CA	1:957:A:GLU:C	1:958:A:VAL:N	3	5.14
(1,120)	1:1004:A:LEU:N	1:1004:A:LEU:CA	1:1004:A:LEU:C	1:1005:A:ALA:N	2	5.13
(1,89)	1:984:A:ILE:C	1:985:A:GLU:N	1:985:A:GLU:CA	1:985:A:GLU:C	13	5.13
(1,50)	1:957:A:GLU:N	1:957:A:GLU:CA	1:957:A:GLU:C	1:958:A:VAL:N	20	5.13
(1,37)	1:948:A:PRO:C	1:949:A:GLU:N	1:949:A:GLU:CA	1:949:A:GLU:C	13	5.13
(1,19)	1:934:A:LYS:C	1:935:A:ALA:N	1:935:A:ALA:CA	1:935:A:ALA:C	4	5.12
(1,7)	1:927:A:GLU:C	1:928:A:ASN:N	1:928:A:ASN:CA	1:928:A:ASN:C	21	5.12
(1,124)	1:1006:A:GLN:N	1:1006:A:GLN:CA	1:1006:A:GLN:C	1:1007:A:GLN:N	9	5.1
(1,118)	1:1003:A:LYS:N	1:1003:A:LYS:CA	1:1003:A:LYS:C	1:1004:A:LEU:N	6	5.1
(1,105)	1:992:A:ASN:C	1:993:A:SER:N	1:993:A:SER:CA	1:993:A:SER:C	9	5.1
(1,68)	1:969:A:VAL:N	1:969:A:VAL:CA	1:969:A:VAL:C	1:970:A:ASP:N	19	5.09
(1,49)	1:956:A:LYS:C	1:957:A:GLU:N	1:957:A:GLU:CA	1:957:A:GLU:C	13	5.09
(1,157)	1:1028:A:LEU:C	1:1029:A:ALA:N	1:1029:A:ALA:CA	1:1029:A:ALA:C	3	5.08
(1,123)	1:1005:A:ALA:C	1:1006:A:GLN:N	1:1006:A:GLN:CA	1:1006:A:GLN:C	7	5.08
(1,122)	1:1005:A:ALA:N	1:1005:A:ALA:CA	1:1005:A:ALA:C	1:1006:A:GLN:N	1	5.08
(1,109)	1:995:A:LEU:C	1:996:A:ALA:N	1:996:A:ALA:CA	1:996:A:ALA:C	23	5.08
(1,7)	1:927:A:GLU:C	1:928:A:ASN:N	1:928:A:ASN:CA	1:928:A:ASN:C	3	5.08
(1,8)	1:928:A:ASN:N	1:928:A:ASN:CA	1:928:A:ASN:C	1:929:A:VAL:N	8	5.07
(1,139)	1:1019:A:LYS:C	1:1020:A:GLN:N	1:1020:A:GLN:CA	1:1020:A:GLN:C	11	5.06
(1,131)	1:1014:A:GLN:C	1:1015:A:GLN:N	1:1015:A:GLN:CA	1:1015:A:GLN:C	23	5.06
(1,39)	1:951:A:TYR:C	1:952:A:VAL:N	1:952:A:VAL:CA	1:952:A:VAL:C	5	5.06
(1,35)	1:947:A:PRO:C	1:948:A:PRO:N	1:948:A:PRO:CA	1:948:A:PRO:C	7	5.06
(1,11)	1:930:A:THR:C	1:931:A:GLY:N	1:931:A:GLY:CA	1:931:A:GLY:C	9	5.06
(1,181)	1:1043:A:ARG:C	1:1044:A:LEU:N	1:1044:A:LEU:CA	1:1044:A:LEU:C	13	5.05
(1,157)	1:1028:A:LEU:C	1:1029:A:ALA:N	1:1029:A:ALA:CA	1:1029:A:ALA:C	7	5.05
(1,123)	1:1005:A:ALA:C	1:1006:A:GLN:N	1:1006:A:GLN:CA	1:1006:A:GLN:C	23	5.05
(1,7)	1:927:A:GLU:C	1:928:A:ASN:N	1:928:A:ASN:CA	1:928:A:ASN:C	9	5.05
(1,178)	1:1042:A:ALA:N	1:1042:A:ALA:CA	1:1042:A:ALA:C	1:1043:A:ARG:N	17	5.04
(1,67)	1:968:A:THR:C	1:969:A:VAL:N	1:969:A:VAL:CA	1:969:A:VAL:C	5	5.04
(1,54)	1:959:A:GLY:N	1:959:A:GLY:CA	1:959:A:GLY:C	1:960:A:LEU:N	5	5.04
(1,30)	1:942:A:LYS:N	1:942:A:LYS:CA	1:942:A:LYS:C	1:943:A:ILE:N	13	5.04

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,54)	1:959:A:GLY:N	1:959:A:GLY:CA	1:959:A:GLY:C	1:960:A:LEU:N	19	5.03
(1,125)	1:1006:A:GLN:C	1:1007:A:GLN:N	1:1007:A:GLN:CA	1:1007:A:GLN:C	13	5.02
(1,49)	1:956:A:LYS:C	1:957:A:GLU:N	1:957:A:GLU:CA	1:957:A:GLU:C	8	5.02
(1,49)	1:956:A:LYS:C	1:957:A:GLU:N	1:957:A:GLU:CA	1:957:A:GLU:C	20	5.01
(1,37)	1:948:A:PRO:C	1:949:A:GLU:N	1:949:A:GLU:CA	1:949:A:GLU:C	11	5.01
(1,6)	1:926:A:TYR:N	1:926:A:TYR:CA	1:926:A:TYR:C	1:927:A:GLU:N	6	5.01
(1,89)	1:984:A:ILE:C	1:985:A:GLU:N	1:985:A:GLU:CA	1:985:A:GLU:C	10	5.0
(1,54)	1:959:A:GLY:N	1:959:A:GLY:CA	1:959:A:GLY:C	1:960:A:LEU:N	24	5.0
(1,157)	1:1028:A:LEU:C	1:1029:A:ALA:N	1:1029:A:ALA:CA	1:1029:A:ALA:C	2	4.98
(1,150)	1:1025:A:ALA:N	1:1025:A:ALA:CA	1:1025:A:ALA:C	1:1026:A:HIS:N	13	4.98
(1,11)	1:930:A:THR:C	1:931:A:GLY:N	1:931:A:GLY:CA	1:931:A:GLY:C	21	4.97
(1,157)	1:1028:A:LEU:C	1:1029:A:ALA:N	1:1029:A:ALA:CA	1:1029:A:ALA:C	20	4.96
(1,103)	1:991:A:LEU:C	1:992:A:ASN:N	1:992:A:ASN:CA	1:992:A:ASN:C	11	4.96
(1,37)	1:948:A:PRO:C	1:949:A:GLU:N	1:949:A:GLU:CA	1:949:A:GLU:C	7	4.95
(1,123)	1:1005:A:ALA:C	1:1006:A:GLN:N	1:1006:A:GLN:CA	1:1006:A:GLN:C	1	4.94
(1,96)	1:988:A:GLN:N	1:988:A:GLN:CA	1:988:A:GLN:C	1:989:A:LYS:N	22	4.94
(1,27)	1:940:A:SER:C	1:941:A:SER:N	1:941:A:SER:CA	1:941:A:SER:C	1	4.94
(1,180)	1:1043:A:ARG:N	1:1043:A:ARG:CA	1:1043:A:ARG:C	1:1044:A:LEU:N	19	4.93
(1,156)	1:1028:A:LEU:N	1:1028:A:LEU:CA	1:1028:A:LEU:C	1:1029:A:ALA:N	13	4.93
(1,11)	1:930:A:THR:C	1:931:A:GLY:N	1:931:A:GLY:CA	1:931:A:GLY:C	18	4.93
(1,179)	1:1042:A:ALA:C	1:1043:A:ARG:N	1:1043:A:ARG:CA	1:1043:A:ARG:C	9	4.92
(1,165)	1:1032:A:ALA:C	1:1033:A:LYS:N	1:1033:A:LYS:CA	1:1033:A:LYS:C	15	4.92
(1,157)	1:1028:A:LEU:C	1:1029:A:ALA:N	1:1029:A:ALA:CA	1:1029:A:ALA:C	24	4.92
(1,178)	1:1042:A:ALA:N	1:1042:A:ALA:CA	1:1042:A:ALA:C	1:1043:A:ARG:N	16	4.91
(1,89)	1:984:A:ILE:C	1:985:A:GLU:N	1:985:A:GLU:CA	1:985:A:GLU:C	11	4.91
(1,150)	1:1025:A:ALA:N	1:1025:A:ALA:CA	1:1025:A:ALA:C	1:1026:A:HIS:N	19	4.9
(1,53)	1:958:A:VAL:C	1:959:A:GLY:N	1:959:A:GLY:CA	1:959:A:GLY:C	25	4.9
(1,47)	1:955:A:VAL:C	1:956:A:LYS:N	1:956:A:LYS:CA	1:956:A:LYS:C	21	4.9
(1,122)	1:1005:A:ALA:N	1:1005:A:ALA:CA	1:1005:A:ALA:C	1:1006:A:GLN:N	9	4.89
(1,104)	1:992:A:ASN:N	1:992:A:ASN:CA	1:992:A:ASN:C	1:993:A:SER:N	14	4.89
(1,3)	1:924:A:LYS:C	1:925:A:VAL:N	1:925:A:VAL:CA	1:925:A:VAL:C	5	4.89
(1,3)	1:924:A:LYS:C	1:925:A:VAL:N	1:925:A:VAL:CA	1:925:A:VAL:C	12	4.89
(1,110)	1:996:A:ALA:N	1:996:A:ALA:CA	1:996:A:ALA:C	1:997:A:GLU:N	8	4.88
(1,94)	1:987:A:ALA:N	1:987:A:ALA:CA	1:987:A:ALA:C	1:988:A:GLN:N	17	4.88
(1,57)	1:960:A:LEU:C	1:961:A:ALA:N	1:961:A:ALA:CA	1:961:A:ALA:C	4	4.88
(1,181)	1:1043:A:ARG:C	1:1044:A:LEU:N	1:1044:A:LEU:CA	1:1044:A:LEU:C	23	4.87
(1,162)	1:1031:A:ASP:N	1:1031:A:ASP:CA	1:1031:A:ASP:C	1:1032:A:ALA:N	15	4.87
(1,164)	1:1032:A:ALA:N	1:1032:A:ALA:CA	1:1032:A:ALA:C	1:1033:A:LYS:N	19	4.86
(1,125)	1:1006:A:GLN:C	1:1007:A:GLN:N	1:1007:A:GLN:CA	1:1007:A:GLN:C	20	4.86
(1,11)	1:930:A:THR:C	1:931:A:GLY:N	1:931:A:GLY:CA	1:931:A:GLY:C	5	4.86
(1,156)	1:1028:A:LEU:N	1:1028:A:LEU:CA	1:1028:A:LEU:C	1:1029:A:ALA:N	23	4.85
(1,101)	1:990:A:LEU:C	1:991:A:LEU:N	1:991:A:LEU:CA	1:991:A:LEU:C	16	4.85
(1,133)	1:1015:A:GLN:C	1:1016:A:GLU:N	1:1016:A:GLU:CA	1:1016:A:GLU:C	11	4.84
(1,3)	1:924:A:LYS:C	1:925:A:VAL:N	1:925:A:VAL:CA	1:925:A:VAL:C	21	4.84
(1,110)	1:996:A:ALA:N	1:996:A:ALA:CA	1:996:A:ALA:C	1:997:A:GLU:N	23	4.83
(1,50)	1:957:A:GLU:N	1:957:A:GLU:CA	1:957:A:GLU:C	1:958:A:VAL:N	22	4.83
(1,5)	1:925:A:VAL:C	1:926:A:TYR:N	1:926:A:TYR:CA	1:926:A:TYR:C	21	4.83
(1,165)	1:1032:A:ALA:C	1:1033:A:LYS:N	1:1033:A:LYS:CA	1:1033:A:LYS:C	4	4.82
(1,8)	1:928:A:ASN:N	1:928:A:ASN:CA	1:928:A:ASN:C	1:929:A:VAL:N	14	4.82
(1,169)	1:1034:A:ASN:C	1:1035:A:LEU:N	1:1035:A:LEU:CA	1:1035:A:LEU:C	12	4.81
(1,11)	1:930:A:THR:C	1:931:A:GLY:N	1:931:A:GLY:CA	1:931:A:GLY:C	24	4.81

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,8)	1:928:A:ASN:N	1:928:A:ASN:CA	1:928:A:ASN:C	1:929:A:VAL:N	6	4.81
(1,162)	1:1031:A:ASP:N	1:1031:A:ASP:CA	1:1031:A:ASP:C	1:1032:A:ALA:N	25	4.8
(1,157)	1:1028:A:LEU:C	1:1029:A:ALA:N	1:1029:A:ALA:CA	1:1029:A:ALA:C	13	4.8
(1,64)	1:967:A:ALA:N	1:967:A:ALA:CA	1:967:A:ALA:C	1:968:A:THR:N	4	4.8
(1,49)	1:956:A:LYS:C	1:957:A:GLU:N	1:957:A:GLU:CA	1:957:A:GLU:C	1	4.8
(1,23)	1:938:A:GLU:C	1:939:A:MET:N	1:939:A:MET:CA	1:939:A:MET:C	17	4.8
(1,8)	1:928:A:ASN:N	1:928:A:ASN:CA	1:928:A:ASN:C	1:929:A:VAL:N	9	4.8
(1,8)	1:928:A:ASN:N	1:928:A:ASN:CA	1:928:A:ASN:C	1:929:A:VAL:N	18	4.8
(1,3)	1:924:A:LYS:C	1:925:A:VAL:N	1:925:A:VAL:CA	1:925:A:VAL:C	24	4.8
(1,115)	1:1001:A:LYS:C	1:1002:A:MET:N	1:1002:A:MET:CA	1:1002:A:MET:C	2	4.79
(1,68)	1:969:A:VAL:N	1:969:A:VAL:CA	1:969:A:VAL:C	1:970:A:ASP:N	25	4.79
(1,175)	1:1040:A:ASP:C	1:1041:A:GLN:N	1:1041:A:GLN:CA	1:1041:A:GLN:C	23	4.78
(1,137)	1:1018:A:LYS:C	1:1019:A:LYS:N	1:1019:A:LYS:CA	1:1019:A:LYS:C	4	4.78
(1,133)	1:1015:A:GLN:C	1:1016:A:GLU:N	1:1016:A:GLU:CA	1:1016:A:GLU:C	15	4.78
(1,112)	1:997:A:GLU:N	1:997:A:GLU:CA	1:997:A:GLU:C	1:998:A:LEU:N	1	4.78
(1,92)	1:986:A:MET:N	1:986:A:MET:CA	1:986:A:MET:C	1:987:A:ALA:N	3	4.78
(1,68)	1:969:A:VAL:N	1:969:A:VAL:CA	1:969:A:VAL:C	1:970:A:ASP:N	14	4.78
(1,11)	1:930:A:THR:C	1:931:A:GLY:N	1:931:A:GLY:CA	1:931:A:GLY:C	10	4.77
(1,129)	1:1013:A:LEU:C	1:1014:A:GLN:N	1:1014:A:GLN:CA	1:1014:A:GLN:C	8	4.76
(1,89)	1:984:A:ILE:C	1:985:A:GLU:N	1:985:A:GLU:CA	1:985:A:GLU:C	24	4.76
(1,49)	1:956:A:LYS:C	1:957:A:GLU:N	1:957:A:GLU:CA	1:957:A:GLU:C	25	4.76
(1,7)	1:927:A:GLU:C	1:928:A:ASN:N	1:928:A:ASN:CA	1:928:A:ASN:C	11	4.76
(1,38)	1:949:A:GLU:N	1:949:A:GLU:CA	1:949:A:GLU:C	1:950:A:GLU:N	4	4.75
(1,7)	1:927:A:GLU:C	1:928:A:ASN:N	1:928:A:ASN:CA	1:928:A:ASN:C	17	4.75
(1,162)	1:1031:A:ASP:N	1:1031:A:ASP:CA	1:1031:A:ASP:C	1:1032:A:ALA:N	4	4.74
(1,54)	1:959:A:GLY:N	1:959:A:GLY:CA	1:959:A:GLY:C	1:960:A:LEU:N	17	4.74
(1,22)	1:938:A:GLU:N	1:938:A:GLU:CA	1:938:A:GLU:C	1:939:A:MET:N	20	4.74
(1,11)	1:930:A:THR:C	1:931:A:GLY:N	1:931:A:GLY:CA	1:931:A:GLY:C	2	4.74
(1,150)	1:1025:A:ALA:N	1:1025:A:ALA:CA	1:1025:A:ALA:C	1:1026:A:HIS:N	7	4.73
(1,122)	1:1005:A:ALA:N	1:1005:A:ALA:CA	1:1005:A:ALA:C	1:1006:A:GLN:N	8	4.73
(1,3)	1:924:A:LYS:C	1:925:A:VAL:N	1:925:A:VAL:CA	1:925:A:VAL:C	25	4.73
(1,178)	1:1042:A:ALA:N	1:1042:A:ALA:CA	1:1042:A:ALA:C	1:1043:A:ARG:N	5	4.72
(1,105)	1:992:A:ASN:C	1:993:A:SER:N	1:993:A:SER:CA	1:993:A:SER:C	5	4.72
(1,54)	1:959:A:GLY:N	1:959:A:GLY:CA	1:959:A:GLY:C	1:960:A:LEU:N	23	4.72
(1,21)	1:937:A:ILE:C	1:938:A:GLU:N	1:938:A:GLU:CA	1:938:A:GLU:C	23	4.71
(1,17)	1:933:A:VAL:C	1:934:A:LYS:N	1:934:A:LYS:CA	1:934:A:LYS:C	17	4.71
(1,60)	1:965:A:LEU:N	1:965:A:LEU:CA	1:965:A:LEU:C	1:966:A:LEU:N	19	4.7
(1,49)	1:956:A:LYS:C	1:957:A:GLU:N	1:957:A:GLU:CA	1:957:A:GLU:C	24	4.7
(1,9)	1:928:A:ASN:C	1:929:A:VAL:N	1:929:A:VAL:CA	1:929:A:VAL:C	10	4.7
(1,113)	1:1000:A:ASN:C	1:1001:A:LYS:N	1:1001:A:LYS:CA	1:1001:A:LYS:C	8	4.69
(1,48)	1:956:A:LYS:N	1:956:A:LYS:CA	1:956:A:LYS:C	1:957:A:GLU:N	23	4.69
(1,11)	1:930:A:THR:C	1:931:A:GLY:N	1:931:A:GLY:CA	1:931:A:GLY:C	4	4.69
(1,137)	1:1018:A:LYS:C	1:1019:A:LYS:N	1:1019:A:LYS:CA	1:1019:A:LYS:C	25	4.68
(1,101)	1:990:A:LEU:C	1:991:A:LEU:N	1:991:A:LEU:CA	1:991:A:LEU:C	17	4.68
(1,54)	1:959:A:GLY:N	1:959:A:GLY:CA	1:959:A:GLY:C	1:960:A:LEU:N	1	4.68
(1,59)	1:964:A:THR:C	1:965:A:LEU:N	1:965:A:LEU:CA	1:965:A:LEU:C	22	4.67
(1,55)	1:959:A:GLY:C	1:960:A:LEU:N	1:960:A:LEU:CA	1:960:A:LEU:C	25	4.67
(1,31)	1:942:A:LYS:C	1:943:A:ILE:N	1:943:A:ILE:CA	1:943:A:ILE:C	6	4.67
(1,19)	1:934:A:LYS:C	1:935:A:ALA:N	1:935:A:ALA:CA	1:935:A:ALA:C	6	4.67
(1,12)	1:931:A:GLY:N	1:931:A:GLY:CA	1:931:A:GLY:C	1:932:A:LEU:N	2	4.67
(1,112)	1:997:A:GLU:N	1:997:A:GLU:CA	1:997:A:GLU:C	1:998:A:LEU:N	17	4.66

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,68)	1:969:A:VAL:N	1:969:A:VAL:CA	1:969:A:VAL:C	1:970:A:ASP:N	2	4.66
(1,54)	1:959:A:GLY:N	1:959:A:GLY:CA	1:959:A:GLY:C	1:960:A:LEU:N	4	4.66
(1,33)	1:943:A:ILE:C	1:944:A:GLN:N	1:944:A:GLN:CA	1:944:A:GLN:C	1	4.66
(1,4)	1:925:A:VAL:N	1:925:A:VAL:CA	1:925:A:VAL:C	1:926:A:TYR:N	4	4.66
(1,89)	1:984:A:ILE:C	1:985:A:GLU:N	1:985:A:GLU:CA	1:985:A:GLU:C	14	4.65
(1,175)	1:1040:A:ASP:C	1:1041:A:GLN:N	1:1041:A:GLN:CA	1:1041:A:GLN:C	9	4.64
(1,122)	1:1005:A:ALA:N	1:1005:A:ALA:CA	1:1005:A:ALA:C	1:1006:A:GLN:N	18	4.64
(1,117)	1:1002:A:MET:C	1:1003:A:LYS:N	1:1003:A:LYS:CA	1:1003:A:LYS:C	10	4.64
(1,94)	1:987:A:ALA:N	1:987:A:ALA:CA	1:987:A:ALA:C	1:988:A:GLN:N	18	4.64
(1,7)	1:927:A:GLU:C	1:928:A:ASN:N	1:928:A:ASN:CA	1:928:A:ASN:C	24	4.64
(1,50)	1:957:A:GLU:N	1:957:A:GLU:CA	1:957:A:GLU:C	1:958:A:VAL:N	10	4.63
(1,23)	1:938:A:GLU:C	1:939:A:MET:N	1:939:A:MET:CA	1:939:A:MET:C	22	4.63
(1,22)	1:938:A:GLU:N	1:938:A:GLU:CA	1:938:A:GLU:C	1:939:A:MET:N	19	4.63
(1,4)	1:925:A:VAL:N	1:925:A:VAL:CA	1:925:A:VAL:C	1:926:A:TYR:N	16	4.63
(1,132)	1:1015:A:GLN:N	1:1015:A:GLN:CA	1:1015:A:GLN:C	1:1016:A:GLU:N	2	4.62
(1,125)	1:1006:A:GLN:C	1:1007:A:GLN:N	1:1007:A:GLN:CA	1:1007:A:GLN:C	6	4.62
(1,68)	1:969:A:VAL:N	1:969:A:VAL:CA	1:969:A:VAL:C	1:970:A:ASP:N	16	4.61
(1,23)	1:938:A:GLU:C	1:939:A:MET:N	1:939:A:MET:CA	1:939:A:MET:C	5	4.61
(1,11)	1:930:A:THR:C	1:931:A:GLY:N	1:931:A:GLY:CA	1:931:A:GLY:C	25	4.61
(1,3)	1:924:A:LYS:C	1:925:A:VAL:N	1:925:A:VAL:CA	1:925:A:VAL:C	1	4.61
(1,3)	1:924:A:LYS:C	1:925:A:VAL:N	1:925:A:VAL:CA	1:925:A:VAL:C	8	4.61
(1,178)	1:1042:A:ALA:N	1:1042:A:ALA:CA	1:1042:A:ALA:C	1:1043:A:ARG:N	10	4.6
(1,78)	1:975:A:VAL:N	1:975:A:VAL:CA	1:975:A:VAL:C	1:976:A:LEU:N	20	4.6
(1,158)	1:1029:A:ALA:N	1:1029:A:ALA:CA	1:1029:A:ALA:C	1:1030:A:VAL:N	22	4.59
(1,119)	1:1003:A:LYS:C	1:1004:A:LEU:N	1:1004:A:LEU:CA	1:1004:A:LEU:C	24	4.59
(1,21)	1:937:A:ILE:C	1:938:A:GLU:N	1:938:A:GLU:CA	1:938:A:GLU:C	24	4.58
(1,13)	1:931:A:GLY:C	1:932:A:LEU:N	1:932:A:LEU:CA	1:932:A:LEU:C	21	4.58
(1,156)	1:1028:A:LEU:N	1:1028:A:LEU:CA	1:1028:A:LEU:C	1:1029:A:ALA:N	8	4.57
(1,89)	1:984:A:ILE:C	1:985:A:GLU:N	1:985:A:GLU:CA	1:985:A:GLU:C	3	4.57
(1,34)	1:944:A:GLN:N	1:944:A:GLN:CA	1:944:A:GLN:C	1:945:A:PRO:N	14	4.57
(1,122)	1:1005:A:ALA:N	1:1005:A:ALA:CA	1:1005:A:ALA:C	1:1006:A:GLN:N	24	4.56
(1,74)	1:973:A:LEU:N	1:973:A:LEU:CA	1:973:A:LEU:C	1:974:A:PRO:N	19	4.56
(1,11)	1:930:A:THR:C	1:931:A:GLY:N	1:931:A:GLY:CA	1:931:A:GLY:C	20	4.56
(1,145)	1:1022:A:LEU:C	1:1023:A:THR:N	1:1023:A:THR:CA	1:1023:A:THR:C	5	4.55
(1,55)	1:959:A:GLY:C	1:960:A:LEU:N	1:960:A:LEU:CA	1:960:A:LEU:C	16	4.55
(1,8)	1:928:A:ASN:N	1:928:A:ASN:CA	1:928:A:ASN:C	1:929:A:VAL:N	16	4.55
(1,169)	1:1034:A:ASN:C	1:1035:A:LEU:N	1:1035:A:LEU:CA	1:1035:A:LEU:C	6	4.54
(1,11)	1:930:A:THR:C	1:931:A:GLY:N	1:931:A:GLY:CA	1:931:A:GLY:C	19	4.54
(1,30)	1:942:A:LYS:N	1:942:A:LYS:CA	1:942:A:LYS:C	1:943:A:ILE:N	9	4.53
(1,54)	1:959:A:GLY:N	1:959:A:GLY:CA	1:959:A:GLY:C	1:960:A:LEU:N	6	4.52
(1,137)	1:1018:A:LYS:C	1:1019:A:LYS:N	1:1019:A:LYS:CA	1:1019:A:LYS:C	17	4.51
(1,79)	1:979:A:SER:C	1:980:A:THR:N	1:980:A:THR:CA	1:980:A:THR:C	13	4.51
(1,68)	1:969:A:VAL:N	1:969:A:VAL:CA	1:969:A:VAL:C	1:970:A:ASP:N	9	4.51
(1,122)	1:1005:A:ALA:N	1:1005:A:ALA:CA	1:1005:A:ALA:C	1:1006:A:GLN:N	15	4.5
(1,83)	1:981:A:HIS:C	1:982:A:ARG:N	1:982:A:ARG:CA	1:982:A:ARG:C	12	4.5
(1,40)	1:952:A:VAL:N	1:952:A:VAL:CA	1:952:A:VAL:C	1:953:A:PRO:N	18	4.5
(1,173)	1:1039:A:ILE:C	1:1040:A:ASP:N	1:1040:A:ASP:CA	1:1040:A:ASP:C	1	4.49
(1,68)	1:969:A:VAL:N	1:969:A:VAL:CA	1:969:A:VAL:C	1:970:A:ASP:N	22	4.49
(1,31)	1:942:A:LYS:C	1:943:A:ILE:N	1:943:A:ILE:CA	1:943:A:ILE:C	15	4.49
(1,110)	1:996:A:ALA:N	1:996:A:ALA:CA	1:996:A:ALA:C	1:997:A:GLU:N	19	4.48
(1,101)	1:990:A:LEU:C	1:991:A:LEU:N	1:991:A:LEU:CA	1:991:A:LEU:C	4	4.48

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,93)	1:986:A:MET:C	1:987:A:ALA:N	1:987:A:ALA:CA	1:987:A:ALA:C	4	4.48
(1,60)	1:965:A:LEU:N	1:965:A:LEU:CA	1:965:A:LEU:C	1:966:A:LEU:N	18	4.48
(1,105)	1:992:A:ASN:C	1:993:A:SER:N	1:993:A:SER:CA	1:993:A:SER:C	6	4.47
(1,135)	1:1017:A:TYR:C	1:1018:A:LYS:N	1:1018:A:LYS:CA	1:1018:A:LYS:C	17	4.46
(1,105)	1:992:A:ASN:C	1:993:A:SER:N	1:993:A:SER:CA	1:993:A:SER:C	24	4.46
(1,13)	1:931:A:GLY:C	1:932:A:LEU:N	1:932:A:LEU:CA	1:932:A:LEU:C	10	4.46
(1,11)	1:930:A:THR:C	1:931:A:GLY:N	1:931:A:GLY:CA	1:931:A:GLY:C	3	4.46
(1,74)	1:973:A:LEU:N	1:973:A:LEU:CA	1:973:A:LEU:C	1:974:A:PRO:N	7	4.45
(1,49)	1:956:A:LYS:C	1:957:A:GLU:N	1:957:A:GLU:CA	1:957:A:GLU:C	2	4.45
(1,39)	1:951:A:TYR:C	1:952:A:VAL:N	1:952:A:VAL:CA	1:952:A:VAL:C	7	4.45
(1,35)	1:947:A:PRO:C	1:948:A:PRO:N	1:948:A:PRO:CA	1:948:A:PRO:C	16	4.45
(1,8)	1:928:A:ASN:N	1:928:A:ASN:CA	1:928:A:ASN:C	1:929:A:VAL:N	19	4.45
(1,164)	1:1032:A:ALA:N	1:1032:A:ALA:CA	1:1032:A:ALA:C	1:1033:A:LYS:N	20	4.44
(1,106)	1:993:A:SER:N	1:993:A:SER:CA	1:993:A:SER:C	1:994:A:ASP:N	22	4.44
(1,94)	1:987:A:ALA:N	1:987:A:ALA:CA	1:987:A:ALA:C	1:988:A:GLN:N	19	4.43
(1,87)	1:983:A:GLU:C	1:984:A:ILE:N	1:984:A:ILE:CA	1:984:A:ILE:C	21	4.43
(1,13)	1:931:A:GLY:C	1:932:A:LEU:N	1:932:A:LEU:CA	1:932:A:LEU:C	16	4.43
(1,107)	1:994:A:ASP:C	1:995:A:LEU:N	1:995:A:LEU:CA	1:995:A:LEU:C	5	4.42
(1,49)	1:956:A:LYS:C	1:957:A:GLU:N	1:957:A:GLU:CA	1:957:A:GLU:C	21	4.42
(1,178)	1:1042:A:ALA:N	1:1042:A:ALA:CA	1:1042:A:ALA:C	1:1043:A:ARG:N	15	4.41
(1,167)	1:1033:A:LYS:C	1:1034:A:ASN:N	1:1034:A:ASN:CA	1:1034:A:ASN:C	19	4.4
(1,152)	1:1026:A:HIS:N	1:1026:A:HIS:CA	1:1026:A:HIS:C	1:1027:A:ALA:N	9	4.4
(1,151)	1:1025:A:ALA:C	1:1026:A:HIS:N	1:1026:A:HIS:CA	1:1026:A:HIS:C	9	4.4
(1,139)	1:1019:A:LYS:C	1:1020:A:GLN:N	1:1020:A:GLN:CA	1:1020:A:GLN:C	22	4.4
(1,50)	1:957:A:GLU:N	1:957:A:GLU:CA	1:957:A:GLU:C	1:958:A:VAL:N	11	4.4
(1,21)	1:937:A:ILE:C	1:938:A:GLU:N	1:938:A:GLU:CA	1:938:A:GLU:C	10	4.4
(1,8)	1:928:A:ASN:N	1:928:A:ASN:CA	1:928:A:ASN:C	1:929:A:VAL:N	2	4.4
(1,134)	1:1016:A:GLU:N	1:1016:A:GLU:CA	1:1016:A:GLU:C	1:1017:A:TYR:N	24	4.39
(1,98)	1:989:A:LYS:N	1:989:A:LYS:CA	1:989:A:LYS:C	1:990:A:LEU:N	15	4.39
(1,24)	1:939:A:MET:N	1:939:A:MET:CA	1:939:A:MET:C	1:940:A:SER:N	15	4.39
(1,11)	1:930:A:THR:C	1:931:A:GLY:N	1:931:A:GLY:CA	1:931:A:GLY:C	13	4.39
(1,176)	1:1041:A:GLN:N	1:1041:A:GLN:CA	1:1041:A:GLN:C	1:1042:A:ALA:N	7	4.38
(1,142)	1:1021:A:MET:N	1:1021:A:MET:CA	1:1021:A:MET:C	1:1022:A:LEU:N	16	4.38
(1,105)	1:992:A:ASN:C	1:993:A:SER:N	1:993:A:SER:CA	1:993:A:SER:C	20	4.38
(1,11)	1:930:A:THR:C	1:931:A:GLY:N	1:931:A:GLY:CA	1:931:A:GLY:C	12	4.38
(1,9)	1:928:A:ASN:C	1:929:A:VAL:N	1:929:A:VAL:CA	1:929:A:VAL:C	5	4.38
(1,109)	1:995:A:LEU:C	1:996:A:ALA:N	1:996:A:ALA:CA	1:996:A:ALA:C	8	4.37
(1,14)	1:932:A:LEU:N	1:932:A:LEU:CA	1:932:A:LEU:C	1:933:A:VAL:N	16	4.37
(1,39)	1:951:A:TYR:C	1:952:A:VAL:N	1:952:A:VAL:CA	1:952:A:VAL:C	9	4.36
(1,141)	1:1020:A:GLN:C	1:1021:A:MET:N	1:1021:A:MET:CA	1:1021:A:MET:C	25	4.35
(1,61)	1:965:A:LEU:C	1:966:A:LEU:N	1:966:A:LEU:CA	1:966:A:LEU:C	9	4.35
(1,180)	1:1043:A:ARG:N	1:1043:A:ARG:CA	1:1043:A:ARG:C	1:1044:A:LEU:N	5	4.34
(1,176)	1:1041:A:GLN:N	1:1041:A:GLN:CA	1:1041:A:GLN:C	1:1042:A:ALA:N	23	4.34
(1,112)	1:997:A:GLU:N	1:997:A:GLU:CA	1:997:A:GLU:C	1:998:A:LEU:N	3	4.34
(1,50)	1:957:A:GLU:N	1:957:A:GLU:CA	1:957:A:GLU:C	1:958:A:VAL:N	2	4.34
(1,70)	1:970:A:ASP:N	1:970:A:ASP:CA	1:970:A:ASP:C	1:971:A:GLU:N	4	4.33
(1,8)	1:928:A:ASN:N	1:928:A:ASN:CA	1:928:A:ASN:C	1:929:A:VAL:N	3	4.33
(1,39)	1:951:A:TYR:C	1:952:A:VAL:N	1:952:A:VAL:CA	1:952:A:VAL:C	1	4.32
(1,89)	1:984:A:ILE:C	1:985:A:GLU:N	1:985:A:GLU:CA	1:985:A:GLU:C	16	4.31
(1,50)	1:957:A:GLU:N	1:957:A:GLU:CA	1:957:A:GLU:C	1:958:A:VAL:N	1	4.31
(1,176)	1:1041:A:GLN:N	1:1041:A:GLN:CA	1:1041:A:GLN:C	1:1042:A:ALA:N	16	4.3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,175)	1:1040:A:ASP:C	1:1041:A:GLN:N	1:1041:A:GLN:CA	1:1041:A:GLN:C	1	4.3
(1,169)	1:1034:A:ASN:C	1:1035:A:LEU:N	1:1035:A:LEU:CA	1:1035:A:LEU:C	10	4.29
(1,60)	1:965:A:LEU:N	1:965:A:LEU:CA	1:965:A:LEU:C	1:966:A:LEU:N	5	4.29
(1,61)	1:965:A:LEU:C	1:966:A:LEU:N	1:966:A:LEU:CA	1:966:A:LEU:C	16	4.28
(1,19)	1:934:A:LYS:C	1:935:A:ALA:N	1:935:A:ALA:CA	1:935:A:ALA:C	18	4.27
(1,38)	1:949:A:GLU:N	1:949:A:GLU:CA	1:949:A:GLU:C	1:950:A:GLU:N	3	4.26
(1,22)	1:938:A:GLU:N	1:938:A:GLU:CA	1:938:A:GLU:C	1:939:A:MET:N	22	4.26
(1,131)	1:1014:A:GLN:C	1:1015:A:GLN:N	1:1015:A:GLN:CA	1:1015:A:GLN:C	18	4.25
(1,111)	1:996:A:ALA:C	1:997:A:GLU:N	1:997:A:GLU:CA	1:997:A:GLU:C	20	4.25
(1,49)	1:956:A:LYS:C	1:957:A:GLU:N	1:957:A:GLU:CA	1:957:A:GLU:C	6	4.25
(1,117)	1:1002:A:MET:C	1:1003:A:LYS:N	1:1003:A:LYS:CA	1:1003:A:LYS:C	2	4.24
(1,35)	1:947:A:PRO:C	1:948:A:PRO:N	1:948:A:PRO:CA	1:948:A:PRO:C	24	4.24
(1,11)	1:930:A:THR:C	1:931:A:GLY:N	1:931:A:GLY:CA	1:931:A:GLY:C	6	4.24
(1,139)	1:1019:A:LYS:C	1:1020:A:GLN:N	1:1020:A:GLN:CA	1:1020:A:GLN:C	9	4.23
(1,137)	1:1018:A:LYS:C	1:1019:A:LYS:N	1:1019:A:LYS:CA	1:1019:A:LYS:C	13	4.23
(1,137)	1:1018:A:LYS:C	1:1019:A:LYS:N	1:1019:A:LYS:CA	1:1019:A:LYS:C	22	4.23
(1,24)	1:939:A:MET:N	1:939:A:MET:CA	1:939:A:MET:C	1:940:A:SER:N	7	4.23
(1,129)	1:1013:A:LEU:C	1:1014:A:GLN:N	1:1014:A:GLN:CA	1:1014:A:GLN:C	2	4.22
(1,106)	1:993:A:SER:N	1:993:A:SER:CA	1:993:A:SER:C	1:994:A:ASP:N	17	4.22
(1,95)	1:987:A:ALA:C	1:988:A:GLN:N	1:988:A:GLN:CA	1:988:A:GLN:C	9	4.22
(1,92)	1:986:A:MET:N	1:986:A:MET:CA	1:986:A:MET:C	1:987:A:ALA:N	9	4.22
(1,13)	1:931:A:GLY:C	1:932:A:LEU:N	1:932:A:LEU:CA	1:932:A:LEU:C	4	4.22
(1,172)	1:1036:A:LEU:N	1:1036:A:LEU:CA	1:1036:A:LEU:C	1:1037:A:ASP:N	23	4.21
(1,142)	1:1021:A:MET:N	1:1021:A:MET:CA	1:1021:A:MET:C	1:1022:A:LEU:N	3	4.21
(1,89)	1:984:A:ILE:C	1:985:A:GLU:N	1:985:A:GLU:CA	1:985:A:GLU:C	6	4.21
(1,87)	1:983:A:GLU:C	1:984:A:ILE:N	1:984:A:ILE:CA	1:984:A:ILE:C	24	4.21
(1,34)	1:944:A:GLN:N	1:944:A:GLN:CA	1:944:A:GLN:C	1:945:A:PRO:N	6	4.2
(1,29)	1:941:A:SER:C	1:942:A:LYS:N	1:942:A:LYS:CA	1:942:A:LYS:C	8	4.2
(1,165)	1:1032:A:ALA:C	1:1033:A:LYS:N	1:1033:A:LYS:CA	1:1033:A:LYS:C	8	4.19
(1,112)	1:997:A:GLU:N	1:997:A:GLU:CA	1:997:A:GLU:C	1:998:A:LEU:N	24	4.19
(1,105)	1:992:A:ASN:C	1:993:A:SER:N	1:993:A:SER:CA	1:993:A:SER:C	12	4.19
(1,9)	1:928:A:ASN:C	1:929:A:VAL:N	1:929:A:VAL:CA	1:929:A:VAL:C	14	4.19
(1,125)	1:1006:A:GLN:C	1:1007:A:GLN:N	1:1007:A:GLN:CA	1:1007:A:GLN:C	22	4.16
(1,105)	1:992:A:ASN:C	1:993:A:SER:N	1:993:A:SER:CA	1:993:A:SER:C	4	4.16
(1,98)	1:989:A:LYS:N	1:989:A:LYS:CA	1:989:A:LYS:C	1:990:A:LEU:N	6	4.15
(1,68)	1:969:A:VAL:N	1:969:A:VAL:CA	1:969:A:VAL:C	1:970:A:ASP:N	21	4.15
(1,164)	1:1032:A:ALA:N	1:1032:A:ALA:CA	1:1032:A:ALA:C	1:1033:A:LYS:N	2	4.14
(1,158)	1:1029:A:ALA:N	1:1029:A:ALA:CA	1:1029:A:ALA:C	1:1030:A:VAL:N	2	4.14
(1,32)	1:943:A:ILE:N	1:943:A:ILE:CA	1:943:A:ILE:C	1:944:A:GLN:N	21	4.14
(1,9)	1:928:A:ASN:C	1:929:A:VAL:N	1:929:A:VAL:CA	1:929:A:VAL:C	2	4.14
(1,169)	1:1034:A:ASN:C	1:1035:A:LEU:N	1:1035:A:LEU:CA	1:1035:A:LEU:C	15	4.13
(1,33)	1:943:A:ILE:C	1:944:A:GLN:N	1:944:A:GLN:CA	1:944:A:GLN:C	14	4.13
(1,169)	1:1034:A:ASN:C	1:1035:A:LEU:N	1:1035:A:LEU:CA	1:1035:A:LEU:C	19	4.12
(1,150)	1:1025:A:ALA:N	1:1025:A:ALA:CA	1:1025:A:ALA:C	1:1026:A:HIS:N	5	4.12
(1,74)	1:973:A:LEU:N	1:973:A:LEU:CA	1:973:A:LEU:C	1:974:A:PRO:N	18	4.12
(1,70)	1:970:A:ASP:N	1:970:A:ASP:CA	1:970:A:ASP:C	1:971:A:GLU:N	10	4.12
(1,39)	1:951:A:TYR:C	1:952:A:VAL:N	1:952:A:VAL:CA	1:952:A:VAL:C	11	4.12
(1,179)	1:1042:A:ALA:C	1:1043:A:ARG:N	1:1043:A:ARG:CA	1:1043:A:ARG:C	7	4.1
(1,169)	1:1034:A:ASN:C	1:1035:A:LEU:N	1:1035:A:LEU:CA	1:1035:A:LEU:C	5	4.1
(1,167)	1:1033:A:LYS:C	1:1034:A:ASN:N	1:1034:A:ASN:CA	1:1034:A:ASN:C	11	4.1
(1,162)	1:1031:A:ASP:N	1:1031:A:ASP:CA	1:1031:A:ASP:C	1:1032:A:ALA:N	18	4.1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,142)	1:1021:A:MET:N	1:1021:A:MET:CA	1:1021:A:MET:C	1:1022:A:LEU:N	5	4.1
(1,117)	1:1002:A:MET:C	1:1003:A:LYS:N	1:1003:A:LYS:CA	1:1003:A:LYS:C	4	4.1
(1,50)	1:957:A:GLU:N	1:957:A:GLU:CA	1:957:A:GLU:C	1:958:A:VAL:N	8	4.1
(1,21)	1:937:A:ILE:C	1:938:A:GLU:N	1:938:A:GLU:CA	1:938:A:GLU:C	13	4.1
(1,23)	1:938:A:GLU:C	1:939:A:MET:N	1:939:A:MET:CA	1:939:A:MET:C	10	4.09
(1,89)	1:984:A:ILE:C	1:985:A:GLU:N	1:985:A:GLU:CA	1:985:A:GLU:C	8	4.08
(1,85)	1:982:A:ARG:C	1:983:A:GLU:N	1:983:A:GLU:CA	1:983:A:GLU:C	17	4.08
(1,167)	1:1033:A:LYS:C	1:1034:A:ASN:N	1:1034:A:ASN:CA	1:1034:A:ASN:C	3	4.07
(1,66)	1:968:A:THR:N	1:968:A:THR:CA	1:968:A:THR:C	1:969:A:VAL:N	12	4.07
(1,13)	1:931:A:GLY:C	1:932:A:LEU:N	1:932:A:LEU:CA	1:932:A:LEU:C	11	4.07
(1,135)	1:1017:A:TYR:C	1:1018:A:LYS:N	1:1018:A:LYS:CA	1:1018:A:LYS:C	24	4.06
(1,85)	1:982:A:ARG:C	1:983:A:GLU:N	1:983:A:GLU:CA	1:983:A:GLU:C	15	4.05
(1,43)	1:953:A:PRO:C	1:954:A:MET:N	1:954:A:MET:CA	1:954:A:MET:C	5	4.05
(1,14)	1:932:A:LEU:N	1:932:A:LEU:CA	1:932:A:LEU:C	1:933:A:VAL:N	2	4.05
(1,171)	1:1035:A:LEU:C	1:1036:A:LEU:N	1:1036:A:LEU:CA	1:1036:A:LEU:C	15	4.04
(1,130)	1:1014:A:GLN:N	1:1014:A:GLN:CA	1:1014:A:GLN:C	1:1015:A:GLN:N	25	4.04
(1,119)	1:1003:A:LYS:C	1:1004:A:LEU:N	1:1004:A:LEU:CA	1:1004:A:LEU:C	21	4.03
(1,83)	1:981:A:HIS:C	1:982:A:ARG:N	1:982:A:ARG:CA	1:982:A:ARG:C	5	4.03
(1,73)	1:972:A:SER:C	1:973:A:LEU:N	1:973:A:LEU:CA	1:973:A:LEU:C	14	4.03
(1,23)	1:938:A:GLU:C	1:939:A:MET:N	1:939:A:MET:CA	1:939:A:MET:C	4	4.03
(1,15)	1:932:A:LEU:C	1:933:A:VAL:N	1:933:A:VAL:CA	1:933:A:VAL:C	22	4.03
(1,163)	1:1031:A:ASP:C	1:1032:A:ALA:N	1:1032:A:ALA:CA	1:1032:A:ALA:C	19	4.02
(1,39)	1:951:A:TYR:C	1:952:A:VAL:N	1:952:A:VAL:CA	1:952:A:VAL:C	23	4.02
(1,24)	1:939:A:MET:N	1:939:A:MET:CA	1:939:A:MET:C	1:940:A:SER:N	4	4.02
(1,68)	1:969:A:VAL:N	1:969:A:VAL:CA	1:969:A:VAL:C	1:970:A:ASP:N	4	4.01
(1,33)	1:943:A:ILE:C	1:944:A:GLN:N	1:944:A:GLN:CA	1:944:A:GLN:C	3	4.01
(1,21)	1:937:A:ILE:C	1:938:A:GLU:N	1:938:A:GLU:CA	1:938:A:GLU:C	9	4.01
(1,89)	1:984:A:ILE:C	1:985:A:GLU:N	1:985:A:GLU:CA	1:985:A:GLU:C	7	4.0
(1,13)	1:931:A:GLY:C	1:932:A:LEU:N	1:932:A:LEU:CA	1:932:A:LEU:C	19	4.0
(1,78)	1:975:A:VAL:N	1:975:A:VAL:CA	1:975:A:VAL:C	1:976:A:LEU:N	13	3.99
(1,147)	1:1023:A:THR:C	1:1024:A:ALA:N	1:1024:A:ALA:CA	1:1024:A:ALA:C	1	3.98
(1,95)	1:987:A:ALA:C	1:988:A:GLN:N	1:988:A:GLN:CA	1:988:A:GLN:C	20	3.98
(1,55)	1:959:A:GLY:C	1:960:A:LEU:N	1:960:A:LEU:CA	1:960:A:LEU:C	1	3.98
(1,47)	1:955:A:VAL:C	1:956:A:LYS:N	1:956:A:LYS:CA	1:956:A:LYS:C	10	3.98
(1,15)	1:932:A:LEU:C	1:933:A:VAL:N	1:933:A:VAL:CA	1:933:A:VAL:C	15	3.98
(1,122)	1:1005:A:ALA:N	1:1005:A:ALA:CA	1:1005:A:ALA:C	1:1006:A:GLN:N	12	3.96
(1,107)	1:994:A:ASP:C	1:995:A:LEU:N	1:995:A:LEU:CA	1:995:A:LEU:C	24	3.96
(1,88)	1:984:A:ILE:N	1:984:A:ILE:CA	1:984:A:ILE:C	1:985:A:GLU:N	15	3.96
(1,102)	1:991:A:LEU:N	1:991:A:LEU:CA	1:991:A:LEU:C	1:992:A:ASN:N	12	3.95
(1,19)	1:934:A:LYS:C	1:935:A:ALA:N	1:935:A:ALA:CA	1:935:A:ALA:C	3	3.95
(1,115)	1:1001:A:LYS:C	1:1002:A:MET:N	1:1002:A:MET:CA	1:1002:A:MET:C	25	3.94
(1,19)	1:934:A:LYS:C	1:935:A:ALA:N	1:935:A:ALA:CA	1:935:A:ALA:C	2	3.94
(1,83)	1:981:A:HIS:C	1:982:A:ARG:N	1:982:A:ARG:CA	1:982:A:ARG:C	21	3.93
(1,6)	1:926:A:TYR:N	1:926:A:TYR:CA	1:926:A:TYR:C	1:927:A:GLU:N	13	3.93
(1,155)	1:1027:A:ALA:C	1:1028:A:LEU:N	1:1028:A:LEU:CA	1:1028:A:LEU:C	24	3.92
(1,50)	1:957:A:GLU:N	1:957:A:GLU:CA	1:957:A:GLU:C	1:958:A:VAL:N	25	3.92
(1,35)	1:947:A:PRO:C	1:948:A:PRO:N	1:948:A:PRO:CA	1:948:A:PRO:C	2	3.92
(1,3)	1:924:A:LYS:C	1:925:A:VAL:N	1:925:A:VAL:CA	1:925:A:VAL:C	6	3.92
(1,122)	1:1005:A:ALA:N	1:1005:A:ALA:CA	1:1005:A:ALA:C	1:1006:A:GLN:N	6	3.91
(1,110)	1:996:A:ALA:N	1:996:A:ALA:CA	1:996:A:ALA:C	1:997:A:GLU:N	9	3.91
(1,183)	1:1044:A:LEU:C	1:1045:A:LYS:N	1:1045:A:LYS:CA	1:1045:A:LYS:C	8	3.9

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,54)	1:959:A:GLY:N	1:959:A:GLY:CA	1:959:A:GLY:C	1:960:A:LEU:N	11	3.9
(1,47)	1:955:A:VAL:C	1:956:A:LYS:N	1:956:A:LYS:CA	1:956:A:LYS:C	17	3.9
(1,41)	1:952:A:VAL:C	1:953:A:PRO:N	1:953:A:PRO:CA	1:953:A:PRO:C	4	3.88
(1,12)	1:931:A:GLY:N	1:931:A:GLY:CA	1:931:A:GLY:C	1:932:A:LEU:N	8	3.87
(1,9)	1:928:A:ASN:C	1:929:A:VAL:N	1:929:A:VAL:CA	1:929:A:VAL:C	25	3.87
(1,21)	1:937:A:ILE:C	1:938:A:GLU:N	1:938:A:GLU:CA	1:938:A:GLU:C	2	3.86
(1,181)	1:1043:A:ARG:C	1:1044:A:LEU:N	1:1044:A:LEU:CA	1:1044:A:LEU:C	19	3.84
(1,92)	1:986:A:MET:N	1:986:A:MET:CA	1:986:A:MET:C	1:987:A:ALA:N	22	3.84
(1,69)	1:969:A:VAL:C	1:970:A:ASP:N	1:970:A:ASP:CA	1:970:A:ASP:C	12	3.84
(1,50)	1:957:A:GLU:N	1:957:A:GLU:CA	1:957:A:GLU:C	1:958:A:VAL:N	12	3.84
(1,120)	1:1004:A:LEU:N	1:1004:A:LEU:CA	1:1004:A:LEU:C	1:1005:A:ALA:N	24	3.83
(1,104)	1:992:A:ASN:N	1:992:A:ASN:CA	1:992:A:ASN:C	1:993:A:SER:N	2	3.83
(1,139)	1:1019:A:LYS:C	1:1020:A:GLN:N	1:1020:A:GLN:CA	1:1020:A:GLN:C	24	3.82
(1,7)	1:927:A:GLU:C	1:928:A:ASN:N	1:928:A:ASN:CA	1:928:A:ASN:C	2	3.82
(1,158)	1:1029:A:ALA:N	1:1029:A:ALA:CA	1:1029:A:ALA:C	1:1030:A:VAL:N	17	3.81
(1,149)	1:1024:A:ALA:C	1:1025:A:ALA:N	1:1025:A:ALA:CA	1:1025:A:ALA:C	14	3.81
(1,11)	1:930:A:THR:C	1:931:A:GLY:N	1:931:A:GLY:CA	1:931:A:GLY:C	15	3.81
(1,108)	1:995:A:LEU:N	1:995:A:LEU:CA	1:995:A:LEU:C	1:996:A:ALA:N	22	3.8
(1,102)	1:991:A:LEU:N	1:991:A:LEU:CA	1:991:A:LEU:C	1:992:A:ASN:N	1	3.8
(1,74)	1:973:A:LEU:N	1:973:A:LEU:CA	1:973:A:LEU:C	1:974:A:PRO:N	16	3.79
(1,161)	1:1030:A:VAL:C	1:1031:A:ASP:N	1:1031:A:ASP:CA	1:1031:A:ASP:C	8	3.78
(1,107)	1:994:A:ASP:C	1:995:A:LEU:N	1:995:A:LEU:CA	1:995:A:LEU:C	7	3.78
(1,87)	1:983:A:GLU:C	1:984:A:ILE:N	1:984:A:ILE:CA	1:984:A:ILE:C	11	3.78
(1,180)	1:1043:A:ARG:N	1:1043:A:ARG:CA	1:1043:A:ARG:C	1:1044:A:LEU:N	12	3.77
(1,177)	1:1041:A:GLN:C	1:1042:A:ALA:N	1:1042:A:ALA:CA	1:1042:A:ALA:C	10	3.77
(1,101)	1:990:A:LEU:C	1:991:A:LEU:N	1:991:A:LEU:CA	1:991:A:LEU:C	11	3.77
(1,44)	1:954:A:MET:N	1:954:A:MET:CA	1:954:A:MET:C	1:955:A:VAL:N	15	3.77
(1,106)	1:993:A:SER:N	1:993:A:SER:CA	1:993:A:SER:C	1:994:A:ASP:N	18	3.76
(1,5)	1:925:A:VAL:C	1:926:A:TYR:N	1:926:A:TYR:CA	1:926:A:TYR:C	16	3.76
(1,170)	1:1035:A:LEU:N	1:1035:A:LEU:CA	1:1035:A:LEU:C	1:1036:A:LEU:N	12	3.75
(1,66)	1:968:A:THR:N	1:968:A:THR:CA	1:968:A:THR:C	1:969:A:VAL:N	25	3.74
(1,35)	1:947:A:PRO:C	1:948:A:PRO:N	1:948:A:PRO:CA	1:948:A:PRO:C	6	3.74
(1,23)	1:938:A:GLU:C	1:939:A:MET:N	1:939:A:MET:CA	1:939:A:MET:C	9	3.74
(1,174)	1:1040:A:ASP:N	1:1040:A:ASP:CA	1:1040:A:ASP:C	1:1041:A:GLN:N	7	3.73
(1,129)	1:1013:A:LEU:C	1:1014:A:GLN:N	1:1014:A:GLN:CA	1:1014:A:GLN:C	11	3.73
(1,50)	1:957:A:GLU:N	1:957:A:GLU:CA	1:957:A:GLU:C	1:958:A:VAL:N	21	3.73
(1,19)	1:934:A:LYS:C	1:935:A:ALA:N	1:935:A:ALA:CA	1:935:A:ALA:C	10	3.73
(1,19)	1:934:A:LYS:C	1:935:A:ALA:N	1:935:A:ALA:CA	1:935:A:ALA:C	15	3.73
(1,78)	1:975:A:VAL:N	1:975:A:VAL:CA	1:975:A:VAL:C	1:976:A:LEU:N	9	3.72
(1,35)	1:947:A:PRO:C	1:948:A:PRO:N	1:948:A:PRO:CA	1:948:A:PRO:C	10	3.72
(1,33)	1:943:A:ILE:C	1:944:A:GLN:N	1:944:A:GLN:CA	1:944:A:GLN:C	16	3.72
(1,170)	1:1035:A:LEU:N	1:1035:A:LEU:CA	1:1035:A:LEU:C	1:1036:A:LEU:N	25	3.71
(1,66)	1:968:A:THR:N	1:968:A:THR:CA	1:968:A:THR:C	1:969:A:VAL:N	24	3.71
(1,145)	1:1022:A:LEU:C	1:1023:A:THR:N	1:1023:A:THR:CA	1:1023:A:THR:C	16	3.7
(1,176)	1:1041:A:GLN:N	1:1041:A:GLN:CA	1:1041:A:GLN:C	1:1042:A:ALA:N	12	3.69
(1,50)	1:957:A:GLU:N	1:957:A:GLU:CA	1:957:A:GLU:C	1:958:A:VAL:N	6	3.69
(1,50)	1:957:A:GLU:N	1:957:A:GLU:CA	1:957:A:GLU:C	1:958:A:VAL:N	19	3.69
(1,154)	1:1027:A:ALA:N	1:1027:A:ALA:CA	1:1027:A:ALA:C	1:1028:A:LEU:N	16	3.68
(1,117)	1:1002:A:MET:C	1:1003:A:LYS:N	1:1003:A:LYS:CA	1:1003:A:LYS:C	21	3.67
(1,60)	1:965:A:LEU:N	1:965:A:LEU:CA	1:965:A:LEU:C	1:966:A:LEU:N	21	3.67
(1,179)	1:1042:A:ALA:C	1:1043:A:ARG:N	1:1043:A:ARG:CA	1:1043:A:ARG:C	24	3.66

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,114)	1:1001:A:LYS:N	1:1001:A:LYS:CA	1:1001:A:LYS:C	1:1002:A:MET:N	4	3.66
(1,105)	1:992:A:ASN:C	1:993:A:SER:N	1:993:A:SER:CA	1:993:A:SER:C	23	3.66
(1,23)	1:938:A:GLU:C	1:939:A:MET:N	1:939:A:MET:CA	1:939:A:MET:C	2	3.66
(1,78)	1:975:A:VAL:N	1:975:A:VAL:CA	1:975:A:VAL:C	1:976:A:LEU:N	8	3.65
(1,173)	1:1039:A:ILE:C	1:1040:A:ASP:N	1:1040:A:ASP:CA	1:1040:A:ASP:C	25	3.64
(1,164)	1:1032:A:ALA:N	1:1032:A:ALA:CA	1:1032:A:ALA:C	1:1033:A:LYS:N	6	3.63
(1,143)	1:1021:A:MET:C	1:1022:A:LEU:N	1:1022:A:LEU:CA	1:1022:A:LEU:C	7	3.63
(1,118)	1:1003:A:LYS:N	1:1003:A:LYS:CA	1:1003:A:LYS:C	1:1004:A:LEU:N	13	3.63
(1,60)	1:965:A:LEU:N	1:965:A:LEU:CA	1:965:A:LEU:C	1:966:A:LEU:N	6	3.63
(1,157)	1:1028:A:LEU:C	1:1029:A:ALA:N	1:1029:A:ALA:CA	1:1029:A:ALA:C	18	3.62
(1,129)	1:1013:A:LEU:C	1:1014:A:GLN:N	1:1014:A:GLN:CA	1:1014:A:GLN:C	20	3.62
(1,70)	1:970:A:ASP:N	1:970:A:ASP:CA	1:970:A:ASP:C	1:971:A:GLU:N	11	3.62
(1,69)	1:969:A:VAL:C	1:970:A:ASP:N	1:970:A:ASP:CA	1:970:A:ASP:C	5	3.61
(1,95)	1:987:A:ALA:C	1:988:A:GLN:N	1:988:A:GLN:CA	1:988:A:GLN:C	4	3.6
(1,87)	1:983:A:GLU:C	1:984:A:ILE:N	1:984:A:ILE:CA	1:984:A:ILE:C	3	3.6
(1,19)	1:934:A:LYS:C	1:935:A:ALA:N	1:935:A:ALA:CA	1:935:A:ALA:C	14	3.59
(1,179)	1:1042:A:ALA:C	1:1043:A:ARG:N	1:1043:A:ARG:CA	1:1043:A:ARG:C	4	3.58
(1,178)	1:1042:A:ALA:N	1:1042:A:ALA:CA	1:1042:A:ALA:C	1:1043:A:ARG:N	2	3.58
(1,33)	1:943:A:ILE:C	1:944:A:GLN:N	1:944:A:GLN:CA	1:944:A:GLN:C	24	3.58
(1,12)	1:931:A:GLY:N	1:931:A:GLY:CA	1:931:A:GLY:C	1:932:A:LEU:N	7	3.58
(1,7)	1:927:A:GLU:C	1:928:A:ASN:N	1:928:A:ASN:CA	1:928:A:ASN:C	4	3.58
(1,57)	1:960:A:LEU:C	1:961:A:ALA:N	1:961:A:ALA:CA	1:961:A:ALA:C	11	3.57
(1,30)	1:942:A:LYS:N	1:942:A:LYS:CA	1:942:A:LYS:C	1:943:A:ILE:N	22	3.57
(1,85)	1:982:A:ARG:C	1:983:A:GLU:N	1:983:A:GLU:CA	1:983:A:GLU:C	24	3.56
(1,78)	1:975:A:VAL:N	1:975:A:VAL:CA	1:975:A:VAL:C	1:976:A:LEU:N	17	3.56
(1,54)	1:959:A:GLY:N	1:959:A:GLY:CA	1:959:A:GLY:C	1:960:A:LEU:N	7	3.56
(1,23)	1:938:A:GLU:C	1:939:A:MET:N	1:939:A:MET:CA	1:939:A:MET:C	7	3.56
(1,15)	1:932:A:LEU:C	1:933:A:VAL:N	1:933:A:VAL:CA	1:933:A:VAL:C	18	3.56
(1,97)	1:988:A:GLN:C	1:989:A:LYS:N	1:989:A:LYS:CA	1:989:A:LYS:C	22	3.55
(1,129)	1:1013:A:LEU:C	1:1014:A:GLN:N	1:1014:A:GLN:CA	1:1014:A:GLN:C	17	3.54
(1,19)	1:934:A:LYS:C	1:935:A:ALA:N	1:935:A:ALA:CA	1:935:A:ALA:C	23	3.54
(1,155)	1:1027:A:ALA:C	1:1028:A:LEU:N	1:1028:A:LEU:CA	1:1028:A:LEU:C	23	3.53
(1,53)	1:958:A:VAL:C	1:959:A:GLY:N	1:959:A:GLY:CA	1:959:A:GLY:C	7	3.52
(1,34)	1:944:A:GLN:N	1:944:A:GLN:CA	1:944:A:GLN:C	1:945:A:PRO:N	11	3.52
(1,23)	1:938:A:GLU:C	1:939:A:MET:N	1:939:A:MET:CA	1:939:A:MET:C	14	3.52
(1,157)	1:1028:A:LEU:C	1:1029:A:ALA:N	1:1029:A:ALA:CA	1:1029:A:ALA:C	25	3.51
(1,145)	1:1022:A:LEU:C	1:1023:A:THR:N	1:1023:A:THR:CA	1:1023:A:THR:C	14	3.51
(1,35)	1:947:A:PRO:C	1:948:A:PRO:N	1:948:A:PRO:CA	1:948:A:PRO:C	15	3.51
(1,25)	1:939:A:MET:C	1:940:A:SER:N	1:940:A:SER:CA	1:940:A:SER:C	20	3.51
(1,92)	1:986:A:MET:N	1:986:A:MET:CA	1:986:A:MET:C	1:987:A:ALA:N	11	3.5
(1,78)	1:975:A:VAL:N	1:975:A:VAL:CA	1:975:A:VAL:C	1:976:A:LEU:N	15	3.5
(1,173)	1:1039:A:ILE:C	1:1040:A:ASP:N	1:1040:A:ASP:CA	1:1040:A:ASP:C	16	3.49
(1,109)	1:995:A:LEU:C	1:996:A:ALA:N	1:996:A:ALA:CA	1:996:A:ALA:C	16	3.49
(1,90)	1:985:A:GLU:N	1:985:A:GLU:CA	1:985:A:GLU:C	1:986:A:MET:N	22	3.49
(1,55)	1:959:A:GLY:C	1:960:A:LEU:N	1:960:A:LEU:CA	1:960:A:LEU:C	5	3.49
(1,22)	1:938:A:GLU:N	1:938:A:GLU:CA	1:938:A:GLU:C	1:939:A:MET:N	6	3.49
(1,70)	1:970:A:ASP:N	1:970:A:ASP:CA	1:970:A:ASP:C	1:971:A:GLU:N	12	3.48
(1,41)	1:952:A:VAL:C	1:953:A:PRO:N	1:953:A:PRO:CA	1:953:A:PRO:C	25	3.48
(1,107)	1:994:A:ASP:C	1:995:A:LEU:N	1:995:A:LEU:CA	1:995:A:LEU:C	16	3.47
(1,102)	1:991:A:LEU:N	1:991:A:LEU:CA	1:991:A:LEU:C	1:992:A:ASN:N	10	3.47
(1,90)	1:985:A:GLU:N	1:985:A:GLU:CA	1:985:A:GLU:C	1:986:A:MET:N	8	3.47

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,50)	1:957:A:GLU:N	1:957:A:GLU:CA	1:957:A:GLU:C	1:958:A:VAL:N	23	3.47
(1,130)	1:1014:A:GLN:N	1:1014:A:GLN:CA	1:1014:A:GLN:C	1:1015:A:GLN:N	21	3.46
(1,95)	1:987:A:ALA:C	1:988:A:GLN:N	1:988:A:GLN:CA	1:988:A:GLN:C	10	3.46
(1,18)	1:934:A:LYS:N	1:934:A:LYS:CA	1:934:A:LYS:C	1:935:A:ALA:N	10	3.46
(1,138)	1:1019:A:LYS:N	1:1019:A:LYS:CA	1:1019:A:LYS:C	1:1020:A:GLN:N	19	3.45
(1,167)	1:1033:A:LYS:C	1:1034:A:ASN:N	1:1034:A:ASN:CA	1:1034:A:ASN:C	6	3.43
(1,41)	1:952:A:VAL:C	1:953:A:PRO:N	1:953:A:PRO:CA	1:953:A:PRO:C	19	3.43
(1,131)	1:1014:A:GLN:C	1:1015:A:GLN:N	1:1015:A:GLN:CA	1:1015:A:GLN:C	11	3.42
(1,110)	1:996:A:ALA:N	1:996:A:ALA:CA	1:996:A:ALA:C	1:997:A:GLU:N	17	3.42
(1,93)	1:986:A:MET:C	1:987:A:ALA:N	1:987:A:ALA:CA	1:987:A:ALA:C	14	3.42
(1,181)	1:1043:A:ARG:C	1:1044:A:LEU:N	1:1044:A:LEU:CA	1:1044:A:LEU:C	24	3.41
(1,109)	1:995:A:LEU:C	1:996:A:ALA:N	1:996:A:ALA:CA	1:996:A:ALA:C	5	3.41
(1,94)	1:987:A:ALA:N	1:987:A:ALA:CA	1:987:A:ALA:C	1:988:A:GLN:N	6	3.41
(1,94)	1:987:A:ALA:N	1:987:A:ALA:CA	1:987:A:ALA:C	1:988:A:GLN:N	22	3.41
(1,86)	1:983:A:GLU:N	1:983:A:GLU:CA	1:983:A:GLU:C	1:984:A:ILE:N	22	3.41
(1,70)	1:970:A:ASP:N	1:970:A:ASP:CA	1:970:A:ASP:C	1:971:A:GLU:N	19	3.41
(1,9)	1:928:A:ASN:C	1:929:A:VAL:N	1:929:A:VAL:CA	1:929:A:VAL:C	6	3.41
(1,175)	1:1040:A:ASP:C	1:1041:A:GLN:N	1:1041:A:GLN:CA	1:1041:A:GLN:C	5	3.4
(1,108)	1:995:A:LEU:N	1:995:A:LEU:CA	1:995:A:LEU:C	1:996:A:ALA:N	11	3.4
(1,86)	1:983:A:GLU:N	1:983:A:GLU:CA	1:983:A:GLU:C	1:984:A:ILE:N	2	3.4
(1,59)	1:964:A:THR:C	1:965:A:LEU:N	1:965:A:LEU:CA	1:965:A:LEU:C	3	3.4
(1,44)	1:954:A:MET:N	1:954:A:MET:CA	1:954:A:MET:C	1:955:A:VAL:N	6	3.39
(1,42)	1:953:A:PRO:N	1:953:A:PRO:CA	1:953:A:PRO:C	1:954:A:MET:N	11	3.39
(1,23)	1:938:A:GLU:C	1:939:A:MET:N	1:939:A:MET:CA	1:939:A:MET:C	23	3.39
(1,20)	1:935:A:ALA:N	1:935:A:ALA:CA	1:935:A:ALA:C	1:936:A:VAL:N	11	3.39
(1,7)	1:927:A:GLU:C	1:928:A:ASN:N	1:928:A:ASN:CA	1:928:A:ASN:C	8	3.39
(1,145)	1:1022:A:LEU:C	1:1023:A:THR:N	1:1023:A:THR:CA	1:1023:A:THR:C	10	3.38
(1,54)	1:959:A:GLY:N	1:959:A:GLY:CA	1:959:A:GLY:C	1:960:A:LEU:N	20	3.38
(1,155)	1:1027:A:ALA:C	1:1028:A:LEU:N	1:1028:A:LEU:CA	1:1028:A:LEU:C	2	3.37
(1,67)	1:968:A:THR:C	1:969:A:VAL:N	1:969:A:VAL:CA	1:969:A:VAL:C	23	3.37
(1,28)	1:941:A:SER:N	1:941:A:SER:CA	1:941:A:SER:C	1:942:A:LYS:N	21	3.37
(1,174)	1:1040:A:ASP:N	1:1040:A:ASP:CA	1:1040:A:ASP:C	1:1041:A:GLN:N	23	3.36
(1,158)	1:1029:A:ALA:N	1:1029:A:ALA:CA	1:1029:A:ALA:C	1:1030:A:VAL:N	14	3.36
(1,119)	1:1003:A:LYS:C	1:1004:A:LEU:N	1:1004:A:LEU:CA	1:1004:A:LEU:C	7	3.36
(1,60)	1:965:A:LEU:N	1:965:A:LEU:CA	1:965:A:LEU:C	1:966:A:LEU:N	13	3.36
(1,41)	1:952:A:VAL:C	1:953:A:PRO:N	1:953:A:PRO:CA	1:953:A:PRO:C	9	3.36
(1,32)	1:943:A:ILE:N	1:943:A:ILE:CA	1:943:A:ILE:C	1:944:A:GLN:N	23	3.36
(1,23)	1:938:A:GLU:C	1:939:A:MET:N	1:939:A:MET:CA	1:939:A:MET:C	6	3.36
(1,95)	1:987:A:ALA:C	1:988:A:GLN:N	1:988:A:GLN:CA	1:988:A:GLN:C	16	3.34
(1,85)	1:982:A:ARG:C	1:983:A:GLU:N	1:983:A:GLU:CA	1:983:A:GLU:C	12	3.34
(1,143)	1:1021:A:MET:C	1:1022:A:LEU:N	1:1022:A:LEU:CA	1:1022:A:LEU:C	20	3.32
(1,40)	1:952:A:VAL:N	1:952:A:VAL:CA	1:952:A:VAL:C	1:953:A:PRO:N	4	3.31
(1,7)	1:927:A:GLU:C	1:928:A:ASN:N	1:928:A:ASN:CA	1:928:A:ASN:C	6	3.31
(1,107)	1:994:A:ASP:C	1:995:A:LEU:N	1:995:A:LEU:CA	1:995:A:LEU:C	9	3.3
(1,13)	1:931:A:GLY:C	1:932:A:LEU:N	1:932:A:LEU:CA	1:932:A:LEU:C	14	3.3
(1,122)	1:1005:A:ALA:N	1:1005:A:ALA:CA	1:1005:A:ALA:C	1:1006:A:GLN:N	16	3.29
(1,149)	1:1024:A:ALA:C	1:1025:A:ALA:N	1:1025:A:ALA:CA	1:1025:A:ALA:C	15	3.28
(1,128)	1:1013:A:LEU:N	1:1013:A:LEU:CA	1:1013:A:LEU:C	1:1014:A:GLN:N	12	3.28
(1,123)	1:1005:A:ALA:C	1:1006:A:GLN:N	1:1006:A:GLN:CA	1:1006:A:GLN:C	19	3.28
(1,74)	1:973:A:LEU:N	1:973:A:LEU:CA	1:973:A:LEU:C	1:974:A:PRO:N	13	3.28
(1,41)	1:952:A:VAL:C	1:953:A:PRO:N	1:953:A:PRO:CA	1:953:A:PRO:C	12	3.28

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,147)	1:1023:A:THR:C	1:1024:A:ALA:N	1:1024:A:ALA:CA	1:1024:A:ALA:C	20	3.27
(1,52)	1:958:A:VAL:N	1:958:A:VAL:CA	1:958:A:VAL:C	1:959:A:GLY:N	19	3.27
(1,181)	1:1043:A:ARG:C	1:1044:A:LEU:N	1:1044:A:LEU:CA	1:1044:A:LEU:C	6	3.26
(1,174)	1:1040:A:ASP:N	1:1040:A:ASP:CA	1:1040:A:ASP:C	1:1041:A:GLN:N	12	3.26
(1,139)	1:1019:A:LYS:C	1:1020:A:GLN:N	1:1020:A:GLN:CA	1:1020:A:GLN:C	10	3.26
(1,87)	1:983:A:GLU:C	1:984:A:ILE:N	1:984:A:ILE:CA	1:984:A:ILE:C	10	3.26
(1,44)	1:954:A:MET:N	1:954:A:MET:CA	1:954:A:MET:C	1:955:A:VAL:N	25	3.26
(1,15)	1:932:A:LEU:C	1:933:A:VAL:N	1:933:A:VAL:CA	1:933:A:VAL:C	24	3.26
(1,82)	1:981:A:HIS:N	1:981:A:HIS:CA	1:981:A:HIS:C	1:982:A:ARG:N	16	3.25
(1,74)	1:973:A:LEU:N	1:973:A:LEU:CA	1:973:A:LEU:C	1:974:A:PRO:N	6	3.25
(1,12)	1:931:A:GLY:N	1:931:A:GLY:CA	1:931:A:GLY:C	1:932:A:LEU:N	21	3.25
(1,154)	1:1027:A:ALA:N	1:1027:A:ALA:CA	1:1027:A:ALA:C	1:1028:A:LEU:N	25	3.24
(1,21)	1:937:A:ILE:C	1:938:A:GLU:N	1:938:A:GLU:CA	1:938:A:GLU:C	19	3.24
(1,39)	1:951:A:TYR:C	1:952:A:VAL:N	1:952:A:VAL:CA	1:952:A:VAL:C	21	3.23
(1,37)	1:948:A:PRO:C	1:949:A:GLU:N	1:949:A:GLU:CA	1:949:A:GLU:C	22	3.23
(1,149)	1:1024:A:ALA:C	1:1025:A:ALA:N	1:1025:A:ALA:CA	1:1025:A:ALA:C	3	3.22
(1,23)	1:938:A:GLU:C	1:939:A:MET:N	1:939:A:MET:CA	1:939:A:MET:C	13	3.22
(1,50)	1:957:A:GLU:N	1:957:A:GLU:CA	1:957:A:GLU:C	1:958:A:VAL:N	7	3.21
(1,137)	1:1018:A:LYS:C	1:1019:A:LYS:N	1:1019:A:LYS:CA	1:1019:A:LYS:C	18	3.2
(1,121)	1:1004:A:LEU:C	1:1005:A:ALA:N	1:1005:A:ALA:CA	1:1005:A:ALA:C	15	3.19
(1,38)	1:949:A:GLU:N	1:949:A:GLU:CA	1:949:A:GLU:C	1:950:A:GLU:N	25	3.19
(1,24)	1:939:A:MET:N	1:939:A:MET:CA	1:939:A:MET:C	1:940:A:SER:N	9	3.19
(1,155)	1:1027:A:ALA:C	1:1028:A:LEU:N	1:1028:A:LEU:CA	1:1028:A:LEU:C	13	3.18
(1,78)	1:975:A:VAL:N	1:975:A:VAL:CA	1:975:A:VAL:C	1:976:A:LEU:N	11	3.18
(1,41)	1:952:A:VAL:C	1:953:A:PRO:N	1:953:A:PRO:CA	1:953:A:PRO:C	1	3.18
(1,29)	1:941:A:SER:C	1:942:A:LYS:N	1:942:A:LYS:CA	1:942:A:LYS:C	16	3.18
(1,173)	1:1039:A:ILE:C	1:1040:A:ASP:N	1:1040:A:ASP:CA	1:1040:A:ASP:C	5	3.17
(1,156)	1:1028:A:LEU:N	1:1028:A:LEU:CA	1:1028:A:LEU:C	1:1029:A:ALA:N	19	3.17
(1,119)	1:1003:A:LYS:C	1:1004:A:LEU:N	1:1004:A:LEU:CA	1:1004:A:LEU:C	14	3.16
(1,175)	1:1040:A:ASP:C	1:1041:A:GLN:N	1:1041:A:GLN:CA	1:1041:A:GLN:C	19	3.15
(1,24)	1:939:A:MET:N	1:939:A:MET:CA	1:939:A:MET:C	1:940:A:SER:N	18	3.15
(1,92)	1:986:A:MET:N	1:986:A:MET:CA	1:986:A:MET:C	1:987:A:ALA:N	18	3.14
(1,13)	1:931:A:GLY:C	1:932:A:LEU:N	1:932:A:LEU:CA	1:932:A:LEU:C	23	3.14
(1,50)	1:957:A:GLU:N	1:957:A:GLU:CA	1:957:A:GLU:C	1:958:A:VAL:N	13	3.13
(1,9)	1:928:A:ASN:C	1:929:A:VAL:N	1:929:A:VAL:CA	1:929:A:VAL:C	7	3.13
(1,53)	1:958:A:VAL:C	1:959:A:GLY:N	1:959:A:GLY:CA	1:959:A:GLY:C	8	3.11
(1,53)	1:958:A:VAL:C	1:959:A:GLY:N	1:959:A:GLY:CA	1:959:A:GLY:C	24	3.11
(1,9)	1:928:A:ASN:C	1:929:A:VAL:N	1:929:A:VAL:CA	1:929:A:VAL:C	21	3.1
(1,52)	1:958:A:VAL:N	1:958:A:VAL:CA	1:958:A:VAL:C	1:959:A:GLY:N	17	3.09
(1,171)	1:1035:A:LEU:C	1:1036:A:LEU:N	1:1036:A:LEU:CA	1:1036:A:LEU:C	12	3.07
(1,134)	1:1016:A:GLU:N	1:1016:A:GLU:CA	1:1016:A:GLU:C	1:1017:A:TYR:N	11	3.07
(1,120)	1:1004:A:LEU:N	1:1004:A:LEU:CA	1:1004:A:LEU:C	1:1005:A:ALA:N	15	3.06
(1,55)	1:959:A:GLY:C	1:960:A:LEU:N	1:960:A:LEU:CA	1:960:A:LEU:C	9	3.06
(1,111)	1:996:A:ALA:C	1:997:A:GLU:N	1:997:A:GLU:CA	1:997:A:GLU:C	23	3.05
(1,53)	1:958:A:VAL:C	1:959:A:GLY:N	1:959:A:GLY:CA	1:959:A:GLY:C	10	3.05
(1,50)	1:957:A:GLU:N	1:957:A:GLU:CA	1:957:A:GLU:C	1:958:A:VAL:N	9	3.05
(1,164)	1:1032:A:ALA:N	1:1032:A:ALA:CA	1:1032:A:ALA:C	1:1033:A:LYS:N	10	3.04
(1,155)	1:1027:A:ALA:C	1:1028:A:LEU:N	1:1028:A:LEU:CA	1:1028:A:LEU:C	1	3.04
(1,78)	1:975:A:VAL:N	1:975:A:VAL:CA	1:975:A:VAL:C	1:976:A:LEU:N	6	3.04
(1,41)	1:952:A:VAL:C	1:953:A:PRO:N	1:953:A:PRO:CA	1:953:A:PRO:C	23	3.04
(1,12)	1:931:A:GLY:N	1:931:A:GLY:CA	1:931:A:GLY:C	1:932:A:LEU:N	18	3.03

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,7)	1:927:A:GLU:C	1:928:A:ASN:N	1:928:A:ASN:CA	1:928:A:ASN:C	18	3.03
(1,39)	1:951:A:TYR:C	1:952:A:VAL:N	1:952:A:VAL:CA	1:952:A:VAL:C	22	3.02
(1,154)	1:1027:A:ALA:N	1:1027:A:ALA:CA	1:1027:A:ALA:C	1:1028:A:LEU:N	7	3.01
(1,87)	1:983:A:GLU:C	1:984:A:ILE:N	1:984:A:ILE:CA	1:984:A:ILE:C	25	3.01
(1,53)	1:958:A:VAL:C	1:959:A:GLY:N	1:959:A:GLY:CA	1:959:A:GLY:C	3	3.01
(1,13)	1:931:A:GLY:C	1:932:A:LEU:N	1:932:A:LEU:CA	1:932:A:LEU:C	9	3.01
(1,12)	1:931:A:GLY:N	1:931:A:GLY:CA	1:931:A:GLY:C	1:932:A:LEU:N	23	3.01
(1,17)	1:933:A:VAL:C	1:934:A:LYS:N	1:934:A:LYS:CA	1:934:A:LYS:C	16	3.0
(1,55)	1:959:A:GLY:C	1:960:A:LEU:N	1:960:A:LEU:CA	1:960:A:LEU:C	3	2.99
(1,174)	1:1040:A:ASP:N	1:1040:A:ASP:CA	1:1040:A:ASP:C	1:1041:A:GLN:N	20	2.98
(1,121)	1:1004:A:LEU:C	1:1005:A:ALA:N	1:1005:A:ALA:CA	1:1005:A:ALA:C	2	2.98
(1,92)	1:986:A:MET:N	1:986:A:MET:CA	1:986:A:MET:C	1:987:A:ALA:N	7	2.98
(1,33)	1:943:A:ILE:C	1:944:A:GLN:N	1:944:A:GLN:CA	1:944:A:GLN:C	23	2.98
(1,24)	1:939:A:MET:N	1:939:A:MET:CA	1:939:A:MET:C	1:940:A:SER:N	24	2.98
(1,168)	1:1034:A:ASN:N	1:1034:A:ASN:CA	1:1034:A:ASN:C	1:1035:A:LEU:N	8	2.97
(1,52)	1:958:A:VAL:N	1:958:A:VAL:CA	1:958:A:VAL:C	1:959:A:GLY:N	7	2.97
(1,179)	1:1042:A:ALA:C	1:1043:A:ARG:N	1:1043:A:ARG:CA	1:1043:A:ARG:C	18	2.96
(1,172)	1:1036:A:LEU:N	1:1036:A:LEU:CA	1:1036:A:LEU:C	1:1037:A:ASP:N	10	2.96
(1,158)	1:1029:A:ALA:N	1:1029:A:ALA:CA	1:1029:A:ALA:C	1:1030:A:VAL:N	4	2.96
(1,156)	1:1028:A:LEU:N	1:1028:A:LEU:CA	1:1028:A:LEU:C	1:1029:A:ALA:N	1	2.96
(1,73)	1:972:A:SER:C	1:973:A:LEU:N	1:973:A:LEU:CA	1:973:A:LEU:C	15	2.96
(1,50)	1:957:A:GLU:N	1:957:A:GLU:CA	1:957:A:GLU:C	1:958:A:VAL:N	5	2.96
(1,13)	1:931:A:GLY:C	1:932:A:LEU:N	1:932:A:LEU:CA	1:932:A:LEU:C	7	2.96
(1,7)	1:927:A:GLU:C	1:928:A:ASN:N	1:928:A:ASN:CA	1:928:A:ASN:C	14	2.96
(1,60)	1:965:A:LEU:N	1:965:A:LEU:CA	1:965:A:LEU:C	1:966:A:LEU:N	20	2.95
(1,157)	1:1028:A:LEU:C	1:1029:A:ALA:N	1:1029:A:ALA:CA	1:1029:A:ALA:C	23	2.94
(1,50)	1:957:A:GLU:N	1:957:A:GLU:CA	1:957:A:GLU:C	1:958:A:VAL:N	15	2.94
(1,50)	1:957:A:GLU:N	1:957:A:GLU:CA	1:957:A:GLU:C	1:958:A:VAL:N	18	2.93
(1,24)	1:939:A:MET:N	1:939:A:MET:CA	1:939:A:MET:C	1:940:A:SER:N	5	2.93
(1,10)	1:929:A:VAL:N	1:929:A:VAL:CA	1:929:A:VAL:C	1:930:A:THR:N	1	2.93
(1,156)	1:1028:A:LEU:N	1:1028:A:LEU:CA	1:1028:A:LEU:C	1:1029:A:ALA:N	7	2.92
(1,112)	1:997:A:GLU:N	1:997:A:GLU:CA	1:997:A:GLU:C	1:998:A:LEU:N	18	2.92
(1,17)	1:933:A:VAL:C	1:934:A:LYS:N	1:934:A:LYS:CA	1:934:A:LYS:C	11	2.92
(1,169)	1:1034:A:ASN:C	1:1035:A:LEU:N	1:1035:A:LEU:CA	1:1035:A:LEU:C	24	2.91
(1,142)	1:1021:A:MET:N	1:1021:A:MET:CA	1:1021:A:MET:C	1:1022:A:LEU:N	24	2.91
(1,122)	1:1005:A:ALA:N	1:1005:A:ALA:CA	1:1005:A:ALA:C	1:1006:A:GLN:N	19	2.91
(1,54)	1:959:A:GLY:N	1:959:A:GLY:CA	1:959:A:GLY:C	1:960:A:LEU:N	16	2.9
(1,97)	1:988:A:GLN:C	1:989:A:LYS:N	1:989:A:LYS:CA	1:989:A:LYS:C	7	2.89
(1,49)	1:956:A:LYS:C	1:957:A:GLU:N	1:957:A:GLU:CA	1:957:A:GLU:C	3	2.89
(1,35)	1:947:A:PRO:C	1:948:A:PRO:N	1:948:A:PRO:CA	1:948:A:PRO:C	25	2.89
(1,24)	1:939:A:MET:N	1:939:A:MET:CA	1:939:A:MET:C	1:940:A:SER:N	17	2.89
(1,54)	1:959:A:GLY:N	1:959:A:GLY:CA	1:959:A:GLY:C	1:960:A:LEU:N	15	2.88
(1,35)	1:947:A:PRO:C	1:948:A:PRO:N	1:948:A:PRO:CA	1:948:A:PRO:C	5	2.88
(1,170)	1:1035:A:LEU:N	1:1035:A:LEU:CA	1:1035:A:LEU:C	1:1036:A:LEU:N	13	2.87
(1,107)	1:994:A:ASP:C	1:995:A:LEU:N	1:995:A:LEU:CA	1:995:A:LEU:C	18	2.87
(1,6)	1:926:A:TYR:N	1:926:A:TYR:CA	1:926:A:TYR:C	1:927:A:GLU:N	7	2.87
(1,60)	1:965:A:LEU:N	1:965:A:LEU:CA	1:965:A:LEU:C	1:966:A:LEU:N	16	2.86
(1,107)	1:994:A:ASP:C	1:995:A:LEU:N	1:995:A:LEU:CA	1:995:A:LEU:C	17	2.85
(1,60)	1:965:A:LEU:N	1:965:A:LEU:CA	1:965:A:LEU:C	1:966:A:LEU:N	12	2.85
(1,16)	1:933:A:VAL:N	1:933:A:VAL:CA	1:933:A:VAL:C	1:934:A:LYS:N	1	2.85
(1,97)	1:988:A:GLN:C	1:989:A:LYS:N	1:989:A:LYS:CA	1:989:A:LYS:C	4	2.84

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,70)	1:970:A:ASP:N	1:970:A:ASP:CA	1:970:A:ASP:C	1:971:A:GLU:N	17	2.84
(1,180)	1:1043:A:ARG:N	1:1043:A:ARG:CA	1:1043:A:ARG:C	1:1044:A:LEU:N	1	2.83
(1,117)	1:1002:A:MET:C	1:1003:A:LYS:N	1:1003:A:LYS:CA	1:1003:A:LYS:C	24	2.83
(1,175)	1:1040:A:ASP:C	1:1041:A:GLN:N	1:1041:A:GLN:CA	1:1041:A:GLN:C	24	2.81
(1,105)	1:992:A:ASN:C	1:993:A:SER:N	1:993:A:SER:CA	1:993:A:SER:C	21	2.81
(1,23)	1:938:A:GLU:C	1:939:A:MET:N	1:939:A:MET:CA	1:939:A:MET:C	24	2.81
(1,8)	1:928:A:ASN:N	1:928:A:ASN:CA	1:928:A:ASN:C	1:929:A:VAL:N	13	2.81
(1,94)	1:987:A:ALA:N	1:987:A:ALA:CA	1:987:A:ALA:C	1:988:A:GLN:N	14	2.8
(1,79)	1:979:A:SER:C	1:980:A:THR:N	1:980:A:THR:CA	1:980:A:THR:C	25	2.8
(1,52)	1:958:A:VAL:N	1:958:A:VAL:CA	1:958:A:VAL:C	1:959:A:GLY:N	4	2.79
(1,34)	1:944:A:GLN:N	1:944:A:GLN:CA	1:944:A:GLN:C	1:945:A:PRO:N	20	2.79
(1,29)	1:941:A:SER:C	1:942:A:LYS:N	1:942:A:LYS:CA	1:942:A:LYS:C	3	2.79
(1,169)	1:1034:A:ASN:C	1:1035:A:LEU:N	1:1035:A:LEU:CA	1:1035:A:LEU:C	23	2.78
(1,94)	1:987:A:ALA:N	1:987:A:ALA:CA	1:987:A:ALA:C	1:988:A:GLN:N	4	2.78
(1,50)	1:957:A:GLU:N	1:957:A:GLU:CA	1:957:A:GLU:C	1:958:A:VAL:N	16	2.78
(1,35)	1:947:A:PRO:C	1:948:A:PRO:N	1:948:A:PRO:CA	1:948:A:PRO:C	17	2.78
(1,24)	1:939:A:MET:N	1:939:A:MET:CA	1:939:A:MET:C	1:940:A:SER:N	14	2.78
(1,73)	1:972:A:SER:C	1:973:A:LEU:N	1:973:A:LEU:CA	1:973:A:LEU:C	21	2.77
(1,71)	1:971:A:GLU:C	1:972:A:SER:N	1:972:A:SER:CA	1:972:A:SER:C	15	2.77
(1,178)	1:1042:A:ALA:N	1:1042:A:ALA:CA	1:1042:A:ALA:C	1:1043:A:ARG:N	4	2.76
(1,133)	1:1015:A:GLN:C	1:1016:A:GLU:N	1:1016:A:GLU:CA	1:1016:A:GLU:C	22	2.76
(1,69)	1:969:A:VAL:C	1:970:A:ASP:N	1:970:A:ASP:CA	1:970:A:ASP:C	23	2.76
(1,60)	1:965:A:LEU:N	1:965:A:LEU:CA	1:965:A:LEU:C	1:966:A:LEU:N	14	2.76
(1,179)	1:1042:A:ALA:C	1:1043:A:ARG:N	1:1043:A:ARG:CA	1:1043:A:ARG:C	13	2.75
(1,145)	1:1022:A:LEU:C	1:1023:A:THR:N	1:1023:A:THR:CA	1:1023:A:THR:C	23	2.75
(1,82)	1:981:A:HIS:N	1:981:A:HIS:CA	1:981:A:HIS:C	1:982:A:ARG:N	15	2.74
(1,117)	1:1002:A:MET:C	1:1003:A:LYS:N	1:1003:A:LYS:CA	1:1003:A:LYS:C	11	2.71
(1,60)	1:965:A:LEU:N	1:965:A:LEU:CA	1:965:A:LEU:C	1:966:A:LEU:N	11	2.71
(1,32)	1:943:A:ILE:N	1:943:A:ILE:CA	1:943:A:ILE:C	1:944:A:GLN:N	20	2.71
(1,163)	1:1031:A:ASP:C	1:1032:A:ALA:N	1:1032:A:ALA:CA	1:1032:A:ALA:C	18	2.7
(1,167)	1:1033:A:LYS:C	1:1034:A:ASN:N	1:1034:A:ASN:CA	1:1034:A:ASN:C	9	2.69
(1,35)	1:947:A:PRO:C	1:948:A:PRO:N	1:948:A:PRO:CA	1:948:A:PRO:C	20	2.68
(1,29)	1:941:A:SER:C	1:942:A:LYS:N	1:942:A:LYS:CA	1:942:A:LYS:C	12	2.68
(1,173)	1:1039:A:ILE:C	1:1040:A:ASP:N	1:1040:A:ASP:CA	1:1040:A:ASP:C	13	2.67
(1,162)	1:1031:A:ASP:N	1:1031:A:ASP:CA	1:1031:A:ASP:C	1:1032:A:ALA:N	20	2.67
(1,105)	1:992:A:ASN:C	1:993:A:SER:N	1:993:A:SER:CA	1:993:A:SER:C	10	2.67
(1,25)	1:939:A:MET:C	1:940:A:SER:N	1:940:A:SER:CA	1:940:A:SER:C	11	2.67
(1,116)	1:1002:A:MET:N	1:1002:A:MET:CA	1:1002:A:MET:C	1:1003:A:LYS:N	19	2.66
(1,54)	1:959:A:GLY:N	1:959:A:GLY:CA	1:959:A:GLY:C	1:960:A:LEU:N	22	2.64
(1,39)	1:951:A:TYR:C	1:952:A:VAL:N	1:952:A:VAL:CA	1:952:A:VAL:C	20	2.64
(1,34)	1:944:A:GLN:N	1:944:A:GLN:CA	1:944:A:GLN:C	1:945:A:PRO:N	25	2.64
(1,179)	1:1042:A:ALA:C	1:1043:A:ARG:N	1:1043:A:ARG:CA	1:1043:A:ARG:C	6	2.63
(1,167)	1:1033:A:LYS:C	1:1034:A:ASN:N	1:1034:A:ASN:CA	1:1034:A:ASN:C	24	2.63
(1,111)	1:996:A:ALA:C	1:997:A:GLU:N	1:997:A:GLU:CA	1:997:A:GLU:C	22	2.62
(1,55)	1:959:A:GLY:C	1:960:A:LEU:N	1:960:A:LEU:CA	1:960:A:LEU:C	8	2.62
(1,3)	1:924:A:LYS:C	1:925:A:VAL:N	1:925:A:VAL:CA	1:925:A:VAL:C	19	2.62
(1,58)	1:961:A:ALA:N	1:961:A:ALA:CA	1:961:A:ALA:C	1:962:A:LEU:N	24	2.61
(1,13)	1:931:A:GLY:C	1:932:A:LEU:N	1:932:A:LEU:CA	1:932:A:LEU:C	13	2.61
(1,155)	1:1027:A:ALA:C	1:1028:A:LEU:N	1:1028:A:LEU:CA	1:1028:A:LEU:C	17	2.6
(1,110)	1:996:A:ALA:N	1:996:A:ALA:CA	1:996:A:ALA:C	1:997:A:GLU:N	6	2.6
(1,69)	1:969:A:VAL:C	1:970:A:ASP:N	1:970:A:ASP:CA	1:970:A:ASP:C	25	2.6

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,122)	1:1005:A:ALA:N	1:1005:A:ALA:CA	1:1005:A:ALA:C	1:1006:A:GLN:N	13	2.59
(1,75)	1:973:A:LEU:C	1:974:A:PRO:N	1:974:A:PRO:CA	1:974:A:PRO:C	4	2.59
(1,23)	1:938:A:GLU:C	1:939:A:MET:N	1:939:A:MET:CA	1:939:A:MET:C	25	2.59
(1,154)	1:1027:A:ALA:N	1:1027:A:ALA:CA	1:1027:A:ALA:C	1:1028:A:LEU:N	6	2.58
(1,134)	1:1016:A:GLU:N	1:1016:A:GLU:CA	1:1016:A:GLU:C	1:1017:A:TYR:N	2	2.58
(1,127)	1:1012:A:SER:C	1:1013:A:LEU:N	1:1013:A:LEU:CA	1:1013:A:LEU:C	25	2.58
(1,96)	1:988:A:GLN:N	1:988:A:GLN:CA	1:988:A:GLN:C	1:989:A:LYS:N	25	2.58
(1,83)	1:981:A:HIS:C	1:982:A:ARG:N	1:982:A:ARG:CA	1:982:A:ARG:C	15	2.58
(1,44)	1:954:A:MET:N	1:954:A:MET:CA	1:954:A:MET:C	1:955:A:VAL:N	16	2.58
(1,149)	1:1024:A:ALA:C	1:1025:A:ALA:N	1:1025:A:ALA:CA	1:1025:A:ALA:C	18	2.57
(1,110)	1:996:A:ALA:N	1:996:A:ALA:CA	1:996:A:ALA:C	1:997:A:GLU:N	18	2.56
(1,15)	1:932:A:LEU:C	1:933:A:VAL:N	1:933:A:VAL:CA	1:933:A:VAL:C	2	2.56
(1,85)	1:982:A:ARG:C	1:983:A:GLU:N	1:983:A:GLU:CA	1:983:A:GLU:C	5	2.55
(1,52)	1:958:A:VAL:N	1:958:A:VAL:CA	1:958:A:VAL:C	1:959:A:GLY:N	8	2.55
(1,24)	1:939:A:MET:N	1:939:A:MET:CA	1:939:A:MET:C	1:940:A:SER:N	16	2.55
(1,19)	1:934:A:LYS:C	1:935:A:ALA:N	1:935:A:ALA:CA	1:935:A:ALA:C	17	2.55
(1,12)	1:931:A:GLY:N	1:931:A:GLY:CA	1:931:A:GLY:C	1:932:A:LEU:N	9	2.55
(1,11)	1:930:A:THR:C	1:931:A:GLY:N	1:931:A:GLY:CA	1:931:A:GLY:C	23	2.55
(1,41)	1:952:A:VAL:C	1:953:A:PRO:N	1:953:A:PRO:CA	1:953:A:PRO:C	21	2.54
(1,80)	1:980:A:THR:N	1:980:A:THR:CA	1:980:A:THR:C	1:981:A:HIS:N	5	2.53
(1,24)	1:939:A:MET:N	1:939:A:MET:CA	1:939:A:MET:C	1:940:A:SER:N	12	2.53
(1,155)	1:1027:A:ALA:C	1:1028:A:LEU:N	1:1028:A:LEU:CA	1:1028:A:LEU:C	11	2.52
(1,39)	1:951:A:TYR:C	1:952:A:VAL:N	1:952:A:VAL:CA	1:952:A:VAL:C	12	2.52
(1,23)	1:938:A:GLU:C	1:939:A:MET:N	1:939:A:MET:CA	1:939:A:MET:C	1	2.52
(1,173)	1:1039:A:ILE:C	1:1040:A:ASP:N	1:1040:A:ASP:CA	1:1040:A:ASP:C	17	2.51
(1,147)	1:1023:A:THR:C	1:1024:A:ALA:N	1:1024:A:ALA:CA	1:1024:A:ALA:C	14	2.5
(1,137)	1:1018:A:LYS:C	1:1019:A:LYS:N	1:1019:A:LYS:CA	1:1019:A:LYS:C	10	2.5
(1,75)	1:973:A:LEU:C	1:974:A:PRO:N	1:974:A:PRO:CA	1:974:A:PRO:C	23	2.5
(1,49)	1:956:A:LYS:C	1:957:A:GLU:N	1:957:A:GLU:CA	1:957:A:GLU:C	7	2.5
(1,11)	1:930:A:THR:C	1:931:A:GLY:N	1:931:A:GLY:CA	1:931:A:GLY:C	17	2.5
(1,75)	1:973:A:LEU:C	1:974:A:PRO:N	1:974:A:PRO:CA	1:974:A:PRO:C	20	2.49
(1,112)	1:997:A:GLU:N	1:997:A:GLU:CA	1:997:A:GLU:C	1:998:A:LEU:N	9	2.48
(1,90)	1:985:A:GLU:N	1:985:A:GLU:CA	1:985:A:GLU:C	1:986:A:MET:N	10	2.48
(1,23)	1:938:A:GLU:C	1:939:A:MET:N	1:939:A:MET:CA	1:939:A:MET:C	12	2.48
(1,14)	1:932:A:LEU:N	1:932:A:LEU:CA	1:932:A:LEU:C	1:933:A:VAL:N	12	2.48
(1,175)	1:1040:A:ASP:C	1:1041:A:GLN:N	1:1041:A:GLN:CA	1:1041:A:GLN:C	25	2.46
(1,73)	1:972:A:SER:C	1:973:A:LEU:N	1:973:A:LEU:CA	1:973:A:LEU:C	12	2.46
(1,141)	1:1020:A:GLN:C	1:1021:A:MET:N	1:1021:A:MET:CA	1:1021:A:MET:C	8	2.45
(1,55)	1:959:A:GLY:C	1:960:A:LEU:N	1:960:A:LEU:CA	1:960:A:LEU:C	6	2.44
(1,159)	1:1029:A:ALA:C	1:1030:A:VAL:N	1:1030:A:VAL:CA	1:1030:A:VAL:C	6	2.43
(1,109)	1:995:A:LEU:C	1:996:A:ALA:N	1:996:A:ALA:CA	1:996:A:ALA:C	24	2.43
(1,86)	1:983:A:GLU:N	1:983:A:GLU:CA	1:983:A:GLU:C	1:984:A:ILE:N	5	2.43
(1,10)	1:929:A:VAL:N	1:929:A:VAL:CA	1:929:A:VAL:C	1:930:A:THR:N	4	2.43
(1,9)	1:928:A:ASN:C	1:929:A:VAL:N	1:929:A:VAL:CA	1:929:A:VAL:C	13	2.43
(1,141)	1:1020:A:GLN:C	1:1021:A:MET:N	1:1021:A:MET:CA	1:1021:A:MET:C	16	2.42
(1,139)	1:1019:A:LYS:C	1:1020:A:GLN:N	1:1020:A:GLN:CA	1:1020:A:GLN:C	7	2.42
(1,50)	1:957:A:GLU:N	1:957:A:GLU:CA	1:957:A:GLU:C	1:958:A:VAL:N	24	2.42
(1,32)	1:943:A:ILE:N	1:943:A:ILE:CA	1:943:A:ILE:C	1:944:A:GLN:N	4	2.42
(1,23)	1:938:A:GLU:C	1:939:A:MET:N	1:939:A:MET:CA	1:939:A:MET:C	8	2.42
(1,180)	1:1043:A:ARG:N	1:1043:A:ARG:CA	1:1043:A:ARG:C	1:1044:A:LEU:N	3	2.41
(1,140)	1:1020:A:GLN:N	1:1020:A:GLN:CA	1:1020:A:GLN:C	1:1021:A:MET:N	20	2.41

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,6)	1:926:A:TYR:N	1:926:A:TYR:CA	1:926:A:TYR:C	1:927:A:GLU:N	17	2.41
(1,111)	1:996:A:ALA:C	1:997:A:GLU:N	1:997:A:GLU:CA	1:997:A:GLU:C	25	2.4
(1,83)	1:981:A:HIS:C	1:982:A:ARG:N	1:982:A:ARG:CA	1:982:A:ARG:C	19	2.38
(1,22)	1:938:A:GLU:N	1:938:A:GLU:CA	1:938:A:GLU:C	1:939:A:MET:N	10	2.38
(1,142)	1:1021:A:MET:N	1:1021:A:MET:CA	1:1021:A:MET:C	1:1022:A:LEU:N	18	2.37
(1,129)	1:1013:A:LEU:C	1:1014:A:GLN:N	1:1014:A:GLN:CA	1:1014:A:GLN:C	24	2.37
(1,59)	1:964:A:THR:C	1:965:A:LEU:N	1:965:A:LEU:CA	1:965:A:LEU:C	1	2.37
(1,79)	1:979:A:SER:C	1:980:A:THR:N	1:980:A:THR:CA	1:980:A:THR:C	18	2.36
(1,15)	1:932:A:LEU:C	1:933:A:VAL:N	1:933:A:VAL:CA	1:933:A:VAL:C	20	2.36
(1,9)	1:928:A:ASN:C	1:929:A:VAL:N	1:929:A:VAL:CA	1:929:A:VAL:C	12	2.35
(1,106)	1:993:A:SER:N	1:993:A:SER:CA	1:993:A:SER:C	1:994:A:ASP:N	2	2.34
(1,53)	1:958:A:VAL:C	1:959:A:GLY:N	1:959:A:GLY:CA	1:959:A:GLY:C	14	2.34
(1,41)	1:952:A:VAL:C	1:953:A:PRO:N	1:953:A:PRO:CA	1:953:A:PRO:C	10	2.34
(1,12)	1:931:A:GLY:N	1:931:A:GLY:CA	1:931:A:GLY:C	1:932:A:LEU:N	19	2.34
(1,174)	1:1040:A:ASP:N	1:1040:A:ASP:CA	1:1040:A:ASP:C	1:1041:A:GLN:N	13	2.33
(1,104)	1:992:A:ASN:N	1:992:A:ASN:CA	1:992:A:ASN:C	1:993:A:SER:N	3	2.33
(1,50)	1:957:A:GLU:N	1:957:A:GLU:CA	1:957:A:GLU:C	1:958:A:VAL:N	14	2.33
(1,119)	1:1003:A:LYS:C	1:1004:A:LEU:N	1:1004:A:LEU:CA	1:1004:A:LEU:C	1	2.32
(1,117)	1:1002:A:MET:C	1:1003:A:LYS:N	1:1003:A:LYS:CA	1:1003:A:LYS:C	13	2.32
(1,171)	1:1035:A:LEU:C	1:1036:A:LEU:N	1:1036:A:LEU:CA	1:1036:A:LEU:C	25	2.31
(1,35)	1:947:A:PRO:C	1:948:A:PRO:N	1:948:A:PRO:CA	1:948:A:PRO:C	22	2.3
(1,13)	1:931:A:GLY:C	1:932:A:LEU:N	1:932:A:LEU:CA	1:932:A:LEU:C	15	2.3
(1,167)	1:1033:A:LYS:C	1:1034:A:ASN:N	1:1034:A:ASN:CA	1:1034:A:ASN:C	23	2.29
(1,178)	1:1042:A:ALA:N	1:1042:A:ALA:CA	1:1042:A:ALA:C	1:1043:A:ARG:N	9	2.28
(1,148)	1:1024:A:ALA:N	1:1024:A:ALA:CA	1:1024:A:ALA:C	1:1025:A:ALA:N	25	2.28
(1,57)	1:960:A:LEU:C	1:961:A:ALA:N	1:961:A:ALA:CA	1:961:A:ALA:C	19	2.28
(1,161)	1:1030:A:VAL:C	1:1031:A:ASP:N	1:1031:A:ASP:CA	1:1031:A:ASP:C	22	2.27
(1,147)	1:1023:A:THR:C	1:1024:A:ALA:N	1:1024:A:ALA:CA	1:1024:A:ALA:C	7	2.27
(1,87)	1:983:A:GLU:C	1:984:A:ILE:N	1:984:A:ILE:CA	1:984:A:ILE:C	18	2.27
(1,34)	1:944:A:GLN:N	1:944:A:GLN:CA	1:944:A:GLN:C	1:945:A:PRO:N	9	2.27
(1,170)	1:1035:A:LEU:N	1:1035:A:LEU:CA	1:1035:A:LEU:C	1:1036:A:LEU:N	8	2.26
(1,162)	1:1031:A:ASP:N	1:1031:A:ASP:CA	1:1031:A:ASP:C	1:1032:A:ALA:N	1	2.26
(1,24)	1:939:A:MET:N	1:939:A:MET:CA	1:939:A:MET:C	1:940:A:SER:N	8	2.26
(1,22)	1:938:A:GLU:N	1:938:A:GLU:CA	1:938:A:GLU:C	1:939:A:MET:N	12	2.26
(1,168)	1:1034:A:ASN:N	1:1034:A:ASN:CA	1:1034:A:ASN:C	1:1035:A:LEU:N	1	2.25
(1,155)	1:1027:A:ALA:C	1:1028:A:LEU:N	1:1028:A:LEU:CA	1:1028:A:LEU:C	10	2.25
(1,145)	1:1022:A:LEU:C	1:1023:A:THR:N	1:1023:A:THR:CA	1:1023:A:THR:C	3	2.24
(1,101)	1:990:A:LEU:C	1:991:A:LEU:N	1:991:A:LEU:CA	1:991:A:LEU:C	25	2.24
(1,162)	1:1031:A:ASP:N	1:1031:A:ASP:CA	1:1031:A:ASP:C	1:1032:A:ALA:N	19	2.23
(1,64)	1:967:A:ALA:N	1:967:A:ALA:CA	1:967:A:ALA:C	1:968:A:THR:N	25	2.23
(1,21)	1:937:A:ILE:C	1:938:A:GLU:N	1:938:A:GLU:CA	1:938:A:GLU:C	1	2.23
(1,181)	1:1043:A:ARG:C	1:1044:A:LEU:N	1:1044:A:LEU:CA	1:1044:A:LEU:C	25	2.22
(1,180)	1:1043:A:ARG:N	1:1043:A:ARG:CA	1:1043:A:ARG:C	1:1044:A:LEU:N	6	2.22
(1,172)	1:1036:A:LEU:N	1:1036:A:LEU:CA	1:1036:A:LEU:C	1:1037:A:ASP:N	25	2.22
(1,136)	1:1018:A:LYS:N	1:1018:A:LYS:CA	1:1018:A:LYS:C	1:1019:A:LYS:N	3	2.22
(1,41)	1:952:A:VAL:C	1:953:A:PRO:N	1:953:A:PRO:CA	1:953:A:PRO:C	5	2.22
(1,32)	1:943:A:ILE:N	1:943:A:ILE:CA	1:943:A:ILE:C	1:944:A:GLN:N	7	2.22
(1,137)	1:1018:A:LYS:C	1:1019:A:LYS:N	1:1019:A:LYS:CA	1:1019:A:LYS:C	12	2.21
(1,122)	1:1005:A:ALA:N	1:1005:A:ALA:CA	1:1005:A:ALA:C	1:1006:A:GLN:N	11	2.21
(1,53)	1:958:A:VAL:C	1:959:A:GLY:N	1:959:A:GLY:CA	1:959:A:GLY:C	17	2.21
(1,15)	1:932:A:LEU:C	1:933:A:VAL:N	1:933:A:VAL:CA	1:933:A:VAL:C	10	2.21

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,95)	1:987:A:ALA:C	1:988:A:GLN:N	1:988:A:GLN:CA	1:988:A:GLN:C	19	2.2
(1,83)	1:981:A:HIS:C	1:982:A:ARG:N	1:982:A:ARG:CA	1:982:A:ARG:C	14	2.2
(1,149)	1:1024:A:ALA:C	1:1025:A:ALA:N	1:1025:A:ALA:CA	1:1025:A:ALA:C	4	2.19
(1,85)	1:982:A:ARG:C	1:983:A:GLU:N	1:983:A:GLU:CA	1:983:A:GLU:C	10	2.19
(1,65)	1:967:A:ALA:C	1:968:A:THR:N	1:968:A:THR:CA	1:968:A:THR:C	9	2.18
(1,57)	1:960:A:LEU:C	1:961:A:ALA:N	1:961:A:ALA:CA	1:961:A:ALA:C	20	2.18
(1,140)	1:1020:A:GLN:N	1:1020:A:GLN:CA	1:1020:A:GLN:C	1:1021:A:MET:N	12	2.17
(1,112)	1:997:A:GLU:N	1:997:A:GLU:CA	1:997:A:GLU:C	1:998:A:LEU:N	22	2.17
(1,75)	1:973:A:LEU:C	1:974:A:PRO:N	1:974:A:PRO:CA	1:974:A:PRO:C	12	2.17
(1,25)	1:939:A:MET:C	1:940:A:SER:N	1:940:A:SER:CA	1:940:A:SER:C	8	2.17
(1,173)	1:1039:A:ILE:C	1:1040:A:ASP:N	1:1040:A:ASP:CA	1:1040:A:ASP:C	7	2.16
(1,125)	1:1006:A:GLN:C	1:1007:A:GLN:N	1:1007:A:GLN:CA	1:1007:A:GLN:C	5	2.16
(1,9)	1:928:A:ASN:C	1:929:A:VAL:N	1:929:A:VAL:CA	1:929:A:VAL:C	9	2.16
(1,169)	1:1034:A:ASN:C	1:1035:A:LEU:N	1:1035:A:LEU:CA	1:1035:A:LEU:C	18	2.15
(1,151)	1:1025:A:ALA:C	1:1026:A:HIS:N	1:1026:A:HIS:CA	1:1026:A:HIS:C	11	2.15
(1,61)	1:965:A:LEU:C	1:966:A:LEU:N	1:966:A:LEU:CA	1:966:A:LEU:C	2	2.14
(1,13)	1:931:A:GLY:C	1:932:A:LEU:N	1:932:A:LEU:CA	1:932:A:LEU:C	2	2.14
(1,35)	1:947:A:PRO:C	1:948:A:PRO:N	1:948:A:PRO:CA	1:948:A:PRO:C	4	2.13
(1,19)	1:934:A:LYS:C	1:935:A:ALA:N	1:935:A:ALA:CA	1:935:A:ALA:C	7	2.13
(1,167)	1:1033:A:LYS:C	1:1034:A:ASN:N	1:1034:A:ASN:CA	1:1034:A:ASN:C	13	2.12
(1,130)	1:1014:A:GLN:N	1:1014:A:GLN:CA	1:1014:A:GLN:C	1:1015:A:GLN:N	11	2.12
(1,158)	1:1029:A:ALA:N	1:1029:A:ALA:CA	1:1029:A:ALA:C	1:1030:A:VAL:N	19	2.1
(1,64)	1:967:A:ALA:N	1:967:A:ALA:CA	1:967:A:ALA:C	1:968:A:THR:N	16	2.1
(1,104)	1:992:A:ASN:N	1:992:A:ASN:CA	1:992:A:ASN:C	1:993:A:SER:N	24	2.09
(1,6)	1:926:A:TYR:N	1:926:A:TYR:CA	1:926:A:TYR:C	1:927:A:GLU:N	14	2.09
(1,87)	1:983:A:GLU:C	1:984:A:ILE:N	1:984:A:ILE:CA	1:984:A:ILE:C	14	2.08
(1,20)	1:935:A:ALA:N	1:935:A:ALA:CA	1:935:A:ALA:C	1:936:A:VAL:N	25	2.08
(1,8)	1:928:A:ASN:N	1:928:A:ASN:CA	1:928:A:ASN:C	1:929:A:VAL:N	21	2.08
(1,47)	1:955:A:VAL:C	1:956:A:LYS:N	1:956:A:LYS:CA	1:956:A:LYS:C	11	2.07
(1,22)	1:938:A:GLU:N	1:938:A:GLU:CA	1:938:A:GLU:C	1:939:A:MET:N	17	2.07
(1,94)	1:987:A:ALA:N	1:987:A:ALA:CA	1:987:A:ALA:C	1:988:A:GLN:N	3	2.06
(1,104)	1:992:A:ASN:N	1:992:A:ASN:CA	1:992:A:ASN:C	1:993:A:SER:N	5	2.05
(1,22)	1:938:A:GLU:N	1:938:A:GLU:CA	1:938:A:GLU:C	1:939:A:MET:N	1	2.05
(1,19)	1:934:A:LYS:C	1:935:A:ALA:N	1:935:A:ALA:CA	1:935:A:ALA:C	22	2.05
(1,88)	1:984:A:ILE:N	1:984:A:ILE:CA	1:984:A:ILE:C	1:985:A:GLU:N	9	2.04
(1,35)	1:947:A:PRO:C	1:948:A:PRO:N	1:948:A:PRO:CA	1:948:A:PRO:C	8	2.04
(1,14)	1:932:A:LEU:N	1:932:A:LEU:CA	1:932:A:LEU:C	1:933:A:VAL:N	18	2.04
(1,167)	1:1033:A:LYS:C	1:1034:A:ASN:N	1:1034:A:ASN:CA	1:1034:A:ASN:C	25	2.03
(1,102)	1:991:A:LEU:N	1:991:A:LEU:CA	1:991:A:LEU:C	1:992:A:ASN:N	3	2.03
(1,86)	1:983:A:GLU:N	1:983:A:GLU:CA	1:983:A:GLU:C	1:984:A:ILE:N	24	2.03
(1,173)	1:1039:A:ILE:C	1:1040:A:ASP:N	1:1040:A:ASP:CA	1:1040:A:ASP:C	4	2.02
(1,166)	1:1033:A:LYS:N	1:1033:A:LYS:CA	1:1033:A:LYS:C	1:1034:A:ASN:N	2	2.02
(1,15)	1:932:A:LEU:C	1:933:A:VAL:N	1:933:A:VAL:CA	1:933:A:VAL:C	6	2.02
(1,3)	1:924:A:LYS:C	1:925:A:VAL:N	1:925:A:VAL:CA	1:925:A:VAL:C	18	2.02
(1,169)	1:1034:A:ASN:C	1:1035:A:LEU:N	1:1035:A:LEU:CA	1:1035:A:LEU:C	25	2.01
(1,65)	1:967:A:ALA:C	1:968:A:THR:N	1:968:A:THR:CA	1:968:A:THR:C	20	2.01
(1,12)	1:931:A:GLY:N	1:931:A:GLY:CA	1:931:A:GLY:C	1:932:A:LEU:N	17	2.01
(1,57)	1:960:A:LEU:C	1:961:A:ALA:N	1:961:A:ALA:CA	1:961:A:ALA:C	2	2.0
(1,56)	1:960:A:LEU:N	1:960:A:LEU:CA	1:960:A:LEU:C	1:961:A:ALA:N	18	2.0
(1,7)	1:927:A:GLU:C	1:928:A:ASN:N	1:928:A:ASN:CA	1:928:A:ASN:C	15	2.0
(1,141)	1:1020:A:GLN:C	1:1021:A:MET:N	1:1021:A:MET:CA	1:1021:A:MET:C	24	1.99

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,95)	1:987:A:ALA:C	1:988:A:GLN:N	1:988:A:GLN:CA	1:988:A:GLN:C	14	1.98
(1,74)	1:973:A:LEU:N	1:973:A:LEU:CA	1:973:A:LEU:C	1:974:A:PRO:N	25	1.98
(1,144)	1:1022:A:LEU:N	1:1022:A:LEU:CA	1:1022:A:LEU:C	1:1023:A:THR:N	14	1.96
(1,119)	1:1003:A:LYS:C	1:1004:A:LEU:N	1:1004:A:LEU:CA	1:1004:A:LEU:C	8	1.96
(1,90)	1:985:A:GLU:N	1:985:A:GLU:CA	1:985:A:GLU:C	1:986:A:MET:N	11	1.96
(1,85)	1:982:A:ARG:C	1:983:A:GLU:N	1:983:A:GLU:CA	1:983:A:GLU:C	16	1.96
(1,79)	1:979:A:SER:C	1:980:A:THR:N	1:980:A:THR:CA	1:980:A:THR:C	19	1.96
(1,127)	1:1012:A:SER:C	1:1013:A:LEU:N	1:1013:A:LEU:CA	1:1013:A:LEU:C	21	1.95
(1,120)	1:1004:A:LEU:N	1:1004:A:LEU:CA	1:1004:A:LEU:C	1:1005:A:ALA:N	10	1.95
(1,117)	1:1002:A:MET:C	1:1003:A:LYS:N	1:1003:A:LYS:CA	1:1003:A:LYS:C	5	1.95
(1,9)	1:928:A:ASN:C	1:929:A:VAL:N	1:929:A:VAL:CA	1:929:A:VAL:C	19	1.95
(1,112)	1:997:A:GLU:N	1:997:A:GLU:CA	1:997:A:GLU:C	1:998:A:LEU:N	2	1.94
(1,55)	1:959:A:GLY:C	1:960:A:LEU:N	1:960:A:LEU:CA	1:960:A:LEU:C	17	1.94
(1,43)	1:953:A:PRO:C	1:954:A:MET:N	1:954:A:MET:CA	1:954:A:MET:C	7	1.94
(1,150)	1:1025:A:ALA:N	1:1025:A:ALA:CA	1:1025:A:ALA:C	1:1026:A:HIS:N	17	1.93
(1,149)	1:1024:A:ALA:C	1:1025:A:ALA:N	1:1025:A:ALA:CA	1:1025:A:ALA:C	11	1.93
(1,60)	1:965:A:LEU:N	1:965:A:LEU:CA	1:965:A:LEU:C	1:966:A:LEU:N	8	1.93
(1,150)	1:1025:A:ALA:N	1:1025:A:ALA:CA	1:1025:A:ALA:C	1:1026:A:HIS:N	10	1.92
(1,149)	1:1024:A:ALA:C	1:1025:A:ALA:N	1:1025:A:ALA:CA	1:1025:A:ALA:C	2	1.92
(1,136)	1:1018:A:LYS:N	1:1018:A:LYS:CA	1:1018:A:LYS:C	1:1019:A:LYS:N	22	1.92
(1,62)	1:966:A:LEU:N	1:966:A:LEU:CA	1:966:A:LEU:C	1:967:A:ALA:N	1	1.92
(1,55)	1:959:A:GLY:C	1:960:A:LEU:N	1:960:A:LEU:CA	1:960:A:LEU:C	2	1.92
(1,29)	1:941:A:SER:C	1:942:A:LYS:N	1:942:A:LYS:CA	1:942:A:LYS:C	23	1.92
(1,41)	1:952:A:VAL:C	1:953:A:PRO:N	1:953:A:PRO:CA	1:953:A:PRO:C	17	1.91
(1,167)	1:1033:A:LYS:C	1:1034:A:ASN:N	1:1034:A:ASN:CA	1:1034:A:ASN:C	14	1.89
(1,69)	1:969:A:VAL:C	1:970:A:ASP:N	1:970:A:ASP:CA	1:970:A:ASP:C	10	1.89
(1,25)	1:939:A:MET:C	1:940:A:SER:N	1:940:A:SER:CA	1:940:A:SER:C	6	1.89
(1,140)	1:1020:A:GLN:N	1:1020:A:GLN:CA	1:1020:A:GLN:C	1:1021:A:MET:N	17	1.88
(1,131)	1:1014:A:GLN:C	1:1015:A:GLN:N	1:1015:A:GLN:CA	1:1015:A:GLN:C	4	1.88
(1,35)	1:947:A:PRO:C	1:948:A:PRO:N	1:948:A:PRO:CA	1:948:A:PRO:C	3	1.88
(1,35)	1:947:A:PRO:C	1:948:A:PRO:N	1:948:A:PRO:CA	1:948:A:PRO:C	13	1.88
(1,33)	1:943:A:ILE:C	1:944:A:GLN:N	1:944:A:GLN:CA	1:944:A:GLN:C	2	1.88
(1,13)	1:931:A:GLY:C	1:932:A:LEU:N	1:932:A:LEU:CA	1:932:A:LEU:C	3	1.88
(1,38)	1:949:A:GLU:N	1:949:A:GLU:CA	1:949:A:GLU:C	1:950:A:GLU:N	9	1.87
(1,13)	1:931:A:GLY:C	1:932:A:LEU:N	1:932:A:LEU:CA	1:932:A:LEU:C	1	1.87
(1,69)	1:969:A:VAL:C	1:970:A:ASP:N	1:970:A:ASP:CA	1:970:A:ASP:C	17	1.86
(1,41)	1:952:A:VAL:C	1:953:A:PRO:N	1:953:A:PRO:CA	1:953:A:PRO:C	2	1.86
(1,109)	1:995:A:LEU:C	1:996:A:ALA:N	1:996:A:ALA:CA	1:996:A:ALA:C	18	1.85
(1,145)	1:1022:A:LEU:C	1:1023:A:THR:N	1:1023:A:THR:CA	1:1023:A:THR:C	8	1.84
(1,32)	1:943:A:ILE:N	1:943:A:ILE:CA	1:943:A:ILE:C	1:944:A:GLN:N	13	1.84
(1,25)	1:939:A:MET:C	1:940:A:SER:N	1:940:A:SER:CA	1:940:A:SER:C	21	1.84
(1,118)	1:1003:A:LYS:N	1:1003:A:LYS:CA	1:1003:A:LYS:C	1:1004:A:LEU:N	19	1.83
(1,102)	1:991:A:LEU:N	1:991:A:LEU:CA	1:991:A:LEU:C	1:992:A:ASN:N	24	1.83
(1,52)	1:958:A:VAL:N	1:958:A:VAL:CA	1:958:A:VAL:C	1:959:A:GLY:N	18	1.83
(1,157)	1:1028:A:LEU:C	1:1029:A:ALA:N	1:1029:A:ALA:CA	1:1029:A:ALA:C	8	1.82
(1,157)	1:1028:A:LEU:C	1:1029:A:ALA:N	1:1029:A:ALA:CA	1:1029:A:ALA:C	9	1.81
(1,141)	1:1020:A:GLN:C	1:1021:A:MET:N	1:1021:A:MET:CA	1:1021:A:MET:C	17	1.81
(1,69)	1:969:A:VAL:C	1:970:A:ASP:N	1:970:A:ASP:CA	1:970:A:ASP:C	2	1.81
(1,107)	1:994:A:ASP:C	1:995:A:LEU:N	1:995:A:LEU:CA	1:995:A:LEU:C	8	1.8
(1,73)	1:972:A:SER:C	1:973:A:LEU:N	1:973:A:LEU:CA	1:973:A:LEU:C	20	1.8
(1,66)	1:968:A:THR:N	1:968:A:THR:CA	1:968:A:THR:C	1:969:A:VAL:N	3	1.79

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,35)	1:947:A:PRO:C	1:948:A:PRO:N	1:948:A:PRO:CA	1:948:A:PRO:C	9	1.79
(1,35)	1:947:A:PRO:C	1:948:A:PRO:N	1:948:A:PRO:CA	1:948:A:PRO:C	1	1.77
(1,123)	1:1005:A:ALA:C	1:1006:A:GLN:N	1:1006:A:GLN:CA	1:1006:A:GLN:C	2	1.76
(1,104)	1:992:A:ASN:N	1:992:A:ASN:CA	1:992:A:ASN:C	1:993:A:SER:N	22	1.76
(1,102)	1:991:A:LEU:N	1:991:A:LEU:CA	1:991:A:LEU:C	1:992:A:ASN:N	5	1.76
(1,115)	1:1001:A:LYS:C	1:1002:A:MET:N	1:1002:A:MET:CA	1:1002:A:MET:C	10	1.75
(1,69)	1:969:A:VAL:C	1:970:A:ASP:N	1:970:A:ASP:CA	1:970:A:ASP:C	19	1.75
(1,165)	1:1032:A:ALA:C	1:1033:A:LYS:N	1:1033:A:LYS:CA	1:1033:A:LYS:C	11	1.74
(1,104)	1:992:A:ASN:N	1:992:A:ASN:CA	1:992:A:ASN:C	1:993:A:SER:N	11	1.74
(1,94)	1:987:A:ALA:N	1:987:A:ALA:CA	1:987:A:ALA:C	1:988:A:GLN:N	15	1.74
(1,32)	1:943:A:ILE:N	1:943:A:ILE:CA	1:943:A:ILE:C	1:944:A:GLN:N	8	1.74
(1,156)	1:1028:A:LEU:N	1:1028:A:LEU:CA	1:1028:A:LEU:C	1:1029:A:ALA:N	5	1.73
(1,90)	1:985:A:GLU:N	1:985:A:GLU:CA	1:985:A:GLU:C	1:986:A:MET:N	1	1.73
(1,9)	1:928:A:ASN:C	1:929:A:VAL:N	1:929:A:VAL:CA	1:929:A:VAL:C	3	1.73
(1,169)	1:1034:A:ASN:C	1:1035:A:LEU:N	1:1035:A:LEU:CA	1:1035:A:LEU:C	3	1.72
(1,140)	1:1020:A:GLN:N	1:1020:A:GLN:CA	1:1020:A:GLN:C	1:1021:A:MET:N	10	1.72
(1,74)	1:973:A:LEU:N	1:973:A:LEU:CA	1:973:A:LEU:C	1:974:A:PRO:N	22	1.72
(1,52)	1:958:A:VAL:N	1:958:A:VAL:CA	1:958:A:VAL:C	1:959:A:GLY:N	16	1.72
(1,104)	1:992:A:ASN:N	1:992:A:ASN:CA	1:992:A:ASN:C	1:993:A:SER:N	20	1.71
(1,28)	1:941:A:SER:N	1:941:A:SER:CA	1:941:A:SER:C	1:942:A:LYS:N	15	1.7
(1,147)	1:1023:A:THR:C	1:1024:A:ALA:N	1:1024:A:ALA:CA	1:1024:A:ALA:C	10	1.69
(1,118)	1:1003:A:LYS:N	1:1003:A:LYS:CA	1:1003:A:LYS:C	1:1004:A:LEU:N	24	1.68
(1,56)	1:960:A:LEU:N	1:960:A:LEU:CA	1:960:A:LEU:C	1:961:A:ALA:N	14	1.68
(1,39)	1:951:A:TYR:C	1:952:A:VAL:N	1:952:A:VAL:CA	1:952:A:VAL:C	19	1.67
(1,160)	1:1030:A:VAL:N	1:1030:A:VAL:CA	1:1030:A:VAL:C	1:1031:A:ASP:N	20	1.66
(1,110)	1:996:A:ALA:N	1:996:A:ALA:CA	1:996:A:ALA:C	1:997:A:GLU:N	1	1.66
(1,49)	1:956:A:LYS:C	1:957:A:GLU:N	1:957:A:GLU:CA	1:957:A:GLU:C	5	1.65
(1,23)	1:938:A:GLU:C	1:939:A:MET:N	1:939:A:MET:CA	1:939:A:MET:C	18	1.65
(1,20)	1:935:A:ALA:N	1:935:A:ALA:CA	1:935:A:ALA:C	1:936:A:VAL:N	17	1.65
(1,12)	1:931:A:GLY:N	1:931:A:GLY:CA	1:931:A:GLY:C	1:932:A:LEU:N	3	1.65
(1,12)	1:931:A:GLY:N	1:931:A:GLY:CA	1:931:A:GLY:C	1:932:A:LEU:N	16	1.65
(1,17)	1:933:A:VAL:C	1:934:A:LYS:N	1:934:A:LYS:CA	1:934:A:LYS:C	9	1.64
(1,6)	1:926:A:TYR:N	1:926:A:TYR:CA	1:926:A:TYR:C	1:927:A:GLU:N	24	1.64
(1,163)	1:1031:A:ASP:C	1:1032:A:ALA:N	1:1032:A:ALA:CA	1:1032:A:ALA:C	4	1.63
(1,135)	1:1017:A:TYR:C	1:1018:A:LYS:N	1:1018:A:LYS:CA	1:1018:A:LYS:C	22	1.63
(1,10)	1:929:A:VAL:N	1:929:A:VAL:CA	1:929:A:VAL:C	1:930:A:THR:N	12	1.63
(1,156)	1:1028:A:LEU:N	1:1028:A:LEU:CA	1:1028:A:LEU:C	1:1029:A:ALA:N	18	1.62
(1,138)	1:1019:A:LYS:N	1:1019:A:LYS:CA	1:1019:A:LYS:C	1:1020:A:GLN:N	22	1.62
(1,138)	1:1019:A:LYS:N	1:1019:A:LYS:CA	1:1019:A:LYS:C	1:1020:A:GLN:N	9	1.61
(1,89)	1:984:A:ILE:C	1:985:A:GLU:N	1:985:A:GLU:CA	1:985:A:GLU:C	20	1.61
(1,79)	1:979:A:SER:C	1:980:A:THR:N	1:980:A:THR:CA	1:980:A:THR:C	11	1.61
(1,53)	1:958:A:VAL:C	1:959:A:GLY:N	1:959:A:GLY:CA	1:959:A:GLY:C	5	1.61
(1,37)	1:948:A:PRO:C	1:949:A:GLU:N	1:949:A:GLU:CA	1:949:A:GLU:C	6	1.61
(1,180)	1:1043:A:ARG:N	1:1043:A:ARG:CA	1:1043:A:ARG:C	1:1044:A:LEU:N	15	1.6
(1,176)	1:1041:A:GLN:N	1:1041:A:GLN:CA	1:1041:A:GLN:C	1:1042:A:ALA:N	8	1.59
(1,150)	1:1025:A:ALA:N	1:1025:A:ALA:CA	1:1025:A:ALA:C	1:1026:A:HIS:N	2	1.59
(1,110)	1:996:A:ALA:N	1:996:A:ALA:CA	1:996:A:ALA:C	1:997:A:GLU:N	24	1.59
(1,154)	1:1027:A:ALA:N	1:1027:A:ALA:CA	1:1027:A:ALA:C	1:1028:A:LEU:N	8	1.58
(1,118)	1:1003:A:LYS:N	1:1003:A:LYS:CA	1:1003:A:LYS:C	1:1004:A:LEU:N	5	1.58
(1,156)	1:1028:A:LEU:N	1:1028:A:LEU:CA	1:1028:A:LEU:C	1:1029:A:ALA:N	24	1.57
(1,109)	1:995:A:LEU:C	1:996:A:ALA:N	1:996:A:ALA:CA	1:996:A:ALA:C	14	1.57

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,50)	1:957:A:GLU:N	1:957:A:GLU:CA	1:957:A:GLU:C	1:958:A:VAL:N	4	1.57
(1,3)	1:924:A:LYS:C	1:925:A:VAL:N	1:925:A:VAL:CA	1:925:A:VAL:C	15	1.56
(1,156)	1:1028:A:LEU:N	1:1028:A:LEU:CA	1:1028:A:LEU:C	1:1029:A:ALA:N	6	1.55
(1,103)	1:991:A:LEU:C	1:992:A:ASN:N	1:992:A:ASN:CA	1:992:A:ASN:C	21	1.55
(1,91)	1:985:A:GLU:C	1:986:A:MET:N	1:986:A:MET:CA	1:986:A:MET:C	1	1.55
(1,130)	1:1014:A:GLN:N	1:1014:A:GLN:CA	1:1014:A:GLN:C	1:1015:A:GLN:N	6	1.53
(1,104)	1:992:A:ASN:N	1:992:A:ASN:CA	1:992:A:ASN:C	1:993:A:SER:N	21	1.53
(1,97)	1:988:A:GLN:C	1:989:A:LYS:N	1:989:A:LYS:CA	1:989:A:LYS:C	17	1.53
(1,55)	1:959:A:GLY:C	1:960:A:LEU:N	1:960:A:LEU:CA	1:960:A:LEU:C	4	1.53
(1,43)	1:953:A:PRO:C	1:954:A:MET:N	1:954:A:MET:CA	1:954:A:MET:C	10	1.53
(1,127)	1:1012:A:SER:C	1:1013:A:LEU:N	1:1013:A:LEU:CA	1:1013:A:LEU:C	14	1.52
(1,110)	1:996:A:ALA:N	1:996:A:ALA:CA	1:996:A:ALA:C	1:997:A:GLU:N	20	1.52
(1,106)	1:993:A:SER:N	1:993:A:SER:CA	1:993:A:SER:C	1:994:A:ASP:N	16	1.52
(1,135)	1:1017:A:TYR:C	1:1018:A:LYS:N	1:1018:A:LYS:CA	1:1018:A:LYS:C	14	1.51
(1,170)	1:1035:A:LEU:N	1:1035:A:LEU:CA	1:1035:A:LEU:C	1:1036:A:LEU:N	22	1.48
(1,117)	1:1002:A:MET:C	1:1003:A:LYS:N	1:1003:A:LYS:CA	1:1003:A:LYS:C	14	1.48
(1,78)	1:975:A:VAL:N	1:975:A:VAL:CA	1:975:A:VAL:C	1:976:A:LEU:N	5	1.48
(1,15)	1:932:A:LEU:C	1:933:A:VAL:N	1:933:A:VAL:CA	1:933:A:VAL:C	5	1.48
(1,90)	1:985:A:GLU:N	1:985:A:GLU:CA	1:985:A:GLU:C	1:986:A:MET:N	14	1.47
(1,65)	1:967:A:ALA:C	1:968:A:THR:N	1:968:A:THR:CA	1:968:A:THR:C	12	1.47
(1,6)	1:926:A:TYR:N	1:926:A:TYR:CA	1:926:A:TYR:C	1:927:A:GLU:N	5	1.47
(1,178)	1:1042:A:ALA:N	1:1042:A:ALA:CA	1:1042:A:ALA:C	1:1043:A:ARG:N	14	1.46
(1,168)	1:1034:A:ASN:N	1:1034:A:ASN:CA	1:1034:A:ASN:C	1:1035:A:LEU:N	17	1.46
(1,9)	1:928:A:ASN:C	1:929:A:VAL:N	1:929:A:VAL:CA	1:929:A:VAL:C	8	1.46
(1,156)	1:1028:A:LEU:N	1:1028:A:LEU:CA	1:1028:A:LEU:C	1:1029:A:ALA:N	12	1.45
(1,149)	1:1024:A:ALA:C	1:1025:A:ALA:N	1:1025:A:ALA:CA	1:1025:A:ALA:C	22	1.45
(1,137)	1:1018:A:LYS:C	1:1019:A:LYS:N	1:1019:A:LYS:CA	1:1019:A:LYS:C	1	1.44
(1,88)	1:984:A:ILE:N	1:984:A:ILE:CA	1:984:A:ILE:C	1:985:A:GLU:N	23	1.44
(1,53)	1:958:A:VAL:C	1:959:A:GLY:N	1:959:A:GLY:CA	1:959:A:GLY:C	4	1.44
(1,121)	1:1004:A:LEU:C	1:1005:A:ALA:N	1:1005:A:ALA:CA	1:1005:A:ALA:C	14	1.43
(1,108)	1:995:A:LEU:N	1:995:A:LEU:CA	1:995:A:LEU:C	1:996:A:ALA:N	19	1.43
(1,49)	1:956:A:LYS:C	1:957:A:GLU:N	1:957:A:GLU:CA	1:957:A:GLU:C	23	1.43
(1,59)	1:964:A:THR:C	1:965:A:LEU:N	1:965:A:LEU:CA	1:965:A:LEU:C	8	1.42
(1,30)	1:942:A:LYS:N	1:942:A:LYS:CA	1:942:A:LYS:C	1:943:A:ILE:N	1	1.42
(1,25)	1:939:A:MET:C	1:940:A:SER:N	1:940:A:SER:CA	1:940:A:SER:C	3	1.42
(1,7)	1:927:A:GLU:C	1:928:A:ASN:N	1:928:A:ASN:CA	1:928:A:ASN:C	13	1.42
(1,143)	1:1021:A:MET:C	1:1022:A:LEU:N	1:1022:A:LEU:CA	1:1022:A:LEU:C	19	1.41
(1,133)	1:1015:A:GLN:C	1:1016:A:GLU:N	1:1016:A:GLU:CA	1:1016:A:GLU:C	24	1.41
(1,70)	1:970:A:ASP:N	1:970:A:ASP:CA	1:970:A:ASP:C	1:971:A:GLU:N	3	1.41
(1,60)	1:965:A:LEU:N	1:965:A:LEU:CA	1:965:A:LEU:C	1:966:A:LEU:N	24	1.41
(1,49)	1:956:A:LYS:C	1:957:A:GLU:N	1:957:A:GLU:CA	1:957:A:GLU:C	19	1.41
(1,12)	1:931:A:GLY:N	1:931:A:GLY:CA	1:931:A:GLY:C	1:932:A:LEU:N	10	1.41
(1,136)	1:1018:A:LYS:N	1:1018:A:LYS:CA	1:1018:A:LYS:C	1:1019:A:LYS:N	13	1.39
(1,45)	1:954:A:MET:C	1:955:A:VAL:N	1:955:A:VAL:CA	1:955:A:VAL:C	24	1.39
(1,13)	1:931:A:GLY:C	1:932:A:LEU:N	1:932:A:LEU:CA	1:932:A:LEU:C	22	1.39
(1,163)	1:1031:A:ASP:C	1:1032:A:ALA:N	1:1032:A:ALA:CA	1:1032:A:ALA:C	23	1.38
(1,17)	1:933:A:VAL:C	1:934:A:LYS:N	1:934:A:LYS:CA	1:934:A:LYS:C	22	1.38
(1,87)	1:983:A:GLU:C	1:984:A:ILE:N	1:984:A:ILE:CA	1:984:A:ILE:C	20	1.37
(1,86)	1:983:A:GLU:N	1:983:A:GLU:CA	1:983:A:GLU:C	1:984:A:ILE:N	11	1.37
(1,55)	1:959:A:GLY:C	1:960:A:LEU:N	1:960:A:LEU:CA	1:960:A:LEU:C	24	1.37
(1,25)	1:939:A:MET:C	1:940:A:SER:N	1:940:A:SER:CA	1:940:A:SER:C	7	1.36

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,3)	1:924:A:LYS:C	1:925:A:VAL:N	1:925:A:VAL:CA	1:925:A:VAL:C	4	1.35
(1,73)	1:972:A:SER:C	1:973:A:LEU:N	1:973:A:LEU:CA	1:973:A:LEU:C	24	1.34
(1,118)	1:1003:A:LYS:N	1:1003:A:LYS:CA	1:1003:A:LYS:C	1:1004:A:LEU:N	3	1.33
(1,134)	1:1016:A:GLU:N	1:1016:A:GLU:CA	1:1016:A:GLU:C	1:1017:A:TYR:N	1	1.32
(1,183)	1:1044:A:LEU:C	1:1045:A:LYS:N	1:1045:A:LYS:CA	1:1045:A:LYS:C	6	1.31
(1,166)	1:1033:A:LYS:N	1:1033:A:LYS:CA	1:1033:A:LYS:C	1:1034:A:ASN:N	16	1.31
(1,140)	1:1020:A:GLN:N	1:1020:A:GLN:CA	1:1020:A:GLN:C	1:1021:A:MET:N	8	1.31
(1,40)	1:952:A:VAL:N	1:952:A:VAL:CA	1:952:A:VAL:C	1:953:A:PRO:N	20	1.31
(1,129)	1:1013:A:LEU:C	1:1014:A:GLN:N	1:1014:A:GLN:CA	1:1014:A:GLN:C	4	1.3
(1,122)	1:1005:A:ALA:N	1:1005:A:ALA:CA	1:1005:A:ALA:C	1:1006:A:GLN:N	20	1.3
(1,95)	1:987:A:ALA:C	1:988:A:GLN:N	1:988:A:GLN:CA	1:988:A:GLN:C	12	1.3
(1,31)	1:942:A:LYS:C	1:943:A:ILE:N	1:943:A:ILE:CA	1:943:A:ILE:C	25	1.3
(1,6)	1:926:A:TYR:N	1:926:A:TYR:CA	1:926:A:TYR:C	1:927:A:GLU:N	10	1.3
(1,162)	1:1031:A:ASP:N	1:1031:A:ASP:CA	1:1031:A:ASP:C	1:1032:A:ALA:N	17	1.29
(1,145)	1:1022:A:LEU:C	1:1023:A:THR:N	1:1023:A:THR:CA	1:1023:A:THR:C	1	1.29
(1,61)	1:965:A:LEU:C	1:966:A:LEU:N	1:966:A:LEU:CA	1:966:A:LEU:C	17	1.29
(1,11)	1:930:A:THR:C	1:931:A:GLY:N	1:931:A:GLY:CA	1:931:A:GLY:C	11	1.29
(1,137)	1:1018:A:LYS:C	1:1019:A:LYS:N	1:1019:A:LYS:CA	1:1019:A:LYS:C	3	1.28
(1,115)	1:1001:A:LYS:C	1:1002:A:MET:N	1:1002:A:MET:CA	1:1002:A:MET:C	4	1.28
(1,89)	1:984:A:ILE:C	1:985:A:GLU:N	1:985:A:GLU:CA	1:985:A:GLU:C	5	1.28
(1,172)	1:1036:A:LEU:N	1:1036:A:LEU:CA	1:1036:A:LEU:C	1:1037:A:ASP:N	3	1.27
(1,107)	1:994:A:ASP:C	1:995:A:LEU:N	1:995:A:LEU:CA	1:995:A:LEU:C	4	1.27
(1,90)	1:985:A:GLU:N	1:985:A:GLU:CA	1:985:A:GLU:C	1:986:A:MET:N	19	1.26
(1,120)	1:1004:A:LEU:N	1:1004:A:LEU:CA	1:1004:A:LEU:C	1:1005:A:ALA:N	17	1.25
(1,87)	1:983:A:GLU:C	1:984:A:ILE:N	1:984:A:ILE:CA	1:984:A:ILE:C	6	1.25
(1,162)	1:1031:A:ASP:N	1:1031:A:ASP:CA	1:1031:A:ASP:C	1:1032:A:ALA:N	23	1.24
(1,135)	1:1017:A:TYR:C	1:1018:A:LYS:N	1:1018:A:LYS:CA	1:1018:A:LYS:C	13	1.24
(1,36)	1:948:A:PRO:N	1:948:A:PRO:CA	1:948:A:PRO:C	1:949:A:GLU:N	19	1.24
(1,180)	1:1043:A:ARG:N	1:1043:A:ARG:CA	1:1043:A:ARG:C	1:1044:A:LEU:N	23	1.23
(1,162)	1:1031:A:ASP:N	1:1031:A:ASP:CA	1:1031:A:ASP:C	1:1032:A:ALA:N	2	1.23
(1,64)	1:967:A:ALA:N	1:967:A:ALA:CA	1:967:A:ALA:C	1:968:A:THR:N	13	1.23
(1,58)	1:961:A:ALA:N	1:961:A:ALA:CA	1:961:A:ALA:C	1:962:A:LEU:N	7	1.23
(1,78)	1:975:A:VAL:N	1:975:A:VAL:CA	1:975:A:VAL:C	1:976:A:LEU:N	14	1.22
(1,19)	1:934:A:LYS:C	1:935:A:ALA:N	1:935:A:ALA:CA	1:935:A:ALA:C	8	1.22
(1,146)	1:1023:A:THR:N	1:1023:A:THR:CA	1:1023:A:THR:C	1:1024:A:ALA:N	8	1.21
(1,131)	1:1014:A:GLN:C	1:1015:A:GLN:N	1:1015:A:GLN:CA	1:1015:A:GLN:C	15	1.21
(1,128)	1:1013:A:LEU:N	1:1013:A:LEU:CA	1:1013:A:LEU:C	1:1014:A:GLN:N	24	1.21
(1,7)	1:927:A:GLU:C	1:928:A:ASN:N	1:928:A:ASN:CA	1:928:A:ASN:C	5	1.21
(1,79)	1:979:A:SER:C	1:980:A:THR:N	1:980:A:THR:CA	1:980:A:THR:C	10	1.2
(1,111)	1:996:A:ALA:C	1:997:A:GLU:N	1:997:A:GLU:CA	1:997:A:GLU:C	9	1.19
(1,97)	1:988:A:GLN:C	1:989:A:LYS:N	1:989:A:LYS:CA	1:989:A:LYS:C	21	1.19
(1,36)	1:948:A:PRO:N	1:948:A:PRO:CA	1:948:A:PRO:C	1:949:A:GLU:N	12	1.19
(1,175)	1:1040:A:ASP:C	1:1041:A:GLN:N	1:1041:A:GLN:CA	1:1041:A:GLN:C	15	1.18
(1,105)	1:992:A:ASN:C	1:993:A:SER:N	1:993:A:SER:CA	1:993:A:SER:C	16	1.18
(1,92)	1:986:A:MET:N	1:986:A:MET:CA	1:986:A:MET:C	1:987:A:ALA:N	19	1.18
(1,119)	1:1003:A:LYS:C	1:1004:A:LEU:N	1:1004:A:LEU:CA	1:1004:A:LEU:C	13	1.17
(1,25)	1:939:A:MET:C	1:940:A:SER:N	1:940:A:SER:CA	1:940:A:SER:C	12	1.17
(1,17)	1:933:A:VAL:C	1:934:A:LYS:N	1:934:A:LYS:CA	1:934:A:LYS:C	5	1.17
(1,8)	1:928:A:ASN:N	1:928:A:ASN:CA	1:928:A:ASN:C	1:929:A:VAL:N	7	1.17
(1,172)	1:1036:A:LEU:N	1:1036:A:LEU:CA	1:1036:A:LEU:C	1:1037:A:ASP:N	4	1.16
(1,105)	1:992:A:ASN:C	1:993:A:SER:N	1:993:A:SER:CA	1:993:A:SER:C	8	1.16

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,120)	1:1004:A:LEU:N	1:1004:A:LEU:CA	1:1004:A:LEU:C	1:1005:A:ALA:N	18	1.15
(1,92)	1:986:A:MET:N	1:986:A:MET:CA	1:986:A:MET:C	1:987:A:ALA:N	14	1.15
(1,60)	1:965:A:LEU:N	1:965:A:LEU:CA	1:965:A:LEU:C	1:966:A:LEU:N	9	1.15
(1,47)	1:955:A:VAL:C	1:956:A:LYS:N	1:956:A:LYS:CA	1:956:A:LYS:C	7	1.15
(1,121)	1:1004:A:LEU:C	1:1005:A:ALA:N	1:1005:A:ALA:CA	1:1005:A:ALA:C	8	1.14
(1,120)	1:1004:A:LEU:N	1:1004:A:LEU:CA	1:1004:A:LEU:C	1:1005:A:ALA:N	11	1.14
(1,95)	1:987:A:ALA:C	1:988:A:GLN:N	1:988:A:GLN:CA	1:988:A:GLN:C	11	1.14
(1,89)	1:984:A:ILE:C	1:985:A:GLU:N	1:985:A:GLU:CA	1:985:A:GLU:C	12	1.14
(1,43)	1:953:A:PRO:C	1:954:A:MET:N	1:954:A:MET:CA	1:954:A:MET:C	16	1.14
(1,31)	1:942:A:LYS:C	1:943:A:ILE:N	1:943:A:ILE:CA	1:943:A:ILE:C	10	1.14
(1,97)	1:988:A:GLN:C	1:989:A:LYS:N	1:989:A:LYS:CA	1:989:A:LYS:C	23	1.13
(1,73)	1:972:A:SER:C	1:973:A:LEU:N	1:973:A:LEU:CA	1:973:A:LEU:C	8	1.13
(1,59)	1:964:A:THR:C	1:965:A:LEU:N	1:965:A:LEU:CA	1:965:A:LEU:C	21	1.13
(1,39)	1:951:A:TYR:C	1:952:A:VAL:N	1:952:A:VAL:CA	1:952:A:VAL:C	25	1.13
(1,160)	1:1030:A:VAL:N	1:1030:A:VAL:CA	1:1030:A:VAL:C	1:1031:A:ASP:N	2	1.12
(1,107)	1:994:A:ASP:C	1:995:A:LEU:N	1:995:A:LEU:CA	1:995:A:LEU:C	20	1.12
(1,168)	1:1034:A:ASN:N	1:1034:A:ASN:CA	1:1034:A:ASN:C	1:1035:A:LEU:N	16	1.11
(1,153)	1:1026:A:HIS:C	1:1027:A:ALA:N	1:1027:A:ALA:CA	1:1027:A:ALA:C	24	1.11
(1,181)	1:1043:A:ARG:C	1:1044:A:LEU:N	1:1044:A:LEU:CA	1:1044:A:LEU:C	18	1.1
(1,143)	1:1021:A:MET:C	1:1022:A:LEU:N	1:1022:A:LEU:CA	1:1022:A:LEU:C	15	1.1
(1,117)	1:1002:A:MET:C	1:1003:A:LYS:N	1:1003:A:LYS:CA	1:1003:A:LYS:C	22	1.1
(1,3)	1:924:A:LYS:C	1:925:A:VAL:N	1:925:A:VAL:CA	1:925:A:VAL:C	2	1.1
(1,167)	1:1033:A:LYS:C	1:1034:A:ASN:N	1:1034:A:ASN:CA	1:1034:A:ASN:C	20	1.09
(1,102)	1:991:A:LEU:N	1:991:A:LEU:CA	1:991:A:LEU:C	1:992:A:ASN:N	13	1.09
(1,56)	1:960:A:LEU:N	1:960:A:LEU:CA	1:960:A:LEU:C	1:961:A:ALA:N	6	1.09
(1,41)	1:952:A:VAL:C	1:953:A:PRO:N	1:953:A:PRO:CA	1:953:A:PRO:C	13	1.09
(1,9)	1:928:A:ASN:C	1:929:A:VAL:N	1:929:A:VAL:CA	1:929:A:VAL:C	18	1.08
(1,157)	1:1028:A:LEU:C	1:1029:A:ALA:N	1:1029:A:ALA:CA	1:1029:A:ALA:C	4	1.05
(1,171)	1:1035:A:LEU:C	1:1036:A:LEU:N	1:1036:A:LEU:CA	1:1036:A:LEU:C	9	1.04
(1,163)	1:1031:A:ASP:C	1:1032:A:ALA:N	1:1032:A:ALA:CA	1:1032:A:ALA:C	8	1.04
(1,156)	1:1028:A:LEU:N	1:1028:A:LEU:CA	1:1028:A:LEU:C	1:1029:A:ALA:N	4	1.04
(1,138)	1:1019:A:LYS:N	1:1019:A:LYS:CA	1:1019:A:LYS:C	1:1020:A:GLN:N	15	1.03
(1,98)	1:989:A:LYS:N	1:989:A:LYS:CA	1:989:A:LYS:C	1:990:A:LEU:N	9	1.03
(1,98)	1:989:A:LYS:N	1:989:A:LYS:CA	1:989:A:LYS:C	1:990:A:LEU:N	12	1.03
(1,179)	1:1042:A:ALA:C	1:1043:A:ARG:N	1:1043:A:ARG:CA	1:1043:A:ARG:C	8	1.02
(1,93)	1:986:A:MET:C	1:987:A:ALA:N	1:987:A:ALA:CA	1:987:A:ALA:C	20	1.02
(1,179)	1:1042:A:ALA:C	1:1043:A:ARG:N	1:1043:A:ARG:CA	1:1043:A:ARG:C	10	1.01
(1,140)	1:1020:A:GLN:N	1:1020:A:GLN:CA	1:1020:A:GLN:C	1:1021:A:MET:N	3	1.01
(1,103)	1:991:A:LEU:C	1:992:A:ASN:N	1:992:A:ASN:CA	1:992:A:ASN:C	8	1.01
(1,12)	1:931:A:GLY:N	1:931:A:GLY:CA	1:931:A:GLY:C	1:932:A:LEU:N	25	1.01
(1,159)	1:1029:A:ALA:C	1:1030:A:VAL:N	1:1030:A:VAL:CA	1:1030:A:VAL:C	4	1.0
(1,108)	1:995:A:LEU:N	1:995:A:LEU:CA	1:995:A:LEU:C	1:996:A:ALA:N	5	1.0