



Full wwPDB NMR Structure Validation Report ⓘ

Mar 4, 2026 – 05:40 PM UTC

PDB ID : 6TWE / pdb_00006twe
BMRB ID : 19984
Title : Cu(I) NMR solution structure of the chitin-active lytic polysaccharide monooxygenase BILPMO10A
Authors : Courtade, G.; Wimmer, R.; Achmann, F.L.
Deposited on : 2020-01-13

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

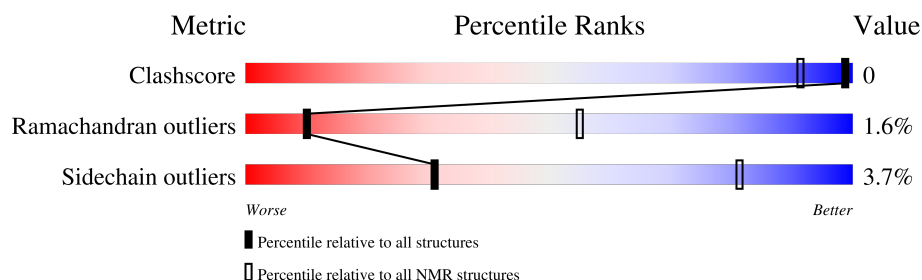
1 Overall quality at a glance

The following experimental techniques were used to determine the structure:

SOLUTION NMR

The overall completeness of chemical shifts assignment is 84%.

Percentile scores (ranging between 0-100) for global validation metrics of the entry are shown in the following graphic. The table shows the number of entries on which the scores are based.



Metric	Whole archive (#Entries)	NMR archive (#Entries)
Clashscore	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	172	

2 Ensemble composition and analysis

This entry contains 20 models. Model 2 is the overall representative, medoid model (most similar to other models). The authors have identified model 1 as representative, based on the following criterion: *target function*.

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:1-A:13, A:29-A:39, A:57-A:172 (140)	2.06	2

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

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

The models can be grouped into 5 clusters and 2 single-model clusters were found.

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

3 Entry composition [i](#)

There are 2 unique types of molecules in this entry. The entry contains 2635 atoms, of which 1275 are hydrogens and 0 are deuteriums.

- Molecule 1 is a protein called Putative chitin binding protein.

Mol	Chain	Residues	Atoms						Trace
1	A	172	Total	C	H	N	O	S	0
			2634	869	1275	234	252	4	

- Molecule 2 is COPPER (I) ION (CCD ID: CU1) (formula: Cu).

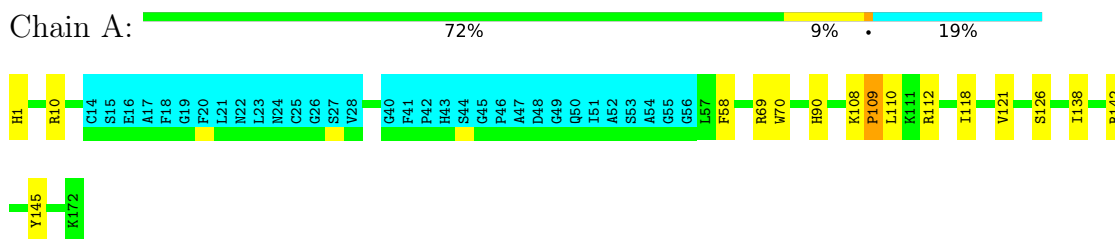
Mol	Chain	Residues	Atoms	
2	A	1	Total	Cu
			1	1

4 Residue-property plots [i](#)

4.1 Average score per residue in the NMR ensemble

These plots are provided for all protein, RNA, DNA and oligosaccharide chains in the entry. The first graphic is the same as shown in the summary in section 1 of this report. The second graphic shows the sequence where residues are colour-coded according to the number of geometric quality criteria for which they contain at least one outlier: green = 0, yellow = 1, orange = 2 and red = 3 or more. Stretches of 2 or more consecutive residues without any outliers are shown as green connectors. Residues which are classified as ill-defined in the NMR ensemble, are shown in cyan with an underline colour-coded according to the previous scheme. Residues which were present in the experimental sample, but not modelled in the final structure are shown in grey.

- Molecule 1: Putative chitin binding protein

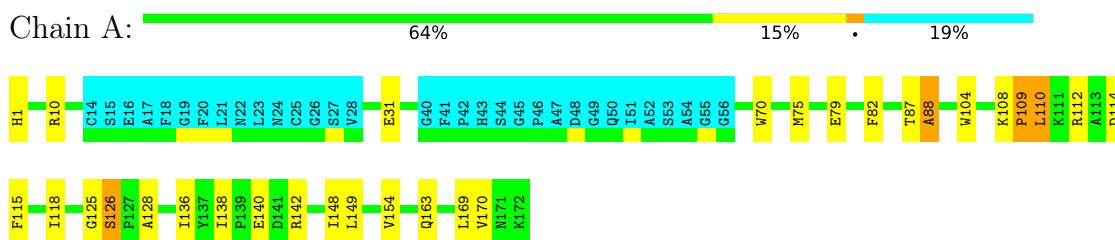


4.2 Scores per residue for each member of the ensemble

Colouring as in section 4.1 above.

4.2.1 Score per residue for model 1

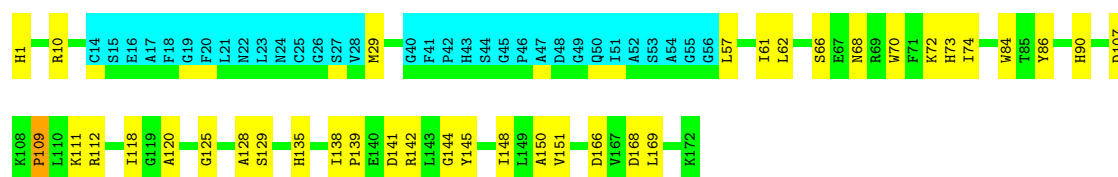
- Molecule 1: Putative chitin binding protein



4.2.2 Score per residue for model 2 (medoid)

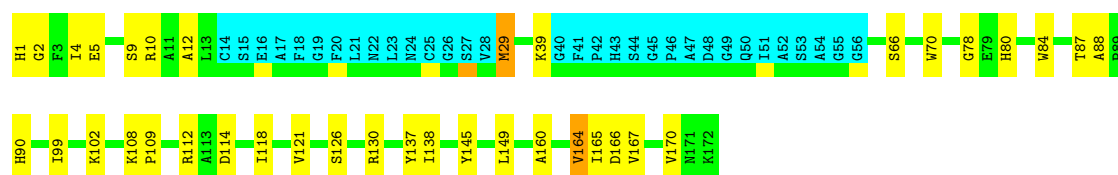
- Molecule 1: Putative chitin binding protein





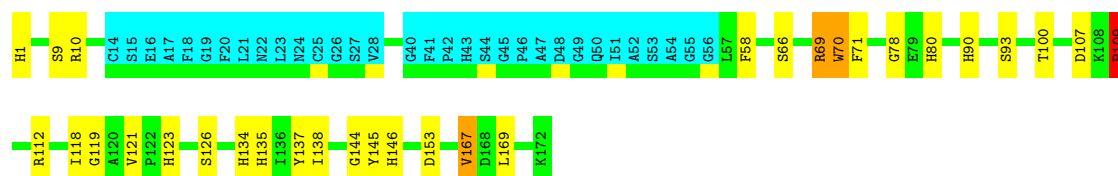
4.2.3 Score per residue for model 3

- Molecule 1: Putative chitin binding protein



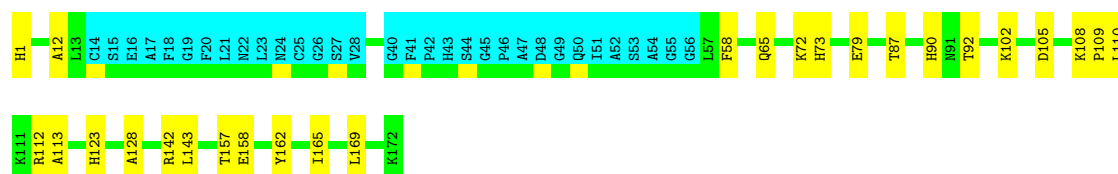
4.2.4 Score per residue for model 4

- Molecule 1: Putative chitin binding protein



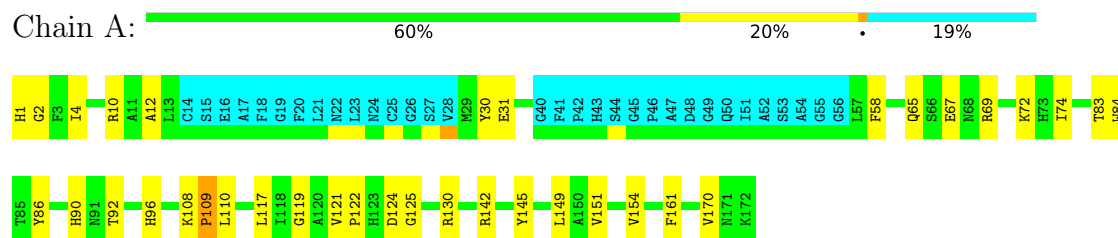
4.2.5 Score per residue for model 5

- Molecule 1: Putative chitin binding protein



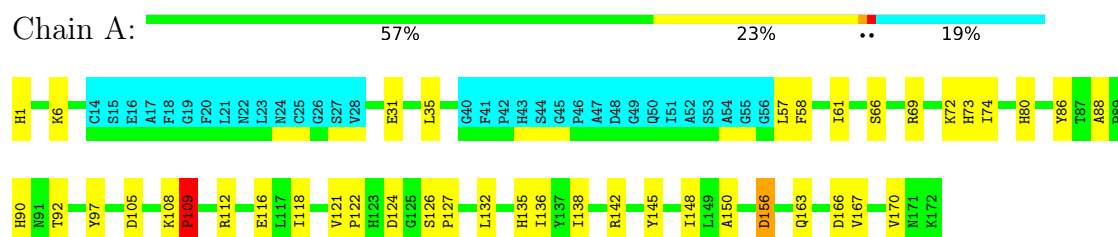
4.2.6 Score per residue for model 6

- Molecule 1: Putative chitin binding protein



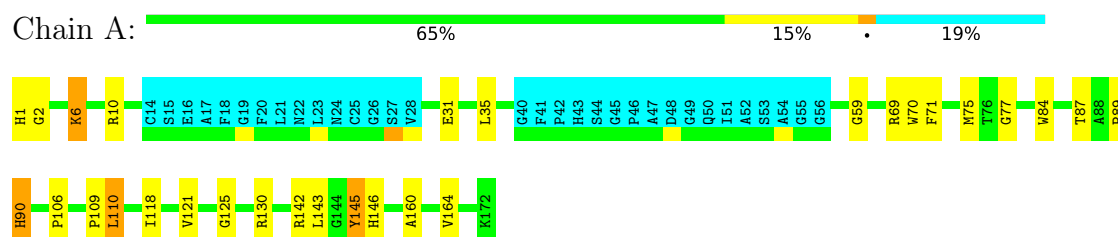
4.2.7 Score per residue for model 7

- Molecule 1: Putative chitin binding protein



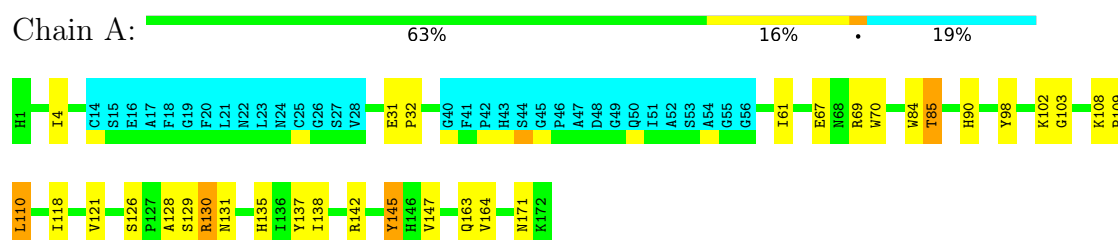
4.2.8 Score per residue for model 8

- Molecule 1: Putative chitin binding protein



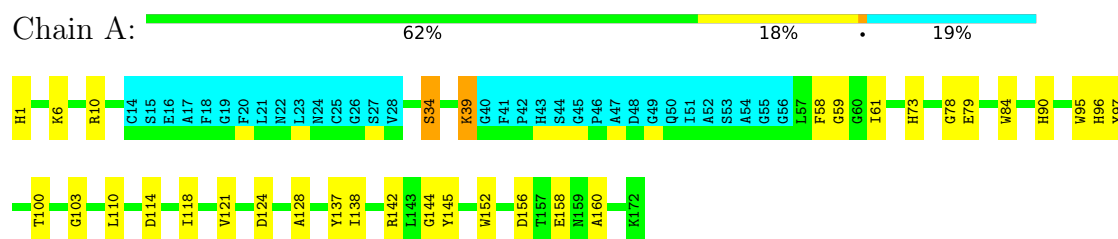
4.2.9 Score per residue for model 9

- Molecule 1: Putative chitin binding protein



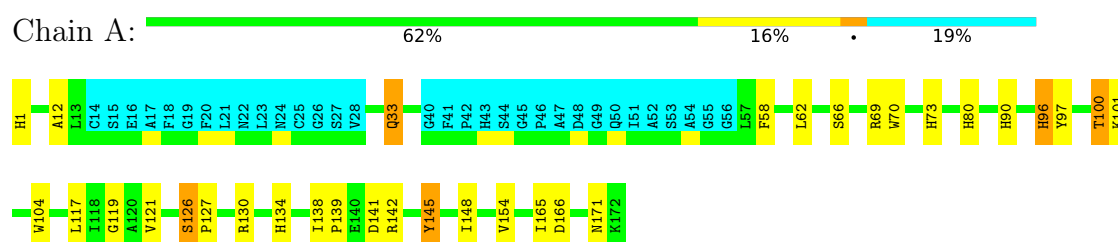
4.2.10 Score per residue for model 10

- Molecule 1: Putative chitin binding protein



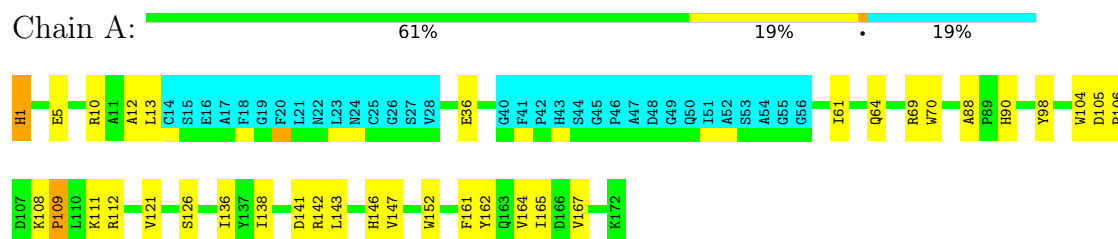
4.2.11 Score per residue for model 11

- Molecule 1: Putative chitin binding protein



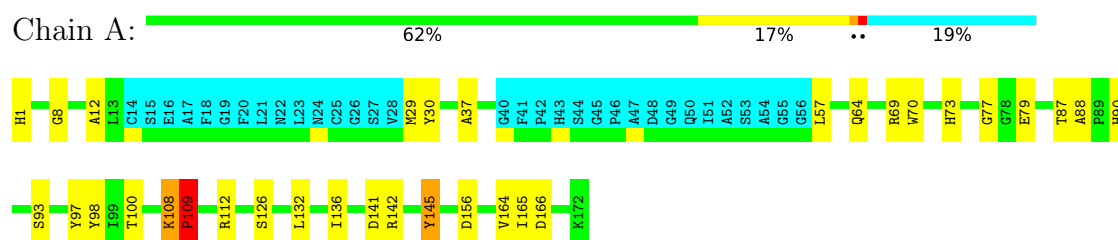
4.2.12 Score per residue for model 12

- Molecule 1: Putative chitin binding protein



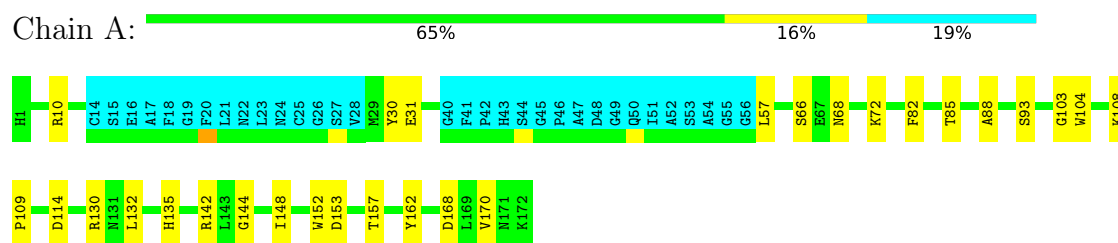
4.2.13 Score per residue for model 13

- Molecule 1: Putative chitin binding protein



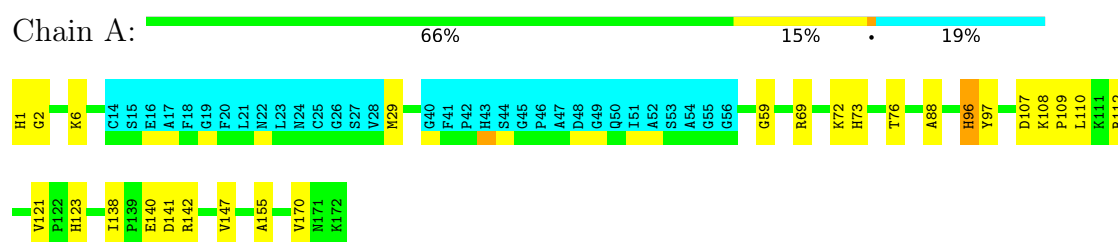
4.2.14 Score per residue for model 14

- Molecule 1: Putative chitin binding protein



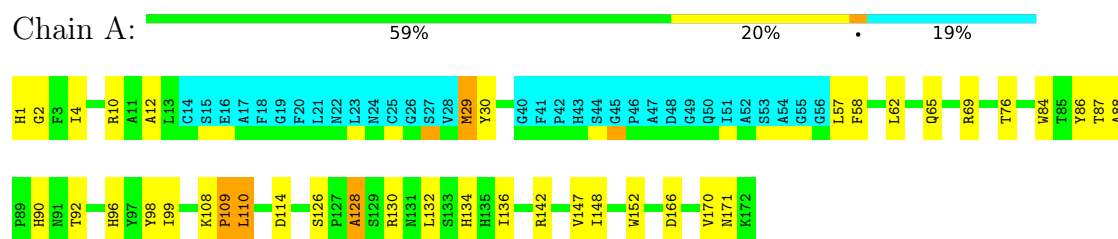
4.2.15 Score per residue for model 15

- Molecule 1: Putative chitin binding protein



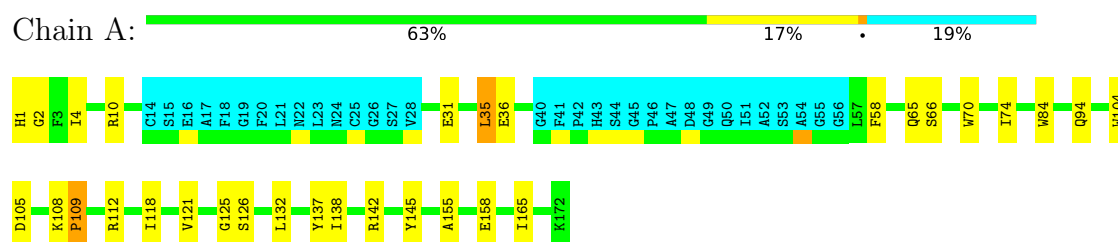
4.2.16 Score per residue for model 16

- Molecule 1: Putative chitin binding protein



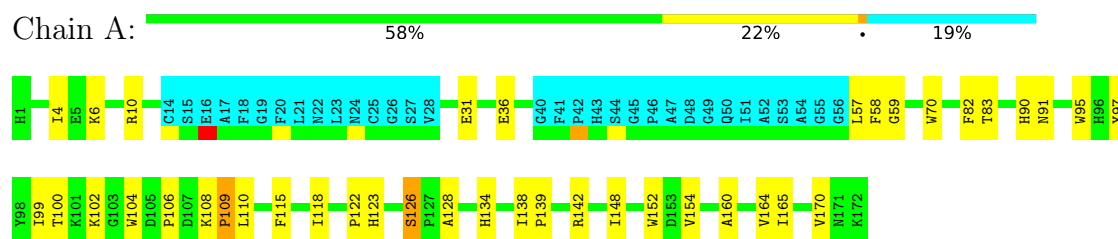
4.2.17 Score per residue for model 17

- Molecule 1: Putative chitin binding protein



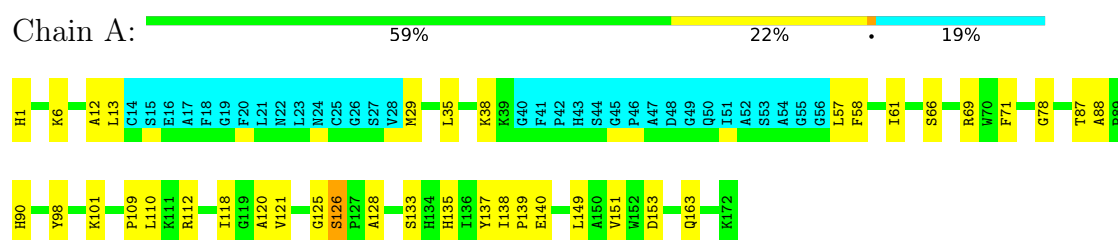
4.2.18 Score per residue for model 18

- Molecule 1: Putative chitin binding protein



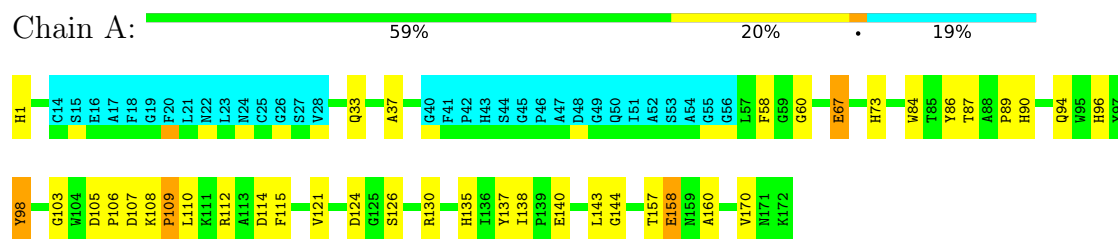
4.2.19 Score per residue for model 19

- Molecule 1: Putative chitin binding protein



4.2.20 Score per residue for model 20

- Molecule 1: Putative chitin binding protein



5 Refinement protocol and experimental data overview

The models were refined using the following method: *molecular dynamics*.

Of the 200 calculated structures, 20 were deposited, based on the following criterion: *target function*.

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

Software name	Classification	Version
CYANA	structure calculation	3.97
YASARA	refinement	14.6.23

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	1921
Number of shifts mapped to atoms	1921
Number of unparsed shifts	0
Number of shifts with mapping errors	0
Number of shifts with mapping warnings	0
Assignment completeness (well-defined parts)	84%

6 Model quality

6.1 Standard geometry

Bond lengths and bond angles in the following residue types are not validated in this section: CU1

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	1.67±0.03	8±3/1184 (0.7± 0.2%)	1.85±0.05	28±5/1610 (1.8± 0.3%)
All	All	1.67	162/23680 (0.7%)	1.85	570/32200 (1.8%)

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	0.1±0.2	1.8±1.2
All	All	1	35

All unique bond outliers are listed below. They are sorted according to the Z-score of the worst occurrence in the ensemble.

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)	Models	
								Worst	Total
1	A	93	SER	CA-C	10.46	1.62	1.52	13	1
1	A	121	VAL	CA-C	9.08	1.62	1.52	17	2
1	A	121	VAL	CA-CB	8.63	1.65	1.54	9	4
1	A	138	ILE	CA-CB	8.37	1.60	1.54	11	5
1	A	170	VAL	CA-CB	8.06	1.65	1.54	1	2
1	A	74	ILE	CA-CB	8.04	1.63	1.54	6	2
1	A	83	THR	CA-C	-7.75	1.43	1.52	6	1
1	A	112	ARG	CA-C	-7.11	1.48	1.52	3	2
1	A	1	HIS	ND1-CE1	7.02	1.39	1.32	7	9
1	A	108	LYS	N-CA	-6.99	1.41	1.46	18	1
1	A	141	ASP	N-CA	6.95	1.54	1.46	15	1
1	A	12	ALA	CA-CB	-6.83	1.42	1.53	6	2
1	A	166	ASP	C-O	6.83	1.32	1.24	7	1
1	A	118	ILE	CA-CB	6.82	1.64	1.54	10	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)	Models	
								Worst	Total
1	A	166	ASP	CA-C	6.82	1.61	1.52	2	1
1	A	154	VAL	C-O	-6.75	1.17	1.24	18	1
1	A	84	TRP	N-CA	6.69	1.54	1.46	2	1
1	A	164	VAL	C-O	-6.69	1.17	1.24	8	1
1	A	82	PHE	CA-C	6.66	1.60	1.52	18	1
1	A	86	TYR	CA-C	6.63	1.60	1.52	7	1
1	A	151	VAL	CA-CB	6.58	1.62	1.54	2	1
1	A	37	ALA	CA-C	6.57	1.61	1.53	20	1
1	A	62	LEU	C-O	6.55	1.32	1.24	2	1
1	A	59	GLY	C-O	-6.54	1.16	1.24	8	1
1	A	89	PRO	CA-C	6.48	1.60	1.52	8	1
1	A	1	HIS	CE1-NE2	6.47	1.39	1.32	16	6
1	A	170	VAL	N-CA	6.43	1.53	1.46	14	1
1	A	31	GLU	CA-CB	6.42	1.60	1.53	9	1
1	A	136	ILE	CA-CB	6.39	1.62	1.54	16	2
1	A	66	SER	CA-C	6.37	1.60	1.52	7	1
1	A	80	HIS	CA-C	-6.35	1.45	1.52	3	1
1	A	169	LEU	C-O	-6.22	1.16	1.24	1	2
1	A	72	LYS	N-CA	6.12	1.53	1.45	5	2
1	A	108	LYS	C-O	6.08	1.28	1.24	3	2
1	A	73	HIS	N-CA	6.08	1.53	1.45	11	1
1	A	167	VAL	CA-CB	6.05	1.65	1.55	4	1
1	A	1	HIS	N-CA	5.99	1.57	1.46	4	3
1	A	58	PHE	CA-C	5.98	1.60	1.52	7	1
1	A	96	HIS	CG-ND1	5.97	1.44	1.38	15	1
1	A	73	HIS	CA-C	5.92	1.59	1.52	2	2
1	A	90	HIS	ND1-CE1	5.89	1.38	1.32	16	3
1	A	115	PHE	CA-C	5.87	1.59	1.52	18	1
1	A	87	THR	CA-CB	5.85	1.63	1.53	13	2
1	A	133	SER	C-O	5.85	1.30	1.23	19	1
1	A	4	ILE	CA-CB	5.84	1.60	1.54	18	1
1	A	135	HIS	CG-ND1	5.80	1.44	1.38	4	1
1	A	161	PHE	N-CA	5.78	1.53	1.46	6	1
1	A	70	TRP	C-O	-5.78	1.16	1.24	4	1
1	A	156	ASP	CA-C	5.75	1.60	1.52	10	1
1	A	134	HIS	C-O	-5.74	1.16	1.23	4	1
1	A	76	THR	CA-C	-5.74	1.45	1.53	15	1
1	A	124	ASP	CA-CB	5.70	1.60	1.53	7	1
1	A	165	ILE	CA-CB	5.70	1.61	1.54	12	2
1	A	33	GLN	C-O	-5.69	1.16	1.24	11	1
1	A	98	TYR	C-O	-5.68	1.16	1.23	9	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)	Models	
								Worst	Total
1	A	110	LEU	CA-C	5.66	1.60	1.52	18	2
1	A	80	HIS	CE1-NE2	-5.65	1.26	1.32	4	2
1	A	114	ASP	CA-C	5.62	1.60	1.52	3	1
1	A	69	ARG	CZ-NH1	-5.62	1.24	1.32	8	2
1	A	6	LYS	CA-C	5.57	1.59	1.52	18	1
1	A	142	ARG	CD-NE	5.55	1.54	1.46	1	1
1	A	77	GLY	C-O	-5.55	1.16	1.23	13	1
1	A	123	HIS	CE1-NE2	-5.54	1.27	1.32	5	1
1	A	4	ILE	C-O	-5.53	1.18	1.24	3	1
1	A	139	PRO	CA-CB	-5.53	1.46	1.53	11	1
1	A	61	ILE	N-CA	5.52	1.53	1.46	19	2
1	A	69	ARG	CZ-NH2	-5.52	1.26	1.33	16	1
1	A	154	VAL	CA-CB	5.51	1.60	1.53	18	1
1	A	147	VAL	CA-C	5.51	1.59	1.52	15	1
1	A	88	ALA	CA-CB	-5.51	1.46	1.54	19	1
1	A	70	TRP	CA-C	-5.48	1.45	1.52	3	1
1	A	112	ARG	C-O	-5.46	1.17	1.24	7	1
1	A	169	LEU	CA-C	-5.46	1.45	1.52	2	1
1	A	12	ALA	C-O	5.46	1.31	1.24	3	1
1	A	108	LYS	CA-C	5.44	1.57	1.52	18	1
1	A	139	PRO	N-CA	5.44	1.53	1.47	18	1
1	A	135	HIS	C-O	5.43	1.30	1.24	2	2
1	A	35	LEU	C-O	-5.43	1.16	1.23	8	2
1	A	78	GLY	CA-C	5.36	1.57	1.52	10	1
1	A	79	GLU	CD-OE1	5.31	1.35	1.25	13	1
1	A	35	LEU	CA-C	5.31	1.59	1.52	17	1
1	A	85	THR	C-O	-5.29	1.18	1.24	9	1
1	A	171	ASN	N-CA	-5.29	1.39	1.45	11	1
1	A	150	ALA	CA-C	-5.28	1.46	1.52	7	1
1	A	80	HIS	N-CA	5.24	1.52	1.45	7	1
1	A	84	TRP	C-O	5.24	1.30	1.24	17	1
1	A	99	ILE	CA-CB	5.23	1.63	1.54	16	2
1	A	157	THR	CA-CB	5.22	1.62	1.53	20	1
1	A	6	LYS	CA-CB	5.22	1.61	1.53	8	1
1	A	86	TYR	N-CA	5.19	1.52	1.46	20	1
1	A	36	GLU	CA-C	-5.17	1.46	1.53	18	1
1	A	138	ILE	CA-C	5.16	1.57	1.53	1	1
1	A	160	ALA	CA-C	5.16	1.58	1.52	20	1
1	A	127	PRO	C-O	-5.15	1.18	1.23	11	1
1	A	130	ARG	CZ-NH2	-5.14	1.26	1.33	11	1
1	A	148	ILE	CA-CB	5.12	1.60	1.54	11	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)	Models	
								Worst	Total
1	A	33	GLN	CD-NE2	-5.12	1.22	1.33	20	1
1	A	69	ARG	C-O	-5.11	1.17	1.23	11	1
1	A	162	TYR	C-O	-5.11	1.17	1.23	14	1
1	A	135	HIS	N-CA	5.10	1.52	1.46	20	1
1	A	82	PHE	C-O	-5.10	1.17	1.24	14	1
1	A	109	PRO	CA-CB	-5.10	1.46	1.53	4	1
1	A	119	GLY	N-CA	5.09	1.50	1.45	6	1
1	A	101	LYS	C-O	5.07	1.30	1.23	19	1
1	A	135	HIS	ND1-CE1	-5.06	1.27	1.32	7	1
1	A	73	HIS	CG-ND1	5.06	1.43	1.38	20	1
1	A	130	ARG	CZ-NH1	-5.06	1.25	1.32	14	1
1	A	72	LYS	CA-C	5.05	1.59	1.52	15	1
1	A	165	ILE	CA-C	5.05	1.58	1.52	17	1
1	A	57	LEU	CA-CB	5.04	1.61	1.53	14	1
1	A	143	LEU	CA-C	5.04	1.59	1.52	5	1
1	A	75	MET	CA-C	5.03	1.58	1.52	8	1
1	A	92	THR	CA-CB	5.02	1.61	1.53	6	1
1	A	10	ARG	CZ-NH2	-5.01	1.26	1.33	10	1
1	A	98	TYR	N-CA	5.01	1.52	1.45	20	1
1	A	78	GLY	N-CA	5.01	1.49	1.45	19	1
1	A	139	PRO	CA-C	-5.01	1.46	1.52	19	1

All unique angle outliers are listed below. They are sorted according to the Z-score of the worst occurrence in the ensemble.

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)	Models	
								Worst	Total
1	A	108	LYS	CA-C-N	12.48	135.44	119.84	17	13
1	A	108	LYS	C-N-CA	12.48	135.44	119.84	17	13
1	A	126	SER	CA-C-N	-12.20	108.35	120.31	9	5
1	A	126	SER	C-N-CA	-12.20	108.35	120.31	9	5
1	A	121	VAL	CA-C-N	-10.81	109.83	120.21	19	5
1	A	121	VAL	C-N-CA	-10.81	109.83	120.21	19	5
1	A	118	ILE	CB-CA-C	10.72	120.49	111.06	18	7
1	A	31	GLU	CA-C-N	-10.71	108.82	119.64	1	5
1	A	31	GLU	C-N-CA	-10.71	108.82	119.64	1	5
1	A	125	GLY	N-CA-C	-10.57	95.21	110.96	8	4
1	A	148	ILE	N-CA-C	-10.18	93.13	107.99	11	6
1	A	78	GLY	CA-C-O	-10.11	113.14	122.13	4	2
1	A	112	ARG	NE-CZ-NH2	10.05	128.24	119.20	19	5
1	A	58	PHE	N-CA-C	-10.03	99.36	111.69	18	10
1	A	88	ALA	CA-C-N	-9.30	109.95	119.99	16	6

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)	Models	
								Worst	Total
1	A	88	ALA	C-N-CA	-9.30	109.95	119.99	16	6
1	A	118	ILE	N-CA-C	-9.26	103.70	112.96	18	7
1	A	69	ARG	NE-CZ-NH1	-9.22	112.28	121.50	9	3
1	A	112	ARG	NE-CZ-NH1	-9.22	112.28	121.50	19	5
1	A	10	ARG	NE-CZ-NH1	8.85	130.35	121.50	6	3
1	A	90	HIS	CE1-NE2-CD2	-8.82	100.18	109.00	9	9
1	A	142	ARG	NE-CZ-NH2	8.81	127.13	119.20	15	11
1	A	90	HIS	CG-CD2-NE2	8.64	115.84	107.20	9	10
1	A	106	PRO	N-CA-C	8.62	125.04	113.84	18	4
1	A	144	GLY	N-CA-C	8.61	121.21	110.96	14	4
1	A	78	GLY	N-CA-C	-8.44	102.91	111.85	3	1
1	A	59	GLY	N-CA-C	-8.32	104.35	114.66	15	1
1	A	67	GLU	N-CA-C	-8.31	102.18	111.82	9	2
1	A	10	ARG	NE-CZ-NH2	8.29	126.66	119.20	17	7
1	A	138	ILE	CA-C-N	-8.19	111.92	120.03	9	10
1	A	138	ILE	C-N-CA	-8.19	111.92	120.03	9	10
1	A	69	ARG	NE-CZ-NH2	8.17	126.55	119.20	9	4
1	A	87	THR	N-CA-C	-8.02	103.71	113.97	19	5
1	A	141	ASP	N-CA-C	7.99	119.77	111.14	12	4
1	A	129	SER	N-CA-C	7.92	122.61	113.19	9	1
1	A	118	ILE	CA-C-O	7.92	125.87	118.90	19	2
1	A	103	GLY	CA-C-O	7.92	129.38	119.72	20	4
1	A	29	MET	N-CA-C	7.77	122.44	112.34	15	5
1	A	36	GLU	N-CA-C	7.75	120.77	110.53	17	2
1	A	168	ASP	N-CA-C	-7.74	96.28	108.90	14	2
1	A	160	ALA	N-CA-C	-7.70	98.25	109.18	10	4
1	A	10	ARG	N-CA-C	-7.65	103.75	113.23	8	3
1	A	1	HIS	CE1-NE2-CD2	-7.53	101.47	109.00	12	13
1	A	30	TYR	N-CA-C	7.53	119.48	111.28	14	2
1	A	109	PRO	N-CA-C	7.52	127.97	112.47	17	9
1	A	126	SER	N-CA-C	-7.50	99.74	110.08	12	5
1	A	130	ARG	NE-CZ-NH2	7.47	125.92	119.20	3	4
1	A	86	TYR	N-CA-C	-7.47	96.77	109.24	16	1
1	A	137	TYR	CA-C-N	7.45	130.77	123.02	9	1
1	A	137	TYR	C-N-CA	7.45	130.77	123.02	9	1
1	A	155	ALA	N-CA-C	-7.45	103.24	111.36	15	2
1	A	84	TRP	N-CA-C	-7.44	97.99	109.52	3	6
1	A	150	ALA	N-CA-C	-7.43	97.28	109.40	2	1
1	A	126	SER	N-CA-CB	-7.40	100.20	110.04	18	1
1	A	90	HIS	N-CA-C	-7.39	97.77	109.23	5	5
1	A	142	ARG	NE-CZ-NH1	-7.39	114.11	121.50	15	6

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)	Models	
								Worst	Total
1	A	121	VAL	CB-CA-C	-7.33	102.75	110.16	20	1
1	A	74	ILE	N-CA-C	-7.33	97.91	108.17	7	1
1	A	13	LEU	N-CA-C	-7.32	104.15	113.23	12	1
1	A	158	GLU	N-CA-C	-7.20	103.16	112.23	17	3
1	A	131	ASN	N-CA-C	7.18	121.55	110.20	9	1
1	A	130	ARG	N-CA-C	-7.15	103.53	111.82	6	1
1	A	88	ALA	CA-C-O	-7.08	113.46	119.76	1	3
1	A	1	HIS	ND1-CE1-NE2	7.03	115.43	108.40	12	7
1	A	62	LEU	N-CA-C	7.03	119.97	111.82	16	2
1	A	143	LEU	N-CA-C	-7.00	101.50	110.53	12	4
1	A	6	LYS	CA-C-O	-6.97	113.63	120.26	15	1
1	A	136	ILE	CA-C-O	-6.93	113.11	120.39	1	1
1	A	110	LEU	N-CA-C	6.93	125.56	110.80	16	4
1	A	142	ARG	CA-C-O	-6.90	114.05	121.36	13	2
1	A	79	GLU	N-CA-C	6.89	120.47	110.28	5	1
1	A	115	PHE	N-CA-C	6.88	119.39	109.14	1	2
1	A	34	SER	N-CA-C	6.88	121.12	113.21	10	1
1	A	165	ILE	O-C-N	-6.88	115.77	123.20	11	2
1	A	117	LEU	N-CA-C	-6.82	99.43	110.20	11	2
1	A	98	TYR	N-CA-C	-6.81	98.81	108.96	19	1
1	A	77	GLY	N-CA-C	6.78	119.79	112.33	8	1
1	A	65	GLN	N-CA-C	-6.78	102.30	110.44	17	3
1	A	171	ASN	N-CA-C	-6.78	99.54	110.32	16	2
1	A	102	LYS	CA-C-O	-6.74	114.46	121.87	5	1
1	A	128	ALA	N-CA-C	6.72	121.08	112.34	10	4
1	A	57	LEU	CA-C-O	6.71	126.28	118.90	16	2
1	A	109	PRO	CA-C-N	6.71	129.57	120.38	13	2
1	A	109	PRO	C-N-CA	6.71	129.57	120.38	13	2
1	A	130	ARG	NE-CZ-NH1	-6.67	114.83	121.50	3	3
1	A	154	VAL	O-C-N	-6.67	116.05	123.26	11	1
1	A	115	PHE	CA-C-O	-6.67	113.31	121.11	20	1
1	A	66	SER	N-CA-C	6.63	119.25	109.24	3	5
1	A	135	HIS	CA-C-O	-6.62	113.14	120.69	9	1
1	A	90	HIS	ND1-CE1-NE2	6.62	115.02	108.40	2	4
1	A	148	ILE	N-CA-CB	6.57	118.90	111.21	7	2
1	A	119	GLY	CA-C-O	-6.52	115.22	121.87	4	1
1	A	136	ILE	CB-CA-C	-6.52	101.62	110.42	13	2
1	A	4	ILE	N-CA-C	-6.51	101.18	109.58	6	2
1	A	110	LEU	O-C-N	-6.46	114.00	122.59	1	2
1	A	104	TRP	O-C-N	-6.45	115.44	122.79	11	1
1	A	61	ILE	N-CA-C	-6.42	104.78	111.58	7	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)	Models	
								Worst	Total
1	A	156	ASP	N-CA-C	6.34	119.18	111.82	13	2
1	A	64	GLN	CA-C-O	6.32	127.26	119.05	12	1
1	A	135	HIS	CB-CA-C	-6.31	99.69	110.16	19	1
1	A	147	VAL	CA-C-O	-6.29	113.78	120.39	9	1
1	A	170	VAL	N-CA-C	6.28	117.96	108.80	16	7
1	A	66	SER	CA-C-O	-6.24	114.47	121.40	4	1
1	A	104	TRP	CA-C-O	-6.24	114.78	121.45	18	1
1	A	99	ILE	CA-C-O	-6.24	115.53	121.64	3	1
1	A	153	ASP	N-CA-C	-6.20	99.08	109.07	19	2
1	A	145	TYR	N-CA-C	6.16	119.18	110.50	11	4
1	A	2	GLY	CA-C-O	-6.15	114.30	122.23	16	4
1	A	100	THR	N-CA-C	-6.14	100.49	110.20	11	3
1	A	132	LEU	N-CA-C	6.12	120.36	113.01	16	1
1	A	138	ILE	CA-C-O	-6.12	115.22	119.38	20	4
1	A	123	HIS	N-CA-C	-6.11	99.91	109.25	15	1
1	A	144	GLY	O-C-N	-6.10	117.11	123.58	2	1
1	A	169	LEU	N-CA-C	-6.09	99.73	109.96	5	1
1	A	59	GLY	CA-C-O	6.07	126.66	119.50	18	2
1	A	96	HIS	CA-C-O	-6.07	114.25	121.11	20	4
1	A	140	GLU	CA-C-O	6.05	125.45	118.97	19	1
1	A	154	VAL	N-CA-CB	-6.05	103.07	111.41	1	1
1	A	69	ARG	N-CA-C	-6.03	97.86	108.23	19	1
1	A	61	ILE	CA-C-O	-6.02	114.36	121.05	2	2
1	A	79	GLU	CA-C-O	-6.02	114.42	121.16	13	1
1	A	76	THR	O-C-N	-6.02	115.93	122.79	16	1
1	A	134	HIS	N-CA-C	6.01	118.92	108.76	16	2
1	A	122	PRO	CB-CA-C	6.00	118.88	110.60	6	1
1	A	72	LYS	N-CA-C	5.99	119.82	110.17	7	2
1	A	90	HIS	N-CA-CB	5.99	120.04	110.46	3	1
1	A	128	ALA	CA-C-O	5.96	126.88	120.20	9	1
1	A	120	ALA	N-CA-C	-5.94	98.95	109.06	19	2
1	A	12	ALA	N-CA-C	5.92	118.69	111.82	5	3
1	A	125	GLY	CA-C-O	-5.90	115.32	121.63	8	2
1	A	158	GLU	CA-C-O	5.87	126.38	119.28	5	1
1	A	6	LYS	N-CA-C	-5.86	98.74	108.23	10	3
1	A	153	ASP	O-C-N	-5.85	116.66	123.27	4	1
1	A	105	ASP	CA-C-N	-5.84	113.60	119.56	12	4
1	A	105	ASP	C-N-CA	-5.84	113.60	119.56	12	4
1	A	107	ASP	N-CA-C	-5.84	106.11	113.18	4	2
1	A	132	LEU	CA-C-O	5.82	126.41	119.60	13	1
1	A	121	VAL	CA-C-O	-5.81	116.93	120.88	3	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)	Models	
								Worst	Total
1	A	37	ALA	N-CA-C	-5.78	99.91	108.99	13	1
1	A	170	VAL	N-CA-CB	-5.76	104.45	112.52	15	1
1	A	69	ARG	O-C-N	5.76	130.25	122.59	7	3
1	A	122	PRO	N-CA-C	-5.74	102.58	111.13	18	2
1	A	64	GLN	N-CA-C	5.73	120.99	113.20	13	1
1	A	146	HIS	N-CA-C	-5.72	100.65	108.38	8	1
1	A	166	ASP	N-CA-C	5.69	118.94	110.52	13	2
1	A	1	HIS	CG-CD2-NE2	5.66	112.86	107.20	15	1
1	A	58	PHE	CA-C-O	5.65	126.47	119.97	16	1
1	A	74	ILE	CA-C-O	-5.63	114.62	121.04	2	1
1	A	136	ILE	CB-CG1-CD1	5.63	125.62	113.80	13	1
1	A	101	LYS	N-CA-C	-5.62	100.08	109.24	11	1
1	A	157	THR	CA-C-O	-5.61	115.07	121.40	14	2
1	A	147	VAL	N-CA-C	-5.60	101.66	109.45	16	1
1	A	109	PRO	CA-N-CD	-5.60	104.16	112.00	17	1
1	A	69	ARG	CA-C-O	5.60	126.74	120.92	15	4
1	A	100	THR	N-CA-CB	5.59	118.50	110.06	11	1
1	A	151	VAL	CA-C-O	-5.58	114.42	120.67	19	1
1	A	102	LYS	N-CA-C	-5.56	100.48	108.60	18	1
1	A	128	ALA	O-C-N	-5.55	115.82	122.15	1	2
1	A	87	THR	CA-CB-CG2	5.55	119.94	110.50	5	1
1	A	135	HIS	N-CA-C	-5.54	100.86	109.72	4	1
1	A	66	SER	O-C-N	-5.54	117.45	123.26	11	1
1	A	166	ASP	O-C-N	-5.53	116.57	123.04	7	2
1	A	92	THR	N-CA-C	-5.52	99.67	109.06	7	1
1	A	94	GLN	N-CA-CB	-5.51	103.02	111.56	20	1
1	A	130	ARG	NH1-CZ-NH2	-5.49	112.16	119.30	16	1
1	A	97	TYR	N-CA-C	5.47	117.71	109.23	13	2
1	A	123	HIS	CA-C-O	-5.46	115.96	122.13	4	1
1	A	39	LYS	N-CA-C	-5.45	103.34	110.53	3	1
1	A	138	ILE	N-CA-CB	-5.45	105.78	111.61	19	1
1	A	83	THR	CA-C-O	5.44	126.24	120.36	18	1
1	A	107	ASP	CA-C-O	5.44	126.22	119.97	20	2
1	A	60	GLY	CA-C-O	5.43	126.07	119.01	20	1
1	A	104	TRP	N-CA-CB	-5.43	102.83	111.62	12	1
1	A	57	LEU	CB-CA-C	-5.42	100.44	109.55	18	1
1	A	82	PHE	N-CA-CB	-5.42	102.19	110.65	1	1
1	A	92	THR	O-C-N	-5.41	116.63	123.01	5	1
1	A	148	ILE	CA-C-O	-5.38	114.71	120.85	1	1
1	A	151	VAL	CB-CA-C	-5.38	101.78	110.28	6	1
1	A	85	THR	CA-C-O	5.38	127.16	120.54	14	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)	Models	
								Worst	Total
1	A	108	LYS	N-CA-C	-5.36	103.38	110.40	5	1
1	A	32	PRO	N-CA-C	5.36	120.56	113.86	9	1
1	A	10	ARG	NH1-CZ-NH2	-5.33	112.36	119.30	6	1
1	A	124	ASP	N-CA-C	-5.33	107.14	113.97	10	3
1	A	71	PHE	CA-C-O	5.32	127.04	121.19	19	3
1	A	35	LEU	N-CA-C	-5.29	99.82	108.76	7	1
1	A	84	TRP	CB-CA-C	5.28	118.46	109.75	9	1
1	A	69	ARG	CD-NE-CZ	5.28	131.79	124.40	8	2
1	A	119	GLY	N-CA-C	5.27	118.28	110.63	11	1
1	A	135	HIS	CA-C-N	-5.27	116.09	123.10	2	1
1	A	135	HIS	C-N-CA	-5.27	116.09	123.10	2	1
1	A	89	PRO	N-CA-C	-5.25	103.00	111.77	20	1
1	A	109	PRO	CB-CA-C	-5.24	102.91	111.56	7	1
1	A	138	ILE	N-CA-C	-5.22	101.92	107.77	3	1
1	A	104	TRP	CA-CB-CG	5.22	123.52	113.60	1	1
1	A	68	ASN	N-CA-CB	-5.22	103.36	110.56	2	1
1	A	117	LEU	CA-C-O	-5.21	115.11	121.05	11	1
1	A	2	GLY	N-CA-C	5.20	120.76	110.83	6	1
1	A	114	ASP	N-CA-C	5.19	118.64	112.72	10	1
1	A	65	GLN	CA-C-O	5.19	125.69	121.02	6	1
1	A	105	ASP	N-CA-C	-5.19	101.88	109.50	7	1
1	A	68	ASN	N-CA-C	-5.18	107.48	112.97	14	1
1	A	31	GLU	N-CA-C	5.18	117.02	109.30	14	2
1	A	9	SER	O-C-N	-5.17	117.09	123.44	3	1
1	A	59	GLY	O-C-N	-5.17	116.84	122.68	10	1
1	A	5	GLU	N-CA-C	-5.17	103.91	111.30	12	1
1	A	164	VAL	N-CA-C	5.17	115.56	108.12	3	1
1	A	139	PRO	O-C-N	-5.16	117.32	123.10	2	1
1	A	82	PHE	N-CA-C	-5.15	100.13	108.52	18	1
1	A	171	ASN	CA-C-O	-5.14	115.40	121.16	9	1
1	A	9	SER	N-CA-C	5.14	117.31	110.53	4	1
1	A	72	LYS	CA-C-O	-5.14	115.01	120.92	6	1
1	A	165	ILE	CB-CA-C	5.13	118.22	110.63	18	1
1	A	12	ALA	O-C-N	-5.12	115.57	122.23	13	1
1	A	79	GLU	N-CA-CB	5.11	118.06	110.29	1	1
1	A	167	VAL	CA-C-O	-5.11	116.63	121.64	3	1
1	A	109	PRO	CA-C-O	5.10	129.88	120.60	2	1
1	A	73	HIS	N-CA-CB	5.09	117.56	109.71	13	1
1	A	152	TRP	CB-CA-C	5.09	118.06	110.62	14	1
1	A	12	ALA	CA-C-O	5.09	125.82	120.42	19	1
1	A	67	GLU	CA-C-O	5.09	125.65	119.49	6	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)	Models	
								Worst	Total
1	A	100	THR	O-C-N	-5.09	116.99	122.79	10	1
1	A	111	LYS	CD-CE-NZ	-5.08	95.63	111.90	12	1
1	A	88	ALA	O-C-N	5.07	124.39	120.38	12	2
1	A	136	ILE	O-C-N	5.06	128.72	123.26	1	1
1	A	4	ILE	N-CA-CB	5.06	117.12	111.21	17	1
1	A	39	LYS	CB-CA-C	5.05	117.83	109.70	10	1
1	A	57	LEU	O-C-N	-5.05	116.27	122.68	2	1
1	A	166	ASP	N-CA-CB	-5.04	102.45	111.08	16	1
1	A	71	PHE	N-CA-C	5.04	117.73	110.28	4	1
1	A	140	GLU	N-CA-CB	-5.03	103.25	110.65	20	2
1	A	112	ARG	NH1-CZ-NH2	-5.03	112.76	119.30	12	1
1	A	108	LYS	CB-CA-C	5.03	120.08	110.17	6	1
1	A	6	LYS	CB-CA-C	5.03	116.85	110.22	15	1
1	A	108	LYS	CA-C-O	-5.02	115.87	120.94	18	1
1	A	102	LYS	CA-CB-CG	5.02	124.13	114.10	3	1
1	A	126	SER	CA-CB-OG	-5.01	101.07	111.10	3	1
1	A	84	TRP	CA-C-O	-5.01	115.44	121.11	20	1
1	A	112	ARG	N-CA-C	5.01	121.47	110.80	4	1
1	A	70	TRP	CA-C-O	-5.01	116.06	121.87	17	1
1	A	91	ASN	N-CA-CB	-5.00	102.04	109.69	18	1

All unique chiral outliers are listed below.

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Models (Total)
1	A	90	HIS	CA	1

All unique planar outliers are listed below. They are sorted by the frequency of occurrence in the ensemble.

Mol	Chain	Res	Type	Group	Models (Total)
1	A	137	TYR	Sidechain	6
1	A	145	TYR	Sidechain	4
1	A	97	TYR	Sidechain	3
1	A	98	TYR	Sidechain	3
1	A	70	TRP	Peptide	2
1	A	86	TYR	Sidechain	2
1	A	162	TYR	Sidechain	2
1	A	30	TYR	Sidechain	2
1	A	57	LEU	Peptide	2
1	A	88	ALA	Mainchain	1
1	A	10	ARG	Sidechain	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Group	Models (Total)
1	A	112	ARG	Sidechain	1
1	A	116	GLU	Mainchain	1
1	A	108	LYS	Peptide	1
1	A	93	SER	Mainchain	1
1	A	94	GLN	Peptide	1
1	A	104	TRP	Peptide	1
1	A	67	GLU	Mainchain	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	1145	1086	1089	0±0
All	All	22920	21720	21780	3

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 0.

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

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:1:HIS:CE1	1:A:161:PHE:CZ	0.44	3.06	12	1
1:A:112:ARG:C	1:A:114:ASP:H	0.44	2.20	20	1
1:A:95:TRP:CZ3	1:A:123:HIS:CD2	0.43	3.06	18	1

6.3 Torsion angles [i](#)

6.3.1 Protein backbone [i](#)

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

Mol	Chain	Analysed	Favoured	Allowed	Outliers	Percentiles	
1	A	138/172 (80%)	128±2 (93±2%)	8±2 (6±2%)	2±1 (2±1%)	10	55

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Analysed	Favoured	Allowed	Outliers	Percentiles
All	All	2760/3440 (80%)	2555 (93%)	161 (6%)	44 (2%)	10 55

All 17 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	109	PRO	17
1	A	110	LEU	5
1	A	70	TRP	4
1	A	29	MET	3
1	A	69	ARG	2
1	A	128	ALA	2
1	A	126	SER	1
1	A	113	ALA	1
1	A	125	GLY	1
1	A	127	PRO	1
1	A	6	LYS	1
1	A	102	LYS	1
1	A	130	ARG	1
1	A	8	GLY	1
1	A	114	ASP	1
1	A	2	GLY	1
1	A	35	LEU	1

6.3.2 Protein sidechains ⓘ

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

Mol	Chain	Analysed	Rotameric	Outliers	Percentiles
1	A	120/141 (85%)	116±2 (96±2%)	4±2 (4±2%)	31 81
All	All	2400/2820 (85%)	2312 (96%)	88 (4%)	31 81

All 47 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	145	TYR	7
1	A	164	VAL	5

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	126	SER	5
1	A	149	LEU	4
1	A	163	GLN	4
1	A	110	LEU	4
1	A	152	TRP	4
1	A	109	PRO	3
1	A	167	VAL	3
1	A	73	HIS	3
1	A	132	LEU	3
1	A	70	TRP	3
1	A	96	HIS	3
1	A	114	ASP	2
1	A	146	HIS	2
1	A	100	THR	2
1	A	10	ARG	1
1	A	75	MET	1
1	A	111	LYS	1
1	A	129	SER	1
1	A	5	GLU	1
1	A	93	SER	1
1	A	121	VAL	1
1	A	169	LEU	1
1	A	154	VAL	1
1	A	57	LEU	1
1	A	156	ASP	1
1	A	90	HIS	1
1	A	4	ILE	1
1	A	85	THR	1
1	A	34	SER	1
1	A	39	LYS	1
1	A	79	GLU	1
1	A	95	TRP	1
1	A	33	GLN	1
1	A	97	TYR	1
1	A	134	HIS	1
1	A	147	VAL	1
1	A	165	ILE	1
1	A	104	TRP	1
1	A	140	GLU	1
1	A	84	TRP	1
1	A	92	THR	1
1	A	13	LEU	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	35	LEU	1
1	A	38	LYS	1
1	A	158	GLU	1

6.3.3 RNA [i](#)

There are no RNA molecules in this entry.

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

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

6.5 Carbohydrates [i](#)

There are no oligosaccharides in this entry.

6.6 Ligand geometry [i](#)

Of 1 ligands modelled in this entry, 1 is monoatomic - leaving 0 for Mogul analysis.

6.7 Other polymers [i](#)

There are no such molecules in this entry.

6.8 Polymer linkage issues [i](#)

There are no chain breaks in this entry.

7 Chemical shift validation

The completeness of assignment taking into account all chemical shift lists is 84% for the well-defined parts and 84% for the entire structure.

7.1 Chemical shift list 1

File name: working_cs.cif

Chemical shift list name: *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	1921
Number of shifts mapped to atoms	1921
Number of unparsed shifts	0
Number of shifts with mapping errors	0
Number of shifts with mapping warnings	0
Number of shift outliers (ShiftChecker)	15

7.1.2 Chemical shift referencing

The following table shows the suggested chemical shift referencing corrections.

Nucleus	# values	Correction $\pm$ precision, ppm	Suggested action
$^{13}\text{C}_\alpha$	172	-0.02 ± 0.08	None needed (< 0.5 ppm)
$^{13}\text{C}_\beta$	155	-0.08 ± 0.14	None needed (< 0.5 ppm)
$^{13}\text{C}'$	171	0.65 ± 0.15	Should be applied
^{15}N	161	-0.88 ± 0.49	None needed (imprecise)

7.1.3 Completeness of resonance assignments

The following table shows the completeness of the chemical shift assignments for the well-defined regions of the structure. The overall completeness is 84%, i.e. 1612 atoms were assigned a chemical shift out of a possible 1926. 0 out of 17 assigned methyl groups (LEU and VAL) were assigned stereospecifically.

	Total	^1H	^{13}C	^{15}N
Backbone	691/694 (100%)	281/282 (100%)	279/280 (100%)	131/132 (99%)
Sidechain	836/987 (85%)	560/641 (87%)	268/312 (86%)	8/34 (24%)

Continued on next page...

Continued from previous page...

	Total	¹H	¹³C	¹⁵N
Aromatic	85/245 (35%)	61/124 (49%)	19/108 (18%)	5/13 (38%)
Overall	1612/1926 (84%)	902/1047 (86%)	566/700 (81%)	144/179 (80%)

The following table shows the completeness of the chemical shift assignments for the full structure. The overall completeness is 84%, i.e. 1921 atoms were assigned a chemical shift out of a possible 2274. 0 out of 20 assigned methyl groups (LEU and VAL) were assigned stereospecifically.

	Total	¹H	¹³C	¹⁵N
Backbone	854/857 (100%)	350/351 (100%)	343/344 (100%)	161/162 (99%)
Sidechain	968/1135 (85%)	648/739 (88%)	309/359 (86%)	11/37 (30%)
Aromatic	99/282 (35%)	71/143 (50%)	23/125 (18%)	5/14 (36%)
Overall	1921/2274 (84%)	1069/1233 (87%)	675/828 (82%)	177/213 (83%)

7.1.4 Statistically unusual chemical shifts ⓘ

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

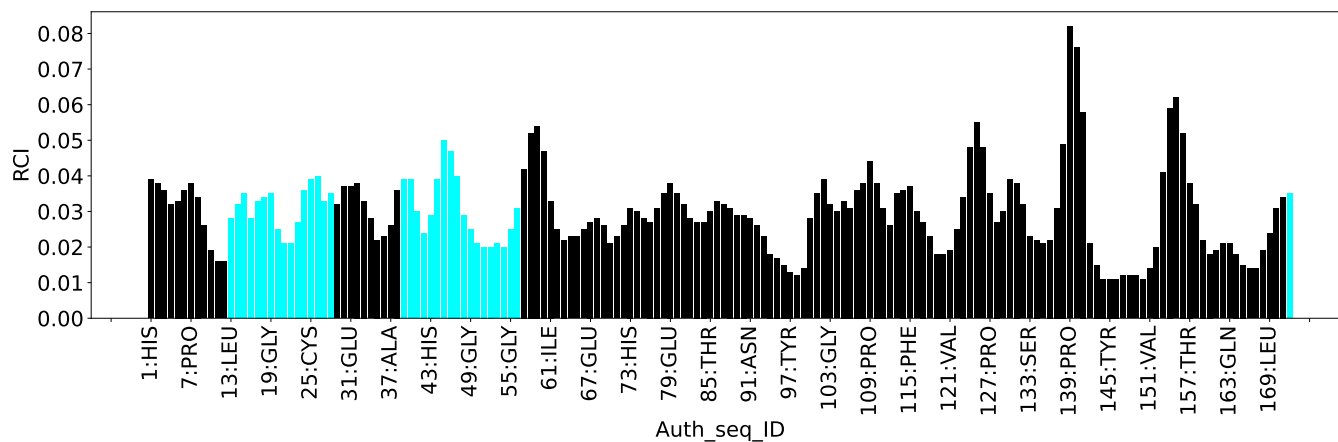
List Id	Chain	Res	Type	Atom	Shift, ppm	Expected range, ppm	Z-score
1	A	42	PRO	CD	41.90	45.11 – 55.58	-8.1
1	A	109	PRO	CD	42.70	45.11 – 55.58	-7.3
1	A	100	THR	HG21	-0.30	0.08 – 2.19	-6.8
1	A	100	THR	HG22	-0.30	0.08 – 2.19	-6.8
1	A	100	THR	HG23	-0.30	0.08 – 2.19	-6.8
1	A	4	ILE	HG13	-1.44	-0.82 – 3.23	-6.5
1	A	92	THR	HG21	-0.09	0.08 – 2.19	-5.8
1	A	92	THR	HG22	-0.09	0.08 – 2.19	-5.8
1	A	92	THR	HG23	-0.09	0.08 – 2.19	-5.8
1	A	149	LEU	HD21	-0.78	-0.65 – 2.13	-5.5
1	A	149	LEU	HD22	-0.78	-0.65 – 2.13	-5.5
1	A	149	LEU	HD23	-0.78	-0.65 – 2.13	-5.5
1	A	62	LEU	HD21	-0.77	-0.65 – 2.13	-5.4
1	A	62	LEU	HD22	-0.77	-0.65 – 2.13	-5.4
1	A	62	LEU	HD23	-0.77	-0.65 – 2.13	-5.4

7.1.5 Random Coil Index (RCI) plots ⓘ

The image below reports *random coil index* values for the protein chains in the structure. The height of each bar gives a probability of a given residue to be disordered, as predicted from the available chemical shifts and the amino acid sequence. A value above 0.2 is an indication of significant predicted disorder. The colour of the bar shows whether the residue is in the well-

defined core (black) or in the ill-defined residue ranges (cyan), as described in section 2 on ensemble composition. If well-defined core and ill-defined regions are not identified then it is shown as gray bars.

Random coil index (RCI) for chain A:



8 NMR restraints analysis

8.1 Conformationally restricting restraints

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

Description	Value
Total distance restraints	1208
Intra-residue ($ i-j =0$)	440
Sequential ($ i-j =1$)	420
Medium range ($ i-j >1$ and $ i-j <5$)	94
Long range ($ i-j \geq 5$)	253
Inter-chain	0
Hydrogen bond restraints	0
Disulfide bond restraints	1
Total dihedral-angle restraints	526
Number of unmapped restraints	1
Number of restraints per residue	10.0
Number of long range restraints per residue ¹	1.5

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)	12.9	0.2
0.2-0.5 (Medium)	19.9	0.5
>0.5 (Large)	7.0	3.67

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)	40.8	10.0
10.0-20.0 (Medium)	20.4	19.84
>20.0 (Large)	47.5	160.06

9 Distance violation analysis ⓘ

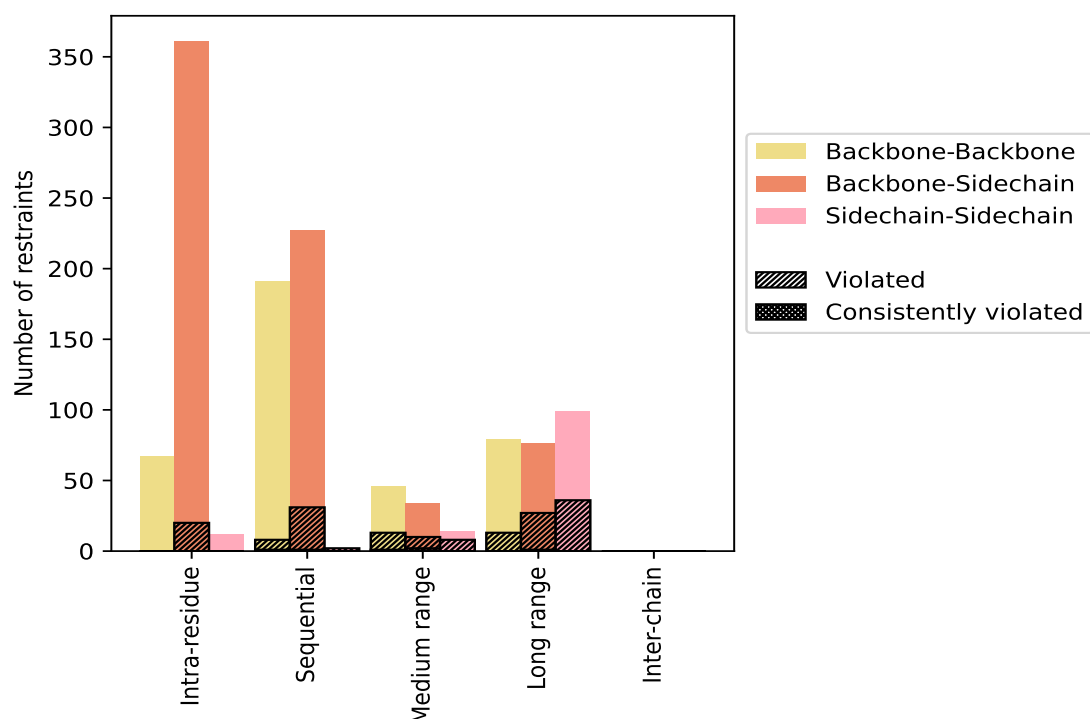
9.1 Summary of distance violations ⓘ

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)	440	36.4	20	4.5	1.7	0	0.0	0.0
Backbone-Backbone	67	5.5	0	0.0	0.0	0	0.0	0.0
Backbone-Sidechain	361	29.9	20	5.5	1.7	0	0.0	0.0
Sidechain-Sidechain	12	1.0	0	0.0	0.0	0	0.0	0.0
Sequential (i-j =1)	420	34.8	41	9.8	3.4	2	0.5	0.2
Backbone-Backbone	191	15.8	8	4.2	0.7	1	0.5	0.1
Backbone-Sidechain	227	18.8	31	13.7	2.6	1	0.4	0.1
Sidechain-Sidechain	2	0.2	2	100.0	0.2	0	0.0	0.0
Medium range (i-j >1 & i-j <5)	94	7.8	31	33.0	2.6	3	3.2	0.2
Backbone-Backbone	46	3.8	13	28.3	1.1	1	2.2	0.1
Backbone-Sidechain	34	2.8	10	29.4	0.8	2	5.9	0.2
Sidechain-Sidechain	14	1.2	8	57.1	0.7	0	0.0	0.0
Long range (i-j ≥5)	253	20.9	76	30.0	6.3	1	0.4	0.1
Backbone-Backbone	79	6.5	13	16.5	1.1	0	0.0	0.0
Backbone-Sidechain	76	6.3	27	35.5	2.2	1	1.3	0.1
Sidechain-Sidechain	98	8.1	36	36.7	3.0	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	0	0.0	0	0.0	0.0	0	0.0	0.0
Disulfide bond	1	0.1	0	0.0	0.0	0	0.0	0.0
Total	1208	100.0	168	13.9	13.9	6	0.5	0.5
Backbone-Backbone	383	31.7	34	8.9	2.8	2	0.5	0.2
Backbone-Sidechain	698	57.8	88	12.6	7.3	4	0.6	0.3
Sidechain-Sidechain	127	10.5	46	36.2	3.8	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	4	11	7	19	0	41	0.39	2.02	0.36	0.27
2	4	10	6	13	0	33	0.35	0.85	0.19	0.3
3	4	13	4	22	0	43	0.41	3.23	0.49	0.25
4	3	10	9	20	0	42	0.32	1.23	0.22	0.24
5	2	15	9	13	0	39	0.38	2.46	0.38	0.27
6	6	10	8	12	0	36	0.33	1.72	0.31	0.23
7	2	14	13	14	0	43	0.41	3.49	0.51	0.3
8	4	11	8	19	0	42	0.39	2.69	0.42	0.29
9	2	15	11	16	0	44	0.34	0.85	0.19	0.27
10	2	13	8	15	0	38	0.37	2.26	0.38	0.24

Continued on next page...

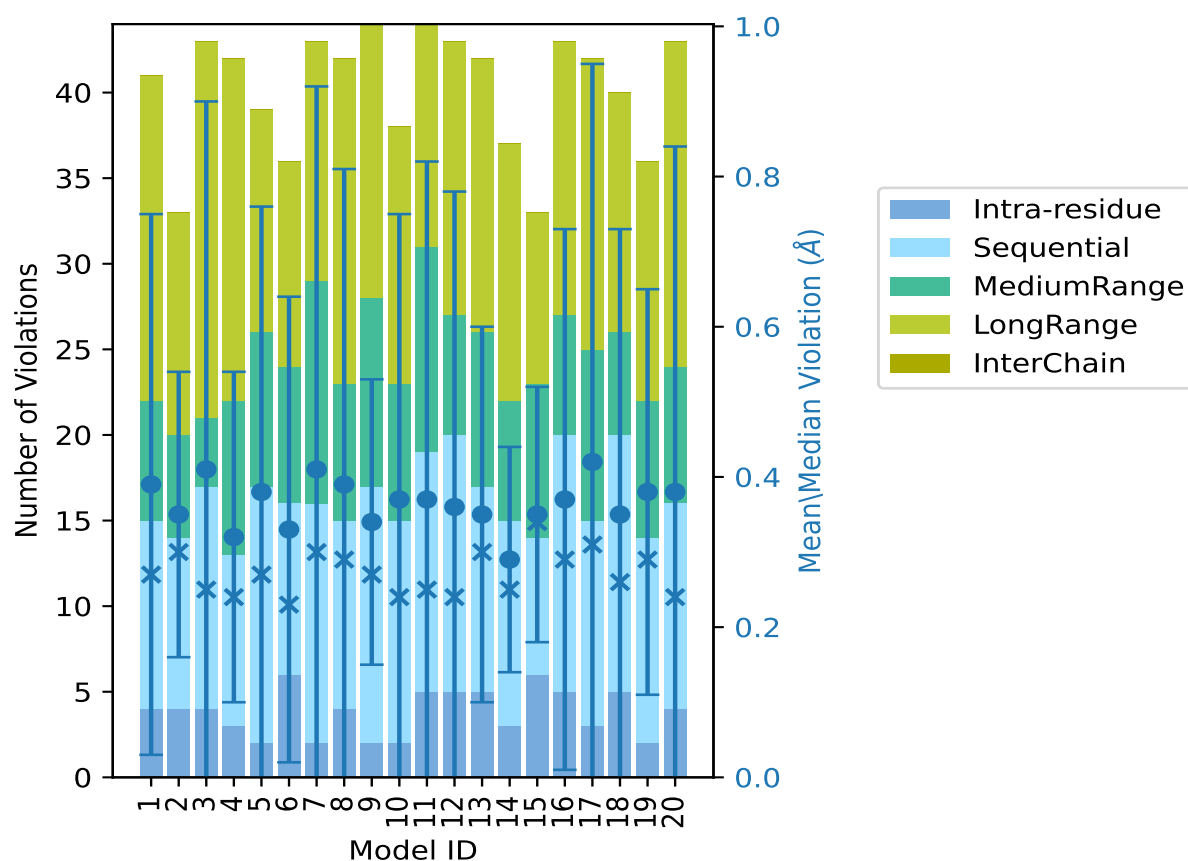
Continued from previous page...

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	5	14	12	13	0	44	0.37	3.1	0.45	0.25
12	5	15	7	16	0	43	0.36	2.8	0.42	0.24
13	5	12	9	16	0	42	0.35	1.55	0.25	0.3
14	3	12	7	15	0	37	0.29	0.64	0.15	0.25
15	6	8	9	10	0	33	0.35	0.75	0.17	0.34
16	5	15	7	16	0	43	0.37	2.38	0.36	0.29
17	3	12	10	17	0	42	0.42	3.67	0.53	0.31
18	5	15	6	14	0	40	0.35	2.3	0.38	0.26
19	2	12	8	14	0	36	0.38	1.4	0.27	0.29
20	4	12	8	19	0	43	0.38	2.8	0.46	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 ⓘ



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

9.3 Distance violation statistics for the ensemble

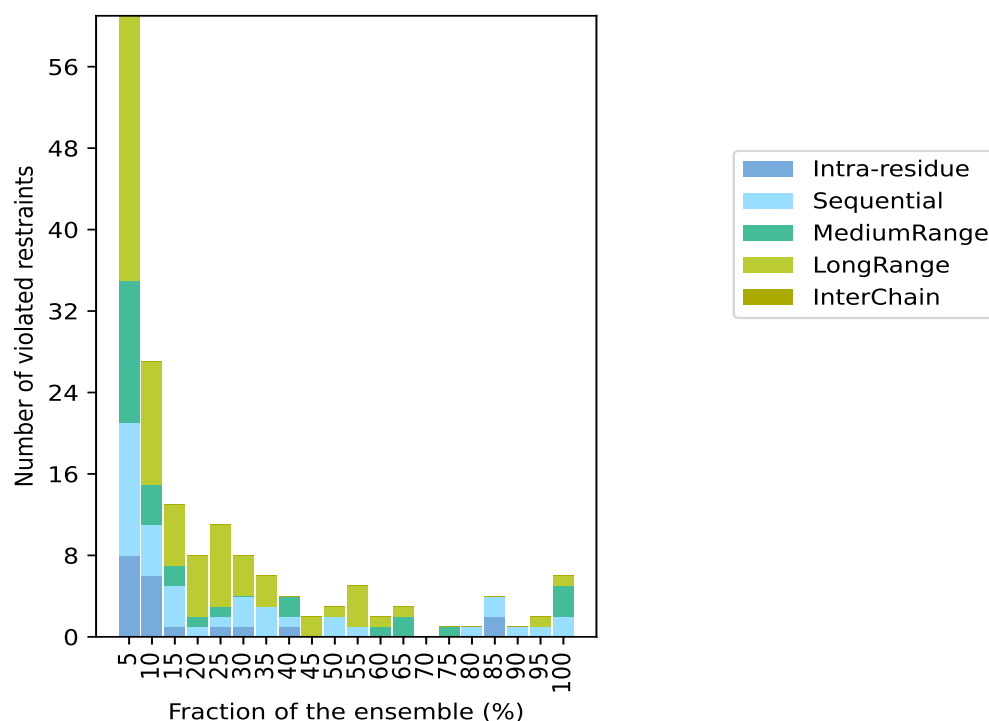
Violation analysis may find that some restraints are violated in few models and some are violated in most of models. The following table provides this information as number of violated restraints for a given fraction of the ensemble. In total, 1039(IR:420, SQ:379, MR:63, LR:177, IC:0) restraints are 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	%
8	13	14	26	0	61	1	5.0
6	5	4	12	0	27	2	10.0
1	4	2	6	0	13	3	15.0
0	1	1	6	0	8	4	20.0
1	1	1	8	0	11	5	25.0
1	3	0	4	0	8	6	30.0
0	3	0	3	0	6	7	35.0
1	1	2	0	0	4	8	40.0
0	0	0	2	0	2	9	45.0
0	2	0	1	0	3	10	50.0
0	1	0	4	0	5	11	55.0
0	0	1	1	0	2	12	60.0
0	0	2	1	0	3	13	65.0
0	0	0	0	0	0	14	70.0
0	0	1	0	0	1	15	75.0
0	1	0	0	0	1	16	80.0
2	2	0	0	0	4	17	85.0
0	1	0	0	0	1	18	90.0
0	1	0	1	0	2	19	95.0
0	2	3	1	0	6	20	100.0

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

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

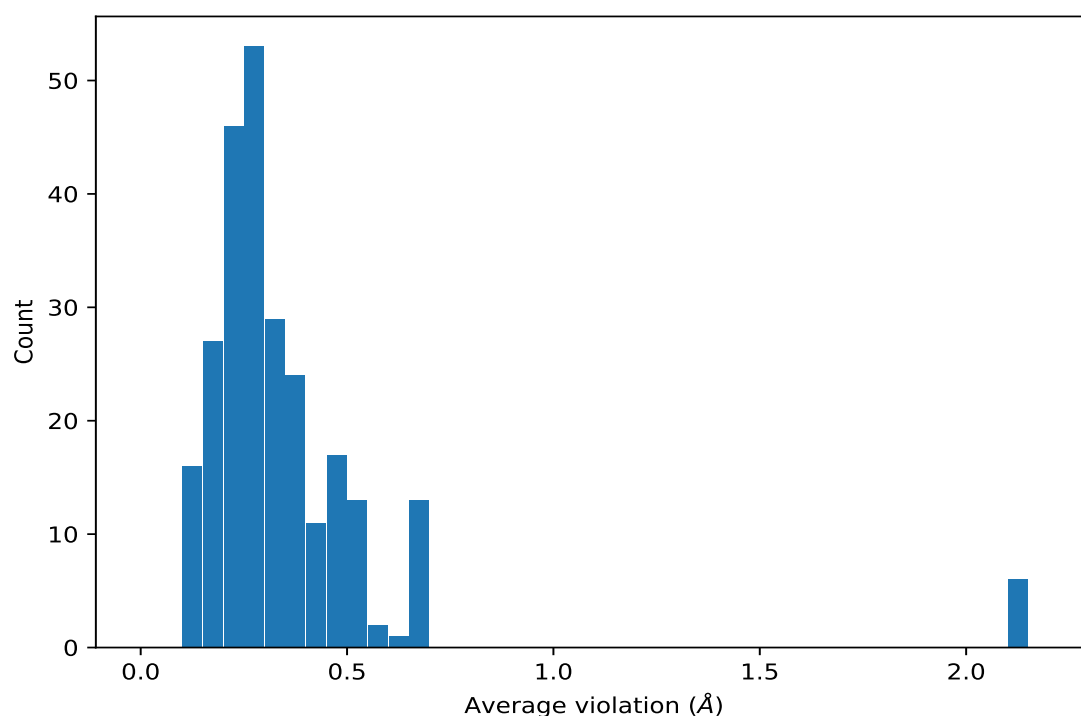
9.3.1 Bar graph : Distance violation statistics for the ensemble [i](#)



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

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

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



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

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

Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)	Median (Å)
(1,1008)	1:106:A:PRO:HB2	1:108:A:LYS:H	20	0.51	0.1	0.53
(1,1008)	1:106:A:PRO:HB3	1:108:A:LYS:H	20	0.51	0.1	0.53
(1,656)	1:112:A:ARG:HB2	1:114:A:ASP:H	20	0.47	0.31	0.35
(1,562)	1:69:A:ARG:H	1:70:A:TRP:H	20	0.46	0.13	0.5
(1,635)	1:109:A:PRO:HA	1:113:A:ALA:H	20	0.44	0.2	0.4
(1,256)	1:69:A:ARG:HB3	1:70:A:TRP:H	20	0.44	0.05	0.45
(1,983)	1:95:A:TRP:H	1:122:A:PRO:HB2	20	0.32	0.1	0.32
(1,983)	1:95:A:TRP:H	1:122:A:PRO:HB3	20	0.32	0.1	0.32
(1,927)	1:54:A:ALA:HB1	1:60:A:GLY:HA2	19	2.11	0.99	2.3
(1,927)	1:54:A:ALA:HB1	1:60:A:GLY:HA3	19	2.11	0.99	2.3
(1,927)	1:54:A:ALA:HB2	1:60:A:GLY:HA2	19	2.11	0.99	2.3
(1,927)	1:54:A:ALA:HB2	1:60:A:GLY:HA3	19	2.11	0.99	2.3
(1,927)	1:54:A:ALA:HB3	1:60:A:GLY:HA2	19	2.11	0.99	2.3
(1,927)	1:54:A:ALA:HB3	1:60:A:GLY:HA3	19	2.11	0.99	2.3
(1,751)	1:109:A:PRO:HD3	1:110:A:LEU:H	19	0.51	0.18	0.5
(1,345)	1:109:A:PRO:HB2	1:110:A:LEU:H	18	0.34	0.17	0.3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)	Median (Å)
(1,396)	1:134:A:HIS:HB2	1:135:A:HIS:H	17	0.28	0.14	0.23
(1,308)	1:96:A:HIS:H	1:96:A:HIS:HB3	17	0.25	0.06	0.25
(1,1011)	1:109:A:PRO:HG2	1:110:A:LEU:H	17	0.25	0.08	0.28
(1,1011)	1:109:A:PRO:HG3	1:110:A:LEU:H	17	0.25	0.08	0.28
(1,304)	1:93:A:SER:H	1:93:A:SER:HB2	17	0.21	0.06	0.21
(1,200)	1:39:A:LYS:HB2	1:40:A:GLY:H	16	0.48	0.18	0.49
(2,2)	1:30:A:TYR:HE1	1:34:A:SER:HB2	15	0.48	0.41	0.22
(2,2)	1:30:A:TYR:HE2	1:34:A:SER:HB2	15	0.48	0.41	0.22
(2,100)	1:121:A:VAL:HG11	1:135:A:HIS:H	13	0.42	0.21	0.35
(2,100)	1:121:A:VAL:HG12	1:135:A:HIS:H	13	0.42	0.21	0.35
(2,100)	1:121:A:VAL:HG13	1:135:A:HIS:H	13	0.42	0.21	0.35
(2,100)	1:121:A:VAL:HG21	1:135:A:HIS:H	13	0.42	0.21	0.35
(2,100)	1:121:A:VAL:HG22	1:135:A:HIS:H	13	0.42	0.21	0.35
(2,100)	1:121:A:VAL:HG23	1:135:A:HIS:H	13	0.42	0.21	0.35
(1,563)	1:68:A:ASN:HA	1:70:A:TRP:H	13	0.31	0.15	0.29
(1,676)	1:57:A:LEU:HB2	1:59:A:GLY:H	13	0.27	0.09	0.26
(1,16)	1:49:A:GLY:HA3	1:162:A:TYR:HE1	12	0.55	0.4	0.42
(1,16)	1:49:A:GLY:HA3	1:162:A:TYR:HE2	12	0.55	0.4	0.42
(1,1027)	1:117:A:LEU:HB2	1:120:A:ALA:HB1	12	0.36	0.16	0.36
(1,1027)	1:117:A:LEU:HB2	1:120:A:ALA:HB2	12	0.36	0.16	0.36
(1,1027)	1:117:A:LEU:HB2	1:120:A:ALA:HB3	12	0.36	0.16	0.36
(1,1027)	1:117:A:LEU:HB3	1:120:A:ALA:HB1	12	0.36	0.16	0.36
(1,1027)	1:117:A:LEU:HB3	1:120:A:ALA:HB2	12	0.36	0.16	0.36
(1,1027)	1:117:A:LEU:HB3	1:120:A:ALA:HB3	12	0.36	0.16	0.36
(1,1032)	1:121:A:VAL:HG11	1:134:A:HIS:HB2	11	0.52	0.46	0.38
(1,1032)	1:121:A:VAL:HG12	1:134:A:HIS:HB2	11	0.52	0.46	0.38
(1,1032)	1:121:A:VAL:HG13	1:134:A:HIS:HB2	11	0.52	0.46	0.38
(1,1032)	1:121:A:VAL:HG21	1:134:A:HIS:HB2	11	0.52	0.46	0.38
(1,1032)	1:121:A:VAL:HG22	1:134:A:HIS:HB2	11	0.52	0.46	0.38
(1,1032)	1:121:A:VAL:HG23	1:134:A:HIS:HB2	11	0.52	0.46	0.38
(1,1051)	1:136:A:ILE:HG12	1:148:A:ILE:HD11	11	0.46	0.28	0.49
(1,1051)	1:136:A:ILE:HG12	1:148:A:ILE:HD12	11	0.46	0.28	0.49
(1,1051)	1:136:A:ILE:HG12	1:148:A:ILE:HD13	11	0.46	0.28	0.49
(1,1051)	1:136:A:ILE:HG13	1:148:A:ILE:HD11	11	0.46	0.28	0.49
(1,1051)	1:136:A:ILE:HG13	1:148:A:ILE:HD12	11	0.46	0.28	0.49
(1,1051)	1:136:A:ILE:HG13	1:148:A:ILE:HD13	11	0.46	0.28	0.49
(1,81)	1:143:A:LEU:HA	1:170:A:VAL:HB	11	0.27	0.08	0.28
(2,14)	1:61:A:ILE:HD11	1:145:A:TYR:HD1	11	0.26	0.08	0.28
(2,14)	1:61:A:ILE:HD11	1:145:A:TYR:HD2	11	0.26	0.08	0.28
(2,14)	1:61:A:ILE:HD12	1:145:A:TYR:HD1	11	0.26	0.08	0.28
(2,14)	1:61:A:ILE:HD12	1:145:A:TYR:HD2	11	0.26	0.08	0.28
(2,14)	1:61:A:ILE:HD13	1:145:A:TYR:HD1	11	0.26	0.08	0.28

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)	Median (Å)
(2,14)	1:61:A:ILE:HD13	1:145:A:TYR:HD2	11	0.26	0.08	0.28
(1,224)	1:57:A:LEU:HA	1:58:A:PHE:H	11	0.23	0.07	0.24
(1,167)	1:23:A:LEU:HB3	1:24:A:ASN:H	10	0.61	0.13	0.62
(1,7)	1:69:A:ARG:HB2	1:70:A:TRP:HD1	10	0.39	0.22	0.34
(1,920)	1:47:A:ALA:HB1	1:56:A:GLY:HA2	10	0.38	0.2	0.3
(1,920)	1:47:A:ALA:HB1	1:56:A:GLY:HA3	10	0.38	0.2	0.3
(1,920)	1:47:A:ALA:HB2	1:56:A:GLY:HA2	10	0.38	0.2	0.3
(1,920)	1:47:A:ALA:HB2	1:56:A:GLY:HA3	10	0.38	0.2	0.3
(1,920)	1:47:A:ALA:HB3	1:56:A:GLY:HA2	10	0.38	0.2	0.3
(1,920)	1:47:A:ALA:HB3	1:56:A:GLY:HA3	10	0.38	0.2	0.3
(1,985)	1:95:A:TRP:HB2	1:152:A:TRP:HD1	9	0.35	0.14	0.29
(1,985)	1:95:A:TRP:HB3	1:152:A:TRP:HD1	9	0.35	0.14	0.29
(1,957)	1:75:A:MET:HB2	1:80:A:HIS:HE1	9	0.23	0.08	0.22
(1,957)	1:75:A:MET:HB3	1:80:A:HIS:HE1	9	0.23	0.08	0.22
(1,911)	1:41:A:PHE:HD1	1:43:A:HIS:HB2	8	0.37	0.16	0.33
(1,911)	1:41:A:PHE:HD1	1:43:A:HIS:HB3	8	0.37	0.16	0.33
(1,911)	1:41:A:PHE:HD2	1:43:A:HIS:HB2	8	0.37	0.16	0.33
(1,911)	1:41:A:PHE:HD2	1:43:A:HIS:HB3	8	0.37	0.16	0.33
(1,374)	1:124:A:ASP:HB2	1:125:A:GLY:H	8	0.29	0.18	0.18
(1,206)	1:48:A:ASP:H	1:48:A:ASP:HB3	8	0.26	0.07	0.24
(1,654)	1:6:A:LYS:HA	1:8:A:GLY:H	8	0.19	0.07	0.16
(1,987)	1:95:A:TRP:HZ3	1:132:A:LEU:HD11	7	0.31	0.2	0.29
(1,987)	1:95:A:TRP:HZ3	1:132:A:LEU:HD12	7	0.31	0.2	0.29
(1,987)	1:95:A:TRP:HZ3	1:132:A:LEU:HD13	7	0.31	0.2	0.29
(1,987)	1:95:A:TRP:HZ3	1:132:A:LEU:HD21	7	0.31	0.2	0.29
(1,987)	1:95:A:TRP:HZ3	1:132:A:LEU:HD22	7	0.31	0.2	0.29
(1,987)	1:95:A:TRP:HZ3	1:132:A:LEU:HD23	7	0.31	0.2	0.29
(1,548)	1:26:A:GLY:H	1:27:A:SER:H	7	0.26	0.15	0.19
(1,22)	1:92:A:THR:HG21	1:123:A:HIS:HD2	7	0.26	0.07	0.3
(1,22)	1:92:A:THR:HG22	1:123:A:HIS:HD2	7	0.26	0.07	0.3
(1,22)	1:92:A:THR:HG23	1:123:A:HIS:HD2	7	0.26	0.07	0.3
(1,711)	1:23:A:LEU:HG	1:24:A:ASN:H	7	0.23	0.04	0.22
(2,69)	1:143:A:LEU:HD21	1:172:A:LYS:H	7	0.22	0.08	0.19
(2,69)	1:143:A:LEU:HD22	1:172:A:LYS:H	7	0.22	0.08	0.19
(2,69)	1:143:A:LEU:HD23	1:172:A:LYS:H	7	0.22	0.08	0.19
(1,194)	1:36:A:GLU:HB2	1:37:A:ALA:H	7	0.18	0.05	0.17
(1,675)	1:57:A:LEU:HB2	1:58:A:PHE:H	6	0.38	0.13	0.37
(1,986)	1:95:A:TRP:HD1	1:132:A:LEU:HD11	6	0.35	0.13	0.34
(1,986)	1:95:A:TRP:HD1	1:132:A:LEU:HD12	6	0.35	0.13	0.34
(1,986)	1:95:A:TRP:HD1	1:132:A:LEU:HD13	6	0.35	0.13	0.34
(1,986)	1:95:A:TRP:HD1	1:132:A:LEU:HD21	6	0.35	0.13	0.34
(1,986)	1:95:A:TRP:HD1	1:132:A:LEU:HD22	6	0.35	0.13	0.34

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)	Median (Å)
(1,986)	1:95:A:TRP:HD1	1:132:A:LEU:HD23	6	0.35	0.13	0.34
(1,861)	1:7:A:PRO:HB2	1:73:A:HIS:HD2	6	0.24	0.17	0.16
(1,861)	1:7:A:PRO:HB3	1:73:A:HIS:HD2	6	0.24	0.17	0.16
(2,81)	1:33:A:GLN:HG2	1:86:A:TYR:HE1	6	0.23	0.09	0.23
(2,81)	1:33:A:GLN:HG2	1:86:A:TYR:HE2	6	0.23	0.09	0.23
(2,81)	1:33:A:GLN:HG3	1:86:A:TYR:HE1	6	0.23	0.09	0.23
(2,81)	1:33:A:GLN:HG3	1:86:A:TYR:HE2	6	0.23	0.09	0.23
(1,486)	1:172:A:LYS:H	1:172:A:LYS:HB3	6	0.22	0.04	0.22
(1,872)	1:13:A:LEU:HB2	1:73:A:HIS:HE1	6	0.21	0.1	0.18
(1,872)	1:13:A:LEU:HB3	1:73:A:HIS:HE1	6	0.21	0.1	0.18
(1,348)	1:112:A:ARG:HB3	1:113:A:ALA:H	6	0.16	0.05	0.16
(1,456)	1:158:A:GLU:HB3	1:159:A:ASN:H	6	0.16	0.04	0.16
(1,897)	1:28:A:VAL:HG11	1:68:A:ASN:HB2	5	0.67	0.27	0.64
(1,897)	1:28:A:VAL:HG11	1:68:A:ASN:HB3	5	0.67	0.27	0.64
(1,897)	1:28:A:VAL:HG12	1:68:A:ASN:HB2	5	0.67	0.27	0.64
(1,897)	1:28:A:VAL:HG12	1:68:A:ASN:HB3	5	0.67	0.27	0.64
(1,897)	1:28:A:VAL:HG13	1:68:A:ASN:HB2	5	0.67	0.27	0.64
(1,897)	1:28:A:VAL:HG13	1:68:A:ASN:HB3	5	0.67	0.27	0.64
(1,897)	1:28:A:VAL:HG21	1:68:A:ASN:HB2	5	0.67	0.27	0.64
(1,897)	1:28:A:VAL:HG21	1:68:A:ASN:HB3	5	0.67	0.27	0.64
(1,897)	1:28:A:VAL:HG22	1:68:A:ASN:HB2	5	0.67	0.27	0.64
(1,897)	1:28:A:VAL:HG22	1:68:A:ASN:HB3	5	0.67	0.27	0.64
(1,897)	1:28:A:VAL:HG23	1:68:A:ASN:HB2	5	0.67	0.27	0.64
(1,897)	1:28:A:VAL:HG23	1:68:A:ASN:HB3	5	0.67	0.27	0.64
(1,274)	1:79:A:GLU:H	1:79:A:GLU:HB2	5	0.66	0.01	0.65
(1,594)	1:66:A:SER:H	1:69:A:ARG:HB3	5	0.31	0.07	0.3
(1,1005)	1:104:A:TRP:HH2	1:110:A:LEU:HD11	5	0.3	0.16	0.24
(1,1005)	1:104:A:TRP:HH2	1:110:A:LEU:HD12	5	0.3	0.16	0.24
(1,1005)	1:104:A:TRP:HH2	1:110:A:LEU:HD13	5	0.3	0.16	0.24
(1,1005)	1:104:A:TRP:HH2	1:110:A:LEU:HD21	5	0.3	0.16	0.24
(1,1005)	1:104:A:TRP:HH2	1:110:A:LEU:HD22	5	0.3	0.16	0.24
(1,1005)	1:104:A:TRP:HH2	1:110:A:LEU:HD23	5	0.3	0.16	0.24
(1,818)	1:71:A:PHE:H	1:165:A:ILE:HG21	5	0.23	0.04	0.23
(1,818)	1:71:A:PHE:H	1:165:A:ILE:HG22	5	0.23	0.04	0.23
(1,818)	1:71:A:PHE:H	1:165:A:ILE:HG23	5	0.23	0.04	0.23
(1,114)	1:75:A:MET:HE1	1:80:A:HIS:HD2	5	0.22	0.05	0.22
(1,114)	1:75:A:MET:HE2	1:80:A:HIS:HD2	5	0.22	0.05	0.22
(1,114)	1:75:A:MET:HE3	1:80:A:HIS:HD2	5	0.22	0.05	0.22
(1,1065)	1:145:A:TYR:HD1	1:168:A:ASP:HB2	5	0.21	0.06	0.2
(1,1065)	1:145:A:TYR:HD1	1:168:A:ASP:HB3	5	0.21	0.06	0.2
(1,1065)	1:145:A:TYR:HD2	1:168:A:ASP:HB2	5	0.21	0.06	0.2
(1,1065)	1:145:A:TYR:HD2	1:168:A:ASP:HB3	5	0.21	0.06	0.2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)	Median (Å)
(1,729)	1:38:A:LYS:HB2	1:160:A:ALA:H	5	0.21	0.07	0.18
(1,749)	1:75:A:MET:H	1:167:A:VAL:HB	5	0.2	0.06	0.17
(1,1002)	1:103:A:GLY:HA2	1:104:A:TRP:HD1	5	0.19	0.04	0.17
(1,1002)	1:103:A:GLY:HA3	1:104:A:TRP:HD1	5	0.19	0.04	0.17
(1,723)	1:86:A:TYR:H	1:132:A:LEU:HG	5	0.18	0.04	0.2
(1,9)	1:97:A:TYR:HE1	1:134:A:HIS:HB2	4	0.32	0.28	0.18
(1,9)	1:97:A:TYR:HE2	1:134:A:HIS:HB2	4	0.32	0.28	0.18
(1,506)	1:48:A:ASP:HA	1:51:A:ILE:H	4	0.26	0.07	0.25
(1,1033)	1:121:A:VAL:HG11	1:134:A:HIS:HD2	4	0.26	0.12	0.24
(1,1033)	1:121:A:VAL:HG12	1:134:A:HIS:HD2	4	0.26	0.12	0.24
(1,1033)	1:121:A:VAL:HG13	1:134:A:HIS:HD2	4	0.26	0.12	0.24
(1,1033)	1:121:A:VAL:HG21	1:134:A:HIS:HD2	4	0.26	0.12	0.24
(1,1033)	1:121:A:VAL:HG22	1:134:A:HIS:HD2	4	0.26	0.12	0.24
(1,1033)	1:121:A:VAL:HG23	1:134:A:HIS:HD2	4	0.26	0.12	0.24
(1,578)	1:39:A:LYS:H	1:159:A:ASN:HA	4	0.23	0.07	0.26
(1,1064)	1:145:A:TYR:HB2	1:168:A:ASP:HA	4	0.19	0.03	0.19
(1,1064)	1:145:A:TYR:HB3	1:168:A:ASP:HA	4	0.19	0.03	0.19
(1,1076)	1:150:A:ALA:H	1:164:A:VAL:HG11	4	0.18	0.05	0.18
(1,1076)	1:150:A:ALA:H	1:164:A:VAL:HG12	4	0.18	0.05	0.18
(1,1076)	1:150:A:ALA:H	1:164:A:VAL:HG13	4	0.18	0.05	0.18
(1,1076)	1:150:A:ALA:H	1:164:A:VAL:HG21	4	0.18	0.05	0.18
(1,1076)	1:150:A:ALA:H	1:164:A:VAL:HG22	4	0.18	0.05	0.18
(1,1076)	1:150:A:ALA:H	1:164:A:VAL:HG23	4	0.18	0.05	0.18
(1,880)	1:16:A:GLU:HB2	1:22:A:ASN:H	4	0.17	0.04	0.16
(1,880)	1:16:A:GLU:HB3	1:22:A:ASN:H	4	0.17	0.04	0.16
(1,750)	1:94:A:GLN:HG2	1:95:A:TRP:H	4	0.14	0.03	0.14
(1,858)	1:6:A:LYS:HB2	1:8:A:GLY:H	3	0.31	0.1	0.28
(1,858)	1:6:A:LYS:HB3	1:8:A:GLY:H	3	0.31	0.1	0.28
(1,728)	1:134:A:HIS:HD2	1:135:A:HIS:H	3	0.29	0.02	0.29
(1,990)	1:96:A:HIS:HE1	1:151:A:VAL:HG11	3	0.29	0.11	0.36
(1,990)	1:96:A:HIS:HE1	1:151:A:VAL:HG12	3	0.29	0.11	0.36
(1,990)	1:96:A:HIS:HE1	1:151:A:VAL:HG13	3	0.29	0.11	0.36
(1,990)	1:96:A:HIS:HE1	1:151:A:VAL:HG21	3	0.29	0.11	0.36
(1,990)	1:96:A:HIS:HE1	1:151:A:VAL:HG22	3	0.29	0.11	0.36
(1,990)	1:96:A:HIS:HE1	1:151:A:VAL:HG23	3	0.29	0.11	0.36
(1,874)	1:13:A:LEU:HD11	1:74:A:ILE:H	3	0.28	0.07	0.28
(1,874)	1:13:A:LEU:HD12	1:74:A:ILE:H	3	0.28	0.07	0.28
(1,874)	1:13:A:LEU:HD13	1:74:A:ILE:H	3	0.28	0.07	0.28
(1,874)	1:13:A:LEU:HD21	1:74:A:ILE:H	3	0.28	0.07	0.28
(1,874)	1:13:A:LEU:HD22	1:74:A:ILE:H	3	0.28	0.07	0.28
(1,874)	1:13:A:LEU:HD23	1:74:A:ILE:H	3	0.28	0.07	0.28
(1,12)	1:3:A:PHE:HE1	1:87:A:THR:HB	3	0.26	0.09	0.3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)	Median (Å)
(1,12)	1:3:A:PHE:HE2	1:87:A:THR:HB	3	0.26	0.09	0.3
(1,110)	1:93:A:SER:HB2	1:155:A:ALA:HB1	3	0.23	0.09	0.17
(1,110)	1:93:A:SER:HB2	1:155:A:ALA:HB2	3	0.23	0.09	0.17
(1,110)	1:93:A:SER:HB2	1:155:A:ALA:HB3	3	0.23	0.09	0.17
(1,517)	1:6:A:LYS:H	1:83:A:THR:H	3	0.21	0.03	0.2
(1,859)	1:6:A:LYS:HG2	1:8:A:GLY:H	3	0.2	0.1	0.16
(1,859)	1:6:A:LYS:HG3	1:8:A:GLY:H	3	0.2	0.1	0.16
(1,546)	1:20:A:PHE:H	1:21:A:LEU:H	3	0.18	0.04	0.18
(1,724)	1:95:A:TRP:H	1:95:A:TRP:HD1	3	0.18	0.05	0.16
(2,3)	1:58:A:PHE:HE1	1:110:A:LEU:HG	3	0.18	0.03	0.19
(2,3)	1:58:A:PHE:HE2	1:110:A:LEU:HG	3	0.18	0.03	0.19
(1,238)	1:64:A:GLN:HA	1:65:A:GLN:H	3	0.14	0.04	0.12
(1,255)	1:69:A:ARG:HB2	1:70:A:TRP:H	3	0.14	0.02	0.14
(1,910)	1:40:A:GLY:HA2	1:41:A:PHE:HD1	2	0.53	0.18	0.53
(1,910)	1:40:A:GLY:HA2	1:41:A:PHE:HD2	2	0.53	0.18	0.53
(1,910)	1:40:A:GLY:HA3	1:41:A:PHE:HD1	2	0.53	0.18	0.53
(1,910)	1:40:A:GLY:HA3	1:41:A:PHE:HD2	2	0.53	0.18	0.53
(1,908)	1:35:A:LEU:HD11	1:163:A:GLN:HA	2	0.46	0.18	0.46
(1,908)	1:35:A:LEU:HD12	1:163:A:GLN:HA	2	0.46	0.18	0.46
(1,908)	1:35:A:LEU:HD13	1:163:A:GLN:HA	2	0.46	0.18	0.46
(1,908)	1:35:A:LEU:HD21	1:163:A:GLN:HA	2	0.46	0.18	0.46
(1,908)	1:35:A:LEU:HD22	1:163:A:GLN:HA	2	0.46	0.18	0.46
(1,908)	1:35:A:LEU:HD23	1:163:A:GLN:HA	2	0.46	0.18	0.46
(1,327)	1:102:A:LYS:H	1:102:A:LYS:HB2	2	0.44	0.04	0.44
(1,882)	1:18:A:PHE:HB2	1:20:A:PHE:H	2	0.42	0.07	0.42
(1,882)	1:18:A:PHE:HB3	1:20:A:PHE:H	2	0.42	0.07	0.42
(1,947)	1:70:A:TRP:HD1	1:164:A:VAL:HG11	2	0.36	0.19	0.36
(1,947)	1:70:A:TRP:HD1	1:164:A:VAL:HG12	2	0.36	0.19	0.36
(1,947)	1:70:A:TRP:HD1	1:164:A:VAL:HG13	2	0.36	0.19	0.36
(1,947)	1:70:A:TRP:HD1	1:164:A:VAL:HG21	2	0.36	0.19	0.36
(1,947)	1:70:A:TRP:HD1	1:164:A:VAL:HG22	2	0.36	0.19	0.36
(1,947)	1:70:A:TRP:HD1	1:164:A:VAL:HG23	2	0.36	0.19	0.36
(1,1004)	1:104:A:TRP:HZ2	1:110:A:LEU:HD11	2	0.31	0.1	0.31
(1,1004)	1:104:A:TRP:HZ2	1:110:A:LEU:HD12	2	0.31	0.1	0.31
(1,1004)	1:104:A:TRP:HZ2	1:110:A:LEU:HD13	2	0.31	0.1	0.31
(1,1004)	1:104:A:TRP:HZ2	1:110:A:LEU:HD21	2	0.31	0.1	0.31
(1,1004)	1:104:A:TRP:HZ2	1:110:A:LEU:HD22	2	0.31	0.1	0.31
(1,1004)	1:104:A:TRP:HZ2	1:110:A:LEU:HD23	2	0.31	0.1	0.31
(1,21)	1:81:A:THR:HG21	1:135:A:HIS:HE1	2	0.3	0.12	0.3
(1,21)	1:81:A:THR:HG22	1:135:A:HIS:HE1	2	0.3	0.12	0.3
(1,21)	1:81:A:THR:HG23	1:135:A:HIS:HE1	2	0.3	0.12	0.3
(1,914)	1:43:A:HIS:HB2	1:44:A:SER:H	2	0.28	0.02	0.28

Continued on next page...

Continued from previous page...

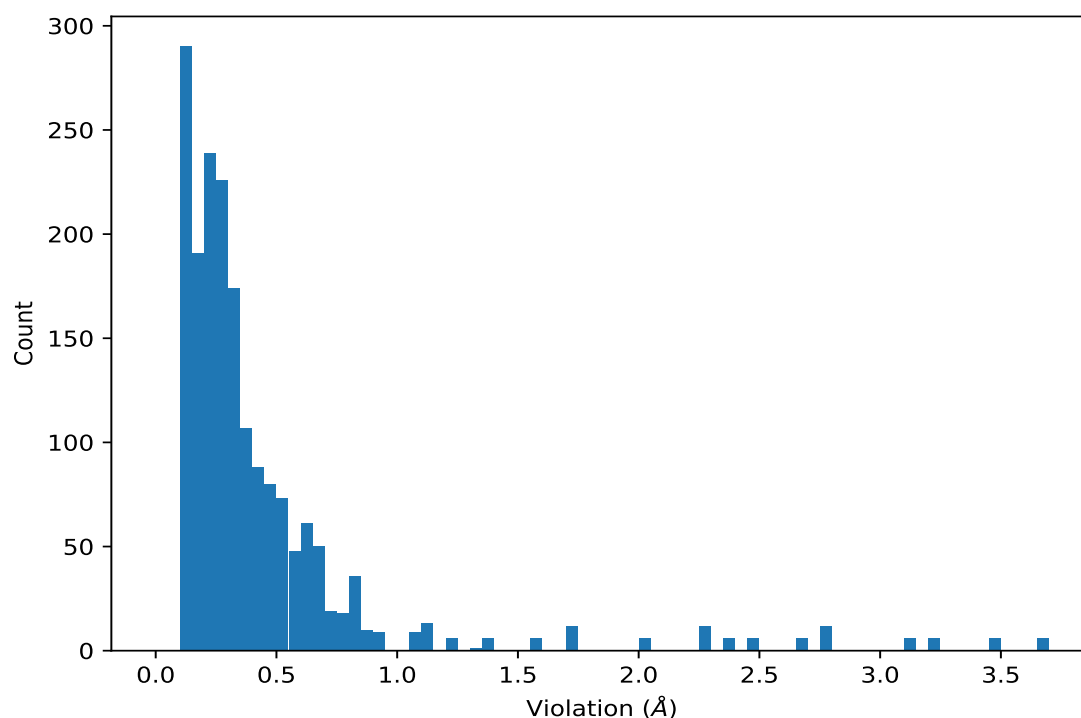
Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)	Median (Å)
(1,914)	1:43:A:HIS:HB3	1:44:A:SER:H	2	0.28	0.02	0.28
(1,11)	1:98:A:TYR:HD1	1:149:A:LEU:HG	2	0.27	0.09	0.27
(1,11)	1:98:A:TYR:HD2	1:149:A:LEU:HG	2	0.27	0.09	0.27
(1,576)	1:92:A:THR:HA	1:155:A:ALA:H	2	0.24	0.02	0.24
(1,375)	1:127:A:PRO:HA	1:128:A:ALA:H	2	0.24	0.02	0.24
(1,19)	1:81:A:THR:HG21	1:135:A:HIS:HD2	2	0.22	0.05	0.22
(1,19)	1:81:A:THR:HG22	1:135:A:HIS:HD2	2	0.22	0.05	0.22
(1,19)	1:81:A:THR:HG23	1:135:A:HIS:HD2	2	0.22	0.05	0.22
(1,596)	1:154:A:VAL:H	1:160:A:ALA:HA	2	0.21	0.07	0.21
(2,72)	1:143:A:LEU:HD11	1:172:A:LYS:H	2	0.2	0.05	0.2
(2,72)	1:143:A:LEU:HD12	1:172:A:LYS:H	2	0.2	0.05	0.2
(2,72)	1:143:A:LEU:HD13	1:172:A:LYS:H	2	0.2	0.05	0.2
(1,710)	1:23:A:LEU:H	1:23:A:LEU:HG	2	0.2	0.04	0.2
(1,746)	1:150:A:ALA:H	1:163:A:GLN:HB3	2	0.19	0.03	0.19
(1,981)	1:94:A:GLN:HG2	1:96:A:HIS:HD2	2	0.19	0.06	0.19
(1,981)	1:94:A:GLN:HG3	1:96:A:HIS:HD2	2	0.19	0.06	0.19
(1,350)	1:114:A:ASP:H	1:114:A:ASP:HB3	2	0.18	0.02	0.18
(1,673)	1:57:A:LEU:HA	1:59:A:GLY:H	2	0.18	0.06	0.18
(1,649)	1:11:A:ALA:HA	1:13:A:LEU:H	2	0.16	0.01	0.16
(1,551)	1:150:A:ALA:H	1:164:A:VAL:HA	2	0.15	0.02	0.15
(1,266)	1:75:A:MET:H	1:75:A:MET:HB3	2	0.14	0.0	0.14
(1,1104)	1:172:A:LYS:H	1:172:A:LYS:HD2	2	0.14	0.0	0.14
(1,1104)	1:172:A:LYS:H	1:172:A:LYS:HD3	2	0.14	0.0	0.14
(1,262)	1:72:A:LYS:HB2	1:73:A:HIS:H	2	0.14	0.01	0.14
(1,969)	1:81:A:THR:HG21	1:133:A:SER:HB2	2	0.14	0.01	0.14
(1,969)	1:81:A:THR:HG21	1:133:A:SER:HB3	2	0.14	0.01	0.14
(1,969)	1:81:A:THR:HG22	1:133:A:SER:HB2	2	0.14	0.01	0.14
(1,969)	1:81:A:THR:HG22	1:133:A:SER:HB3	2	0.14	0.01	0.14
(1,969)	1:81:A:THR:HG23	1:133:A:SER:HB2	2	0.14	0.01	0.14
(1,969)	1:81:A:THR:HG23	1:133:A:SER:HB3	2	0.14	0.01	0.14
(1,343)	1:107:A:ASP:HB2	1:108:A:LYS:H	2	0.12	0.02	0.12
(1,157)	1:20:A:PHE:H	1:20:A:PHE:HB3	2	0.12	0.0	0.12

¹Number of violated models, ²Standard deviation

9.5 All violated distance restraints ⓘ

9.5.1 Histogram : Distribution of distance violations ⓘ

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



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

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

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,927)	1:54:A:ALA:HB1	1:60:A:GLY:HA2	17	3.67
(1,927)	1:54:A:ALA:HB1	1:60:A:GLY:HA3	17	3.67
(1,927)	1:54:A:ALA:HB2	1:60:A:GLY:HA2	17	3.67
(1,927)	1:54:A:ALA:HB2	1:60:A:GLY:HA3	17	3.67
(1,927)	1:54:A:ALA:HB3	1:60:A:GLY:HA2	17	3.67
(1,927)	1:54:A:ALA:HB3	1:60:A:GLY:HA3	17	3.67
(1,927)	1:54:A:ALA:HB1	1:60:A:GLY:HA2	7	3.49
(1,927)	1:54:A:ALA:HB1	1:60:A:GLY:HA3	7	3.49
(1,927)	1:54:A:ALA:HB2	1:60:A:GLY:HA2	7	3.49
(1,927)	1:54:A:ALA:HB2	1:60:A:GLY:HA3	7	3.49
(1,927)	1:54:A:ALA:HB3	1:60:A:GLY:HA2	7	3.49
(1,927)	1:54:A:ALA:HB3	1:60:A:GLY:HA3	7	3.49
(1,927)	1:54:A:ALA:HB1	1:60:A:GLY:HA2	3	3.23
(1,927)	1:54:A:ALA:HB1	1:60:A:GLY:HA3	3	3.23
(1,927)	1:54:A:ALA:HB2	1:60:A:GLY:HA2	3	3.23
(1,927)	1:54:A:ALA:HB2	1:60:A:GLY:HA3	3	3.23

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,927)	1:54:A:ALA:HB3	1:60:A:GLY:HA2	3	3.23
(1,927)	1:54:A:ALA:HB3	1:60:A:GLY:HA3	3	3.23
(1,927)	1:54:A:ALA:HB1	1:60:A:GLY:HA2	11	3.1
(1,927)	1:54:A:ALA:HB1	1:60:A:GLY:HA3	11	3.1
(1,927)	1:54:A:ALA:HB2	1:60:A:GLY:HA2	11	3.1
(1,927)	1:54:A:ALA:HB2	1:60:A:GLY:HA3	11	3.1
(1,927)	1:54:A:ALA:HB3	1:60:A:GLY:HA2	11	3.1
(1,927)	1:54:A:ALA:HB3	1:60:A:GLY:HA3	11	3.1
(1,927)	1:54:A:ALA:HB1	1:60:A:GLY:HA2	12	2.8
(1,927)	1:54:A:ALA:HB1	1:60:A:GLY:HA3	12	2.8
(1,927)	1:54:A:ALA:HB2	1:60:A:GLY:HA2	12	2.8
(1,927)	1:54:A:ALA:HB2	1:60:A:GLY:HA3	12	2.8
(1,927)	1:54:A:ALA:HB3	1:60:A:GLY:HA2	12	2.8
(1,927)	1:54:A:ALA:HB3	1:60:A:GLY:HA3	12	2.8
(1,927)	1:54:A:ALA:HB1	1:60:A:GLY:HA2	20	2.8
(1,927)	1:54:A:ALA:HB1	1:60:A:GLY:HA3	20	2.8
(1,927)	1:54:A:ALA:HB2	1:60:A:GLY:HA2	20	2.8
(1,927)	1:54:A:ALA:HB2	1:60:A:GLY:HA3	20	2.8
(1,927)	1:54:A:ALA:HB3	1:60:A:GLY:HA2	20	2.8
(1,927)	1:54:A:ALA:HB3	1:60:A:GLY:HA3	20	2.8
(1,927)	1:54:A:ALA:HB1	1:60:A:GLY:HA2	8	2.69
(1,927)	1:54:A:ALA:HB1	1:60:A:GLY:HA3	8	2.69
(1,927)	1:54:A:ALA:HB2	1:60:A:GLY:HA2	8	2.69
(1,927)	1:54:A:ALA:HB2	1:60:A:GLY:HA3	8	2.69
(1,927)	1:54:A:ALA:HB3	1:60:A:GLY:HA2	8	2.69
(1,927)	1:54:A:ALA:HB3	1:60:A:GLY:HA3	8	2.69
(1,927)	1:54:A:ALA:HB1	1:60:A:GLY:HA2	5	2.46
(1,927)	1:54:A:ALA:HB1	1:60:A:GLY:HA3	5	2.46
(1,927)	1:54:A:ALA:HB2	1:60:A:GLY:HA2	5	2.46
(1,927)	1:54:A:ALA:HB2	1:60:A:GLY:HA3	5	2.46
(1,927)	1:54:A:ALA:HB3	1:60:A:GLY:HA2	5	2.46
(1,927)	1:54:A:ALA:HB3	1:60:A:GLY:HA3	5	2.46
(1,927)	1:54:A:ALA:HB1	1:60:A:GLY:HA2	16	2.38
(1,927)	1:54:A:ALA:HB1	1:60:A:GLY:HA3	16	2.38
(1,927)	1:54:A:ALA:HB2	1:60:A:GLY:HA2	16	2.38
(1,927)	1:54:A:ALA:HB2	1:60:A:GLY:HA3	16	2.38
(1,927)	1:54:A:ALA:HB3	1:60:A:GLY:HA2	16	2.38
(1,927)	1:54:A:ALA:HB3	1:60:A:GLY:HA3	16	2.38
(1,927)	1:54:A:ALA:HB1	1:60:A:GLY:HA2	18	2.3
(1,927)	1:54:A:ALA:HB1	1:60:A:GLY:HA3	18	2.3
(1,927)	1:54:A:ALA:HB2	1:60:A:GLY:HA2	18	2.3
(1,927)	1:54:A:ALA:HB2	1:60:A:GLY:HA3	18	2.3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,927)	1:54:A:ALA:HB3	1:60:A:GLY:HA2	18	2.3
(1,927)	1:54:A:ALA:HB3	1:60:A:GLY:HA3	18	2.3
(1,927)	1:54:A:ALA:HB1	1:60:A:GLY:HA2	10	2.26
(1,927)	1:54:A:ALA:HB1	1:60:A:GLY:HA3	10	2.26
(1,927)	1:54:A:ALA:HB2	1:60:A:GLY:HA2	10	2.26
(1,927)	1:54:A:ALA:HB2	1:60:A:GLY:HA3	10	2.26
(1,927)	1:54:A:ALA:HB3	1:60:A:GLY:HA2	10	2.26
(1,927)	1:54:A:ALA:HB3	1:60:A:GLY:HA3	10	2.26
(1,927)	1:54:A:ALA:HB1	1:60:A:GLY:HA2	1	2.02
(1,927)	1:54:A:ALA:HB1	1:60:A:GLY:HA3	1	2.02
(1,927)	1:54:A:ALA:HB2	1:60:A:GLY:HA2	1	2.02
(1,927)	1:54:A:ALA:HB2	1:60:A:GLY:HA3	1	2.02
(1,927)	1:54:A:ALA:HB3	1:60:A:GLY:HA2	1	2.02
(1,927)	1:54:A:ALA:HB3	1:60:A:GLY:HA3	1	2.02
(1,1032)	1:121:A:VAL:HG11	1:134:A:HIS:HB2	20	1.73
(1,1032)	1:121:A:VAL:HG12	1:134:A:HIS:HB2	20	1.73
(1,1032)	1:121:A:VAL:HG13	1:134:A:HIS:HB2	20	1.73
(1,1032)	1:121:A:VAL:HG21	1:134:A:HIS:HB2	20	1.73
(1,1032)	1:121:A:VAL:HG22	1:134:A:HIS:HB2	20	1.73
(1,1032)	1:121:A:VAL:HG23	1:134:A:HIS:HB2	20	1.73
(1,927)	1:54:A:ALA:HB1	1:60:A:GLY:HA2	6	1.72
(1,927)	1:54:A:ALA:HB1	1:60:A:GLY:HA3	6	1.72
(1,927)	1:54:A:ALA:HB2	1:60:A:GLY:HA2	6	1.72
(1,927)	1:54:A:ALA:HB2	1:60:A:GLY:HA3	6	1.72
(1,927)	1:54:A:ALA:HB3	1:60:A:GLY:HA2	6	1.72
(1,927)	1:54:A:ALA:HB3	1:60:A:GLY:HA3	6	1.72
(1,927)	1:54:A:ALA:HB1	1:60:A:GLY:HA2	13	1.55
(1,927)	1:54:A:ALA:HB1	1:60:A:GLY:HA3	13	1.55
(1,927)	1:54:A:ALA:HB2	1:60:A:GLY:HA2	13	1.55
(1,927)	1:54:A:ALA:HB2	1:60:A:GLY:HA3	13	1.55
(1,927)	1:54:A:ALA:HB3	1:60:A:GLY:HA2	13	1.55
(1,927)	1:54:A:ALA:HB3	1:60:A:GLY:HA3	13	1.55
(2,2)	1:30:A:TYR:HE1	1:34:A:SER:HB2	19	1.4
(2,2)	1:30:A:TYR:HE2	1:34:A:SER:HB2	19	1.4
(1,16)	1:49:A:GLY:HA3	1:162:A:TYR:HE1	1	1.38
(1,16)	1:49:A:GLY:HA3	1:162:A:TYR:HE2	1	1.38
(1,16)	1:49:A:GLY:HA3	1:162:A:TYR:HE1	18	1.36
(1,16)	1:49:A:GLY:HA3	1:162:A:TYR:HE2	18	1.36
(1,656)	1:112:A:ARG:HB2	1:114:A:ASP:H	3	1.32
(1,927)	1:54:A:ALA:HB1	1:60:A:GLY:HA2	4	1.23
(1,927)	1:54:A:ALA:HB1	1:60:A:GLY:HA3	4	1.23
(1,927)	1:54:A:ALA:HB2	1:60:A:GLY:HA2	4	1.23

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,927)	1:54:A:ALA:HB2	1:60:A:GLY:HA3	4	1.23
(1,927)	1:54:A:ALA:HB3	1:60:A:GLY:HA2	4	1.23
(1,927)	1:54:A:ALA:HB3	1:60:A:GLY:HA3	4	1.23
(1,897)	1:28:A:VAL:HG11	1:68:A:ASN:HB2	8	1.15
(1,897)	1:28:A:VAL:HG11	1:68:A:ASN:HB3	8	1.15
(1,897)	1:28:A:VAL:HG12	1:68:A:ASN:HB2	8	1.15
(1,897)	1:28:A:VAL:HG12	1:68:A:ASN:HB3	8	1.15
(1,897)	1:28:A:VAL:HG13	1:68:A:ASN:HB2	8	1.15
(1,897)	1:28:A:VAL:HG13	1:68:A:ASN:HB3	8	1.15
(1,897)	1:28:A:VAL:HG21	1:68:A:ASN:HB2	8	1.15
(1,897)	1:28:A:VAL:HG21	1:68:A:ASN:HB3	8	1.15
(1,897)	1:28:A:VAL:HG22	1:68:A:ASN:HB2	8	1.15
(1,897)	1:28:A:VAL:HG22	1:68:A:ASN:HB3	8	1.15
(1,897)	1:28:A:VAL:HG23	1:68:A:ASN:HB2	8	1.15
(1,897)	1:28:A:VAL:HG23	1:68:A:ASN:HB3	8	1.15
(1,656)	1:112:A:ARG:HB2	1:114:A:ASP:H	6	1.12
(2,2)	1:30:A:TYR:HE1	1:34:A:SER:HB2	16	1.08
(2,2)	1:30:A:TYR:HE2	1:34:A:SER:HB2	16	1.08
(1,751)	1:109:A:PRO:HD3	1:110:A:LEU:H	10	1.07
(1,927)	1:54:A:ALA:HB1	1:60:A:GLY:HA2	19	1.06
(1,927)	1:54:A:ALA:HB1	1:60:A:GLY:HA3	19	1.06
(1,927)	1:54:A:ALA:HB2	1:60:A:GLY:HA2	19	1.06
(1,927)	1:54:A:ALA:HB2	1:60:A:GLY:HA3	19	1.06
(1,927)	1:54:A:ALA:HB3	1:60:A:GLY:HA2	19	1.06
(1,927)	1:54:A:ALA:HB3	1:60:A:GLY:HA3	19	1.06
(2,2)	1:30:A:TYR:HE1	1:34:A:SER:HB2	3	0.94
(2,2)	1:30:A:TYR:HE2	1:34:A:SER:HB2	3	0.94
(1,1032)	1:121:A:VAL:HG11	1:134:A:HIS:HB2	1	0.92
(1,1032)	1:121:A:VAL:HG12	1:134:A:HIS:HB2	1	0.92
(1,1032)	1:121:A:VAL:HG13	1:134:A:HIS:HB2	1	0.92
(1,1032)	1:121:A:VAL:HG21	1:134:A:HIS:HB2	1	0.92
(1,1032)	1:121:A:VAL:HG22	1:134:A:HIS:HB2	1	0.92
(1,1032)	1:121:A:VAL:HG23	1:134:A:HIS:HB2	1	0.92
(1,635)	1:109:A:PRO:HA	1:113:A:ALA:H	11	0.91
(2,2)	1:30:A:TYR:HE1	1:34:A:SER:HB2	20	0.88
(2,2)	1:30:A:TYR:HE2	1:34:A:SER:HB2	20	0.88
(1,920)	1:47:A:ALA:HB1	1:56:A:GLY:HA2	17	0.87
(1,920)	1:47:A:ALA:HB1	1:56:A:GLY:HA3	17	0.87
(1,920)	1:47:A:ALA:HB2	1:56:A:GLY:HA2	17	0.87
(1,920)	1:47:A:ALA:HB2	1:56:A:GLY:HA3	17	0.87
(1,920)	1:47:A:ALA:HB3	1:56:A:GLY:HA2	17	0.87
(1,920)	1:47:A:ALA:HB3	1:56:A:GLY:HA3	17	0.87

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,2)	1:30:A:TYR:HE1	1:34:A:SER:HB2	7	0.86
(2,2)	1:30:A:TYR:HE2	1:34:A:SER:HB2	7	0.86
(1,927)	1:54:A:ALA:HB1	1:60:A:GLY:HA2	2	0.85
(1,927)	1:54:A:ALA:HB1	1:60:A:GLY:HA3	2	0.85
(1,927)	1:54:A:ALA:HB2	1:60:A:GLY:HA2	2	0.85
(1,927)	1:54:A:ALA:HB2	1:60:A:GLY:HA3	2	0.85
(1,927)	1:54:A:ALA:HB3	1:60:A:GLY:HA2	2	0.85
(1,927)	1:54:A:ALA:HB3	1:60:A:GLY:HA3	2	0.85
(1,816)	1:4:A:ILE:HG21	1:6:A:LYS:H	9	0.85
(1,816)	1:4:A:ILE:HG22	1:6:A:LYS:H	9	0.85
(1,816)	1:4:A:ILE:HG23	1:6:A:LYS:H	9	0.85
(1,1051)	1:136:A:ILE:HG12	1:148:A:ILE:HD11	5	0.84
(1,1051)	1:136:A:ILE:HG12	1:148:A:ILE:HD12	5	0.84
(1,1051)	1:136:A:ILE:HG12	1:148:A:ILE:HD13	5	0.84
(1,1051)	1:136:A:ILE:HG13	1:148:A:ILE:HD11	5	0.84
(1,1051)	1:136:A:ILE:HG13	1:148:A:ILE:HD12	5	0.84
(1,1051)	1:136:A:ILE:HG13	1:148:A:ILE:HD13	5	0.84
(2,100)	1:121:A:VAL:HG11	1:135:A:HIS:H	1	0.83
(2,100)	1:121:A:VAL:HG12	1:135:A:HIS:H	1	0.83
(2,100)	1:121:A:VAL:HG13	1:135:A:HIS:H	1	0.83
(2,100)	1:121:A:VAL:HG21	1:135:A:HIS:H	1	0.83
(2,100)	1:121:A:VAL:HG22	1:135:A:HIS:H	1	0.83
(2,100)	1:121:A:VAL:HG23	1:135:A:HIS:H	1	0.83
(1,1051)	1:136:A:ILE:HG12	1:148:A:ILE:HD11	2	0.81
(1,1051)	1:136:A:ILE:HG12	1:148:A:ILE:HD12	2	0.81
(1,1051)	1:136:A:ILE:HG12	1:148:A:ILE:HD13	2	0.81
(1,1051)	1:136:A:ILE:HG13	1:148:A:ILE:HD11	2	0.81
(1,1051)	1:136:A:ILE:HG13	1:148:A:ILE:HD12	2	0.81
(1,1051)	1:136:A:ILE:HG13	1:148:A:ILE:HD13	2	0.81
(1,1051)	1:136:A:ILE:HG12	1:148:A:ILE:HD11	10	0.81
(1,1051)	1:136:A:ILE:HG12	1:148:A:ILE:HD12	10	0.81
(1,1051)	1:136:A:ILE:HG12	1:148:A:ILE:HD13	10	0.81
(1,1051)	1:136:A:ILE:HG13	1:148:A:ILE:HD11	10	0.81
(1,1051)	1:136:A:ILE:HG13	1:148:A:ILE:HD12	10	0.81
(1,1051)	1:136:A:ILE:HG13	1:148:A:ILE:HD13	10	0.81
(1,7)	1:69:A:ARG:HB2	1:70:A:TRP:HD1	3	0.81
(1,656)	1:112:A:ARG:HB2	1:114:A:ASP:H	16	0.8
(1,167)	1:23:A:LEU:HB3	1:24:A:ASN:H	5	0.8
(1,9)	1:97:A:TYR:HE1	1:134:A:HIS:HB2	20	0.79
(1,9)	1:97:A:TYR:HE2	1:134:A:HIS:HB2	20	0.79
(1,1032)	1:121:A:VAL:HG11	1:134:A:HIS:HB2	19	0.78
(1,1032)	1:121:A:VAL:HG12	1:134:A:HIS:HB2	19	0.78

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1032)	1:121:A:VAL:HG13	1:134:A:HIS:HB2	19	0.78
(1,1032)	1:121:A:VAL:HG21	1:134:A:HIS:HB2	19	0.78
(1,1032)	1:121:A:VAL:HG22	1:134:A:HIS:HB2	19	0.78
(1,1032)	1:121:A:VAL:HG23	1:134:A:HIS:HB2	19	0.78
(1,1008)	1:106:A:PRO:HB2	1:108:A:LYS:H	12	0.77
(1,1008)	1:106:A:PRO:HB3	1:108:A:LYS:H	12	0.77
(1,167)	1:23:A:LEU:HB3	1:24:A:ASN:H	4	0.77
(1,656)	1:112:A:ARG:HB2	1:114:A:ASP:H	19	0.76
(2,85)	1:61:A:ILE:HD11	1:64:A:GLN:HE21	15	0.75
(2,85)	1:61:A:ILE:HD11	1:64:A:GLN:HE22	15	0.75
(2,85)	1:61:A:ILE:HD12	1:64:A:GLN:HE21	15	0.75
(2,85)	1:61:A:ILE:HD12	1:64:A:GLN:HE22	15	0.75
(2,85)	1:61:A:ILE:HD13	1:64:A:GLN:HE21	15	0.75
(2,85)	1:61:A:ILE:HD13	1:64:A:GLN:HE22	15	0.75
(2,18)	1:160:A:ALA:HB1	1:162:A:TYR:HE1	17	0.74
(2,18)	1:160:A:ALA:HB1	1:162:A:TYR:HE2	17	0.74
(2,18)	1:160:A:ALA:HB2	1:162:A:TYR:HE1	17	0.74
(2,18)	1:160:A:ALA:HB2	1:162:A:TYR:HE2	17	0.74
(2,18)	1:160:A:ALA:HB3	1:162:A:TYR:HE1	17	0.74
(2,18)	1:160:A:ALA:HB3	1:162:A:TYR:HE2	17	0.74
(1,987)	1:95:A:TRP:HZ3	1:132:A:LEU:HD11	12	0.74
(1,987)	1:95:A:TRP:HZ3	1:132:A:LEU:HD12	12	0.74
(1,987)	1:95:A:TRP:HZ3	1:132:A:LEU:HD13	12	0.74
(1,987)	1:95:A:TRP:HZ3	1:132:A:LEU:HD21	12	0.74
(1,987)	1:95:A:TRP:HZ3	1:132:A:LEU:HD22	12	0.74
(1,987)	1:95:A:TRP:HZ3	1:132:A:LEU:HD23	12	0.74
(1,7)	1:69:A:ARG:HB2	1:70:A:TRP:HD1	12	0.73
(1,200)	1:39:A:LYS:HB2	1:40:A:GLY:H	5	0.72
(1,910)	1:40:A:GLY:HA2	1:41:A:PHE:HD1	10	0.71
(1,910)	1:40:A:GLY:HA2	1:41:A:PHE:HD2	10	0.71
(1,910)	1:40:A:GLY:HA3	1:41:A:PHE:HD1	10	0.71
(1,910)	1:40:A:GLY:HA3	1:41:A:PHE:HD2	10	0.71
(1,751)	1:109:A:PRO:HD3	1:110:A:LEU:H	11	0.71
(1,635)	1:109:A:PRO:HA	1:113:A:ALA:H	7	0.7
(1,345)	1:109:A:PRO:HB2	1:110:A:LEU:H	4	0.7
(1,167)	1:23:A:LEU:HB3	1:24:A:ASN:H	9	0.7
(1,167)	1:23:A:LEU:HB3	1:24:A:ASN:H	19	0.7
(1,911)	1:41:A:PHE:HD1	1:43:A:HIS:HB2	2	0.69
(1,911)	1:41:A:PHE:HD1	1:43:A:HIS:HB3	2	0.69
(1,911)	1:41:A:PHE:HD2	1:43:A:HIS:HB2	2	0.69
(1,911)	1:41:A:PHE:HD2	1:43:A:HIS:HB3	2	0.69
(1,897)	1:28:A:VAL:HG11	1:68:A:ASN:HB2	3	0.69

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,897)	1:28:A:VAL:HG11	1:68:A:ASN:HB3	3	0.69
(1,897)	1:28:A:VAL:HG12	1:68:A:ASN:HB2	3	0.69
(1,897)	1:28:A:VAL:HG12	1:68:A:ASN:HB3	3	0.69
(1,897)	1:28:A:VAL:HG13	1:68:A:ASN:HB2	3	0.69
(1,897)	1:28:A:VAL:HG13	1:68:A:ASN:HB3	3	0.69
(1,897)	1:28:A:VAL:HG21	1:68:A:ASN:HB2	3	0.69
(1,897)	1:28:A:VAL:HG21	1:68:A:ASN:HB3	3	0.69
(1,897)	1:28:A:VAL:HG22	1:68:A:ASN:HB2	3	0.69
(1,897)	1:28:A:VAL:HG22	1:68:A:ASN:HB3	3	0.69
(1,897)	1:28:A:VAL:HG23	1:68:A:ASN:HB2	3	0.69
(1,897)	1:28:A:VAL:HG23	1:68:A:ASN:HB3	3	0.69
(1,200)	1:39:A:LYS:HB2	1:40:A:GLY:H	7	0.69
(1,200)	1:39:A:LYS:HB2	1:40:A:GLY:H	15	0.69
(1,635)	1:109:A:PRO:HA	1:113:A:ALA:H	8	0.68
(2,100)	1:121:A:VAL:HG11	1:135:A:HIS:H	4	0.67
(2,100)	1:121:A:VAL:HG12	1:135:A:HIS:H	4	0.67
(2,100)	1:121:A:VAL:HG13	1:135:A:HIS:H	4	0.67
(2,100)	1:121:A:VAL:HG21	1:135:A:HIS:H	4	0.67
(2,100)	1:121:A:VAL:HG22	1:135:A:HIS:H	4	0.67
(2,100)	1:121:A:VAL:HG23	1:135:A:HIS:H	4	0.67
(2,100)	1:121:A:VAL:HG11	1:135:A:HIS:H	13	0.67
(2,100)	1:121:A:VAL:HG12	1:135:A:HIS:H	13	0.67
(2,100)	1:121:A:VAL:HG13	1:135:A:HIS:H	13	0.67
(2,100)	1:121:A:VAL:HG21	1:135:A:HIS:H	13	0.67
(2,100)	1:121:A:VAL:HG22	1:135:A:HIS:H	13	0.67
(2,100)	1:121:A:VAL:HG23	1:135:A:HIS:H	13	0.67
(1,274)	1:79:A:GLU:H	1:79:A:GLU:HB2	1	0.67
(1,1027)	1:117:A:LEU:HB2	1:120:A:ALA:HB1	12	0.66
(1,1027)	1:117:A:LEU:HB2	1:120:A:ALA:HB2	12	0.66
(1,1027)	1:117:A:LEU:HB2	1:120:A:ALA:HB3	12	0.66
(1,1027)	1:117:A:LEU:HB3	1:120:A:ALA:HB1	12	0.66
(1,1027)	1:117:A:LEU:HB3	1:120:A:ALA:HB2	12	0.66
(1,1027)	1:117:A:LEU:HB3	1:120:A:ALA:HB3	12	0.66
(1,635)	1:109:A:PRO:HA	1:113:A:ALA:H	9	0.66
(1,563)	1:68:A:ASN:HA	1:70:A:TRP:H	7	0.66
(1,274)	1:79:A:GLU:H	1:79:A:GLU:HB2	8	0.66
(1,656)	1:112:A:ARG:HB2	1:114:A:ASP:H	8	0.65
(1,635)	1:109:A:PRO:HA	1:113:A:ALA:H	10	0.65
(1,274)	1:79:A:GLU:H	1:79:A:GLU:HB2	2	0.65
(1,274)	1:79:A:GLU:H	1:79:A:GLU:HB2	13	0.65
(1,274)	1:79:A:GLU:H	1:79:A:GLU:HB2	15	0.65
(1,908)	1:35:A:LEU:HD11	1:163:A:GLN:HA	5	0.64

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,908)	1:35:A:LEU:HD12	1:163:A:GLN:HA	5	0.64
(1,908)	1:35:A:LEU:HD13	1:163:A:GLN:HA	5	0.64
(1,908)	1:35:A:LEU:HD21	1:163:A:GLN:HA	5	0.64
(1,908)	1:35:A:LEU:HD22	1:163:A:GLN:HA	5	0.64
(1,908)	1:35:A:LEU:HD23	1:163:A:GLN:HA	5	0.64
(1,897)	1:28:A:VAL:HG11	1:68:A:ASN:HB2	10	0.64
(1,897)	1:28:A:VAL:HG11	1:68:A:ASN:HB3	10	0.64
(1,897)	1:28:A:VAL:HG12	1:68:A:ASN:HB2	10	0.64
(1,897)	1:28:A:VAL:HG12	1:68:A:ASN:HB3	10	0.64
(1,897)	1:28:A:VAL:HG13	1:68:A:ASN:HB2	10	0.64
(1,897)	1:28:A:VAL:HG13	1:68:A:ASN:HB3	10	0.64
(1,897)	1:28:A:VAL:HG21	1:68:A:ASN:HB2	10	0.64
(1,897)	1:28:A:VAL:HG21	1:68:A:ASN:HB3	10	0.64
(1,897)	1:28:A:VAL:HG22	1:68:A:ASN:HB2	10	0.64
(1,897)	1:28:A:VAL:HG22	1:68:A:ASN:HB3	10	0.64
(1,897)	1:28:A:VAL:HG23	1:68:A:ASN:HB2	10	0.64
(1,897)	1:28:A:VAL:HG23	1:68:A:ASN:HB3	10	0.64
(1,396)	1:134:A:HIS:HB2	1:135:A:HIS:H	14	0.64
(1,16)	1:49:A:GLY:HA3	1:162:A:TYR:HE1	13	0.64
(1,16)	1:49:A:GLY:HA3	1:162:A:TYR:HE2	13	0.64
(1,16)	1:49:A:GLY:HA3	1:162:A:TYR:HE1	16	0.64
(1,16)	1:49:A:GLY:HA3	1:162:A:TYR:HE2	16	0.64
(1,1051)	1:136:A:ILE:HG12	1:148:A:ILE:HD11	3	0.63
(1,1051)	1:136:A:ILE:HG12	1:148:A:ILE:HD12	3	0.63
(1,1051)	1:136:A:ILE:HG12	1:148:A:ILE:HD13	3	0.63
(1,1051)	1:136:A:ILE:HG13	1:148:A:ILE:HD11	3	0.63
(1,1051)	1:136:A:ILE:HG13	1:148:A:ILE:HD12	3	0.63
(1,1051)	1:136:A:ILE:HG13	1:148:A:ILE:HD13	3	0.63
(1,826)	1:4:A:ILE:HG21	1:83:A:THR:H	9	0.63
(1,826)	1:4:A:ILE:HG22	1:83:A:THR:H	9	0.63
(1,826)	1:4:A:ILE:HG23	1:83:A:THR:H	9	0.63
(1,562)	1:69:A:ARG:H	1:70:A:TRP:H	19	0.63
(1,345)	1:109:A:PRO:HB2	1:110:A:LEU:H	8	0.63
(1,200)	1:39:A:LYS:HB2	1:40:A:GLY:H	14	0.63
(1,200)	1:39:A:LYS:HB2	1:40:A:GLY:H	16	0.63
(1,167)	1:23:A:LEU:HB3	1:24:A:ASN:H	20	0.63
(1,1008)	1:106:A:PRO:HB2	1:108:A:LYS:H	8	0.62
(1,1008)	1:106:A:PRO:HB3	1:108:A:LYS:H	8	0.62
(1,985)	1:95:A:TRP:HB2	1:152:A:TRP:HD1	13	0.62
(1,985)	1:95:A:TRP:HB3	1:152:A:TRP:HD1	13	0.62
(1,751)	1:109:A:PRO:HD3	1:110:A:LEU:H	7	0.62
(1,635)	1:109:A:PRO:HA	1:113:A:ALA:H	12	0.62

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,396)	1:134:A:HIS:HB2	1:135:A:HIS:H	13	0.62
(1,345)	1:109:A:PRO:HB2	1:110:A:LEU:H	2	0.62
(1,259)	1:72:A:LYS:H	1:72:A:LYS:HB2	9	0.62
(1,200)	1:39:A:LYS:HB2	1:40:A:GLY:H	1	0.62
(1,167)	1:23:A:LEU:HB3	1:24:A:ASN:H	17	0.62
(2,11)	1:71:A:PHE:HE1	1:165:A:ILE:HD11	1	0.61
(2,11)	1:71:A:PHE:HE1	1:165:A:ILE:HD12	1	0.61
(2,11)	1:71:A:PHE:HE1	1:165:A:ILE:HD13	1	0.61
(2,11)	1:71:A:PHE:HE2	1:165:A:ILE:HD11	1	0.61
(2,11)	1:71:A:PHE:HE2	1:165:A:ILE:HD12	1	0.61
(2,11)	1:71:A:PHE:HE2	1:165:A:ILE:HD13	1	0.61
(1,1005)	1:104:A:TRP:HH2	1:110:A:LEU:HD11	4	0.61
(1,1005)	1:104:A:TRP:HH2	1:110:A:LEU:HD12	4	0.61
(1,1005)	1:104:A:TRP:HH2	1:110:A:LEU:HD13	4	0.61
(1,1005)	1:104:A:TRP:HH2	1:110:A:LEU:HD21	4	0.61
(1,1005)	1:104:A:TRP:HH2	1:110:A:LEU:HD22	4	0.61
(1,1005)	1:104:A:TRP:HH2	1:110:A:LEU:HD23	4	0.61
(1,548)	1:26:A:GLY:H	1:27:A:SER:H	17	0.61
(1,1008)	1:106:A:PRO:HB2	1:108:A:LYS:H	9	0.6
(1,1008)	1:106:A:PRO:HB3	1:108:A:LYS:H	9	0.6
(1,562)	1:69:A:ARG:H	1:70:A:TRP:H	6	0.6
(1,1008)	1:106:A:PRO:HB2	1:108:A:LYS:H	13	0.59
(1,1008)	1:106:A:PRO:HB3	1:108:A:LYS:H	13	0.59
(1,983)	1:95:A:TRP:H	1:122:A:PRO:HB2	18	0.59
(1,983)	1:95:A:TRP:H	1:122:A:PRO:HB3	18	0.59
(1,656)	1:112:A:ARG:HB2	1:114:A:ASP:H	11	0.59
(1,374)	1:124:A:ASP:HB2	1:125:A:GLY:H	9	0.59
(1,1051)	1:136:A:ILE:HG12	1:148:A:ILE:HD11	11	0.58
(1,1051)	1:136:A:ILE:HG12	1:148:A:ILE:HD12	11	0.58
(1,1051)	1:136:A:ILE:HG12	1:148:A:ILE:HD13	11	0.58
(1,1051)	1:136:A:ILE:HG13	1:148:A:ILE:HD11	11	0.58
(1,1051)	1:136:A:ILE:HG13	1:148:A:ILE:HD12	11	0.58
(1,1051)	1:136:A:ILE:HG13	1:148:A:ILE:HD13	11	0.58
(1,1008)	1:106:A:PRO:HB2	1:108:A:LYS:H	14	0.58
(1,1008)	1:106:A:PRO:HB3	1:108:A:LYS:H	14	0.58
(1,861)	1:7:A:PRO:HB2	1:73:A:HIS:HD2	8	0.58
(1,861)	1:7:A:PRO:HB3	1:73:A:HIS:HD2	8	0.58
(1,675)	1:57:A:LEU:HB2	1:58:A:PHE:H	2	0.58
(1,562)	1:69:A:ARG:H	1:70:A:TRP:H	17	0.58
(1,751)	1:109:A:PRO:HD3	1:110:A:LEU:H	8	0.57
(1,563)	1:68:A:ASN:HA	1:70:A:TRP:H	12	0.57
(1,562)	1:69:A:ARG:H	1:70:A:TRP:H	7	0.57

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,200)	1:39:A:LYS:HB2	1:40:A:GLY:H	6	0.57
(2,100)	1:121:A:VAL:HG11	1:135:A:HIS:H	9	0.56
(2,100)	1:121:A:VAL:HG12	1:135:A:HIS:H	9	0.56
(2,100)	1:121:A:VAL:HG13	1:135:A:HIS:H	9	0.56
(2,100)	1:121:A:VAL:HG21	1:135:A:HIS:H	9	0.56
(2,100)	1:121:A:VAL:HG22	1:135:A:HIS:H	9	0.56
(2,100)	1:121:A:VAL:HG23	1:135:A:HIS:H	9	0.56
(1,1008)	1:106:A:PRO:HB2	1:108:A:LYS:H	5	0.56
(1,1008)	1:106:A:PRO:HB3	1:108:A:LYS:H	5	0.56
(1,1008)	1:106:A:PRO:HB2	1:108:A:LYS:H	15	0.56
(1,1008)	1:106:A:PRO:HB3	1:108:A:LYS:H	15	0.56
(1,1008)	1:106:A:PRO:HB2	1:108:A:LYS:H	16	0.56
(1,1008)	1:106:A:PRO:HB3	1:108:A:LYS:H	16	0.56
(1,751)	1:109:A:PRO:HD3	1:110:A:LEU:H	6	0.56
(1,562)	1:69:A:ARG:H	1:70:A:TRP:H	1	0.56
(1,562)	1:69:A:ARG:H	1:70:A:TRP:H	16	0.56
(2,100)	1:121:A:VAL:HG11	1:135:A:HIS:H	10	0.55
(2,100)	1:121:A:VAL:HG12	1:135:A:HIS:H	10	0.55
(2,100)	1:121:A:VAL:HG13	1:135:A:HIS:H	10	0.55
(2,100)	1:121:A:VAL:HG21	1:135:A:HIS:H	10	0.55
(2,100)	1:121:A:VAL:HG22	1:135:A:HIS:H	10	0.55
(2,100)	1:121:A:VAL:HG23	1:135:A:HIS:H	10	0.55
(1,1008)	1:106:A:PRO:HB2	1:108:A:LYS:H	6	0.55
(1,1008)	1:106:A:PRO:HB3	1:108:A:LYS:H	6	0.55
(1,947)	1:70:A:TRP:HD1	1:164:A:VAL:HG11	13	0.54
(1,947)	1:70:A:TRP:HD1	1:164:A:VAL:HG12	13	0.54
(1,947)	1:70:A:TRP:HD1	1:164:A:VAL:HG13	13	0.54
(1,947)	1:70:A:TRP:HD1	1:164:A:VAL:HG21	13	0.54
(1,947)	1:70:A:TRP:HD1	1:164:A:VAL:HG22	13	0.54
(1,947)	1:70:A:TRP:HD1	1:164:A:VAL:HG23	13	0.54
(1,897)	1:28:A:VAL:HG11	1:68:A:ASN:HB2	14	0.54
(1,897)	1:28:A:VAL:HG11	1:68:A:ASN:HB3	14	0.54
(1,897)	1:28:A:VAL:HG12	1:68:A:ASN:HB2	14	0.54
(1,897)	1:28:A:VAL:HG12	1:68:A:ASN:HB3	14	0.54
(1,897)	1:28:A:VAL:HG13	1:68:A:ASN:HB2	14	0.54
(1,897)	1:28:A:VAL:HG13	1:68:A:ASN:HB3	14	0.54
(1,897)	1:28:A:VAL:HG21	1:68:A:ASN:HB2	14	0.54
(1,897)	1:28:A:VAL:HG21	1:68:A:ASN:HB3	14	0.54
(1,897)	1:28:A:VAL:HG22	1:68:A:ASN:HB2	14	0.54
(1,897)	1:28:A:VAL:HG22	1:68:A:ASN:HB3	14	0.54
(1,897)	1:28:A:VAL:HG23	1:68:A:ASN:HB2	14	0.54
(1,897)	1:28:A:VAL:HG23	1:68:A:ASN:HB3	14	0.54

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,635)	1:109:A:PRO:HA	1:113:A:ALA:H	1	0.54
(1,200)	1:39:A:LYS:HB2	1:40:A:GLY:H	9	0.54
(1,1008)	1:106:A:PRO:HB2	1:108:A:LYS:H	19	0.53
(1,1008)	1:106:A:PRO:HB3	1:108:A:LYS:H	19	0.53
(1,1008)	1:106:A:PRO:HB2	1:108:A:LYS:H	20	0.53
(1,1008)	1:106:A:PRO:HB3	1:108:A:LYS:H	20	0.53
(1,986)	1:95:A:TRP:HD1	1:132:A:LEU:HD11	9	0.53
(1,986)	1:95:A:TRP:HD1	1:132:A:LEU:HD12	9	0.53
(1,986)	1:95:A:TRP:HD1	1:132:A:LEU:HD13	9	0.53
(1,986)	1:95:A:TRP:HD1	1:132:A:LEU:HD21	9	0.53
(1,986)	1:95:A:TRP:HD1	1:132:A:LEU:HD22	9	0.53
(1,986)	1:95:A:TRP:HD1	1:132:A:LEU:HD23	9	0.53
(1,751)	1:109:A:PRO:HD3	1:110:A:LEU:H	9	0.53
(1,751)	1:109:A:PRO:HD3	1:110:A:LEU:H	18	0.53
(1,1032)	1:121:A:VAL:HG11	1:134:A:HIS:HB2	18	0.52
(1,1032)	1:121:A:VAL:HG12	1:134:A:HIS:HB2	18	0.52
(1,1032)	1:121:A:VAL:HG13	1:134:A:HIS:HB2	18	0.52
(1,1032)	1:121:A:VAL:HG21	1:134:A:HIS:HB2	18	0.52
(1,1032)	1:121:A:VAL:HG22	1:134:A:HIS:HB2	18	0.52
(1,1032)	1:121:A:VAL:HG23	1:134:A:HIS:HB2	18	0.52
(1,985)	1:95:A:TRP:HB2	1:152:A:TRP:HD1	3	0.52
(1,985)	1:95:A:TRP:HB3	1:152:A:TRP:HD1	3	0.52
(1,920)	1:47:A:ALA:HB1	1:56:A:GLY:HA2	11	0.52
(1,920)	1:47:A:ALA:HB1	1:56:A:GLY:HA3	11	0.52
(1,920)	1:47:A:ALA:HB2	1:56:A:GLY:HA2	11	0.52
(1,920)	1:47:A:ALA:HB2	1:56:A:GLY:HA3	11	0.52
(1,920)	1:47:A:ALA:HB3	1:56:A:GLY:HA2	11	0.52
(1,920)	1:47:A:ALA:HB3	1:56:A:GLY:HA3	11	0.52
(1,751)	1:109:A:PRO:HD3	1:110:A:LEU:H	3	0.52
(1,562)	1:69:A:ARG:H	1:70:A:TRP:H	5	0.52
(1,562)	1:69:A:ARG:H	1:70:A:TRP:H	8	0.52
(1,562)	1:69:A:ARG:H	1:70:A:TRP:H	10	0.52
(1,562)	1:69:A:ARG:H	1:70:A:TRP:H	15	0.52
(1,256)	1:69:A:ARG:HB3	1:70:A:TRP:H	19	0.52
(1,16)	1:49:A:GLY:HA3	1:162:A:TYR:HE1	11	0.52
(1,16)	1:49:A:GLY:HA3	1:162:A:TYR:HE2	11	0.52
(1,986)	1:95:A:TRP:HD1	1:132:A:LEU:HD11	15	0.51
(1,986)	1:95:A:TRP:HD1	1:132:A:LEU:HD12	15	0.51
(1,986)	1:95:A:TRP:HD1	1:132:A:LEU:HD13	15	0.51
(1,986)	1:95:A:TRP:HD1	1:132:A:LEU:HD21	15	0.51
(1,986)	1:95:A:TRP:HD1	1:132:A:LEU:HD22	15	0.51
(1,986)	1:95:A:TRP:HD1	1:132:A:LEU:HD23	15	0.51

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1027)	1:117:A:LEU:HB2	1:120:A:ALA:HB1	5	0.5
(1,1027)	1:117:A:LEU:HB2	1:120:A:ALA:HB2	5	0.5
(1,1027)	1:117:A:LEU:HB2	1:120:A:ALA:HB3	5	0.5
(1,1027)	1:117:A:LEU:HB3	1:120:A:ALA:HB1	5	0.5
(1,1027)	1:117:A:LEU:HB3	1:120:A:ALA:HB2	5	0.5
(1,1027)	1:117:A:LEU:HB3	1:120:A:ALA:HB3	5	0.5
(1,751)	1:109:A:PRO:HD3	1:110:A:LEU:H	12	0.5
(1,751)	1:109:A:PRO:HD3	1:110:A:LEU:H	19	0.5
(1,751)	1:109:A:PRO:HD3	1:110:A:LEU:H	20	0.5
(1,374)	1:124:A:ASP:HB2	1:125:A:GLY:H	4	0.5
(1,345)	1:109:A:PRO:HB2	1:110:A:LEU:H	11	0.5
(1,256)	1:69:A:ARG:HB3	1:70:A:TRP:H	3	0.5
(1,167)	1:23:A:LEU:HB3	1:24:A:ASN:H	1	0.5
(1,1051)	1:136:A:ILE:HG12	1:148:A:ILE:HD11	16	0.49
(1,1051)	1:136:A:ILE:HG12	1:148:A:ILE:HD12	16	0.49
(1,1051)	1:136:A:ILE:HG12	1:148:A:ILE:HD13	16	0.49
(1,1051)	1:136:A:ILE:HG13	1:148:A:ILE:HD11	16	0.49
(1,1051)	1:136:A:ILE:HG13	1:148:A:ILE:HD12	16	0.49
(1,1051)	1:136:A:ILE:HG13	1:148:A:ILE:HD13	16	0.49
(1,1027)	1:117:A:LEU:HB2	1:120:A:ALA:HB1	4	0.49
(1,1027)	1:117:A:LEU:HB2	1:120:A:ALA:HB2	4	0.49
(1,1027)	1:117:A:LEU:HB2	1:120:A:ALA:HB3	4	0.49
(1,1027)	1:117:A:LEU:HB3	1:120:A:ALA:HB1	4	0.49
(1,1027)	1:117:A:LEU:HB3	1:120:A:ALA:HB2	4	0.49
(1,1027)	1:117:A:LEU:HB3	1:120:A:ALA:HB3	4	0.49
(1,911)	1:41:A:PHE:HD1	1:43:A:HIS:HB2	15	0.49
(1,911)	1:41:A:PHE:HD1	1:43:A:HIS:HB3	15	0.49
(1,911)	1:41:A:PHE:HD2	1:43:A:HIS:HB2	15	0.49
(1,911)	1:41:A:PHE:HD2	1:43:A:HIS:HB3	15	0.49
(1,882)	1:18:A:PHE:HB2	1:20:A:PHE:H	7	0.49
(1,882)	1:18:A:PHE:HB3	1:20:A:PHE:H	7	0.49
(1,676)	1:57:A:LEU:HB2	1:59:A:GLY:H	13	0.49
(1,562)	1:69:A:ARG:H	1:70:A:TRP:H	2	0.49
(1,562)	1:69:A:ARG:H	1:70:A:TRP:H	9	0.49
(1,327)	1:102:A:LYS:H	1:102:A:LYS:HB2	20	0.49
(1,256)	1:69:A:ARG:HB3	1:70:A:TRP:H	6	0.49
(1,256)	1:69:A:ARG:HB3	1:70:A:TRP:H	10	0.49
(1,256)	1:69:A:ARG:HB3	1:70:A:TRP:H	12	0.49
(1,983)	1:95:A:TRP:H	1:122:A:PRO:HB2	7	0.48
(1,983)	1:95:A:TRP:H	1:122:A:PRO:HB3	7	0.48
(1,675)	1:57:A:LEU:HB2	1:58:A:PHE:H	15	0.48
(1,562)	1:69:A:ARG:H	1:70:A:TRP:H	11	0.48

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,374)	1:124:A:ASP:HB2	1:125:A:GLY:H	7	0.48
(1,167)	1:23:A:LEU:HB3	1:24:A:ASN:H	3	0.48
(1,167)	1:23:A:LEU:HB3	1:24:A:ASN:H	12	0.48
(1,1032)	1:121:A:VAL:HG11	1:134:A:HIS:HB2	4	0.47
(1,1032)	1:121:A:VAL:HG12	1:134:A:HIS:HB2	4	0.47
(1,1032)	1:121:A:VAL:HG13	1:134:A:HIS:HB2	4	0.47
(1,1032)	1:121:A:VAL:HG21	1:134:A:HIS:HB2	4	0.47
(1,1032)	1:121:A:VAL:HG22	1:134:A:HIS:HB2	4	0.47
(1,1032)	1:121:A:VAL:HG23	1:134:A:HIS:HB2	4	0.47
(1,1027)	1:117:A:LEU:HB2	1:120:A:ALA:HB1	17	0.47
(1,1027)	1:117:A:LEU:HB2	1:120:A:ALA:HB2	17	0.47
(1,1027)	1:117:A:LEU:HB2	1:120:A:ALA:HB3	17	0.47
(1,1027)	1:117:A:LEU:HB3	1:120:A:ALA:HB1	17	0.47
(1,1027)	1:117:A:LEU:HB3	1:120:A:ALA:HB2	17	0.47
(1,1027)	1:117:A:LEU:HB3	1:120:A:ALA:HB3	17	0.47
(1,1008)	1:106:A:PRO:HB2	1:108:A:LYS:H	7	0.47
(1,1008)	1:106:A:PRO:HB3	1:108:A:LYS:H	7	0.47
(1,1008)	1:106:A:PRO:HB2	1:108:A:LYS:H	10	0.47
(1,1008)	1:106:A:PRO:HB3	1:108:A:LYS:H	10	0.47
(1,920)	1:47:A:ALA:HB1	1:56:A:GLY:HA2	8	0.47
(1,920)	1:47:A:ALA:HB1	1:56:A:GLY:HA3	8	0.47
(1,920)	1:47:A:ALA:HB2	1:56:A:GLY:HA2	8	0.47
(1,920)	1:47:A:ALA:HB2	1:56:A:GLY:HA3	8	0.47
(1,920)	1:47:A:ALA:HB3	1:56:A:GLY:HA2	8	0.47
(1,920)	1:47:A:ALA:HB3	1:56:A:GLY:HA3	8	0.47
(1,656)	1:112:A:ARG:HB2	1:114:A:ASP:H	9	0.47
(1,635)	1:109:A:PRO:HA	1:113:A:ALA:H	19	0.47
(1,256)	1:69:A:ARG:HB3	1:70:A:TRP:H	1	0.47
(1,256)	1:69:A:ARG:HB3	1:70:A:TRP:H	18	0.47
(1,1008)	1:106:A:PRO:HB2	1:108:A:LYS:H	4	0.46
(1,1008)	1:106:A:PRO:HB3	1:108:A:LYS:H	4	0.46
(1,1008)	1:106:A:PRO:HB2	1:108:A:LYS:H	11	0.46
(1,1008)	1:106:A:PRO:HB3	1:108:A:LYS:H	11	0.46
(1,751)	1:109:A:PRO:HD3	1:110:A:LEU:H	5	0.46
(1,256)	1:69:A:ARG:HB3	1:70:A:TRP:H	4	0.46
(1,256)	1:69:A:ARG:HB3	1:70:A:TRP:H	5	0.46
(1,256)	1:69:A:ARG:HB3	1:70:A:TRP:H	13	0.46
(2,13)	1:61:A:ILE:HD11	1:145:A:TYR:HE1	15	0.45
(2,13)	1:61:A:ILE:HD11	1:145:A:TYR:HE2	15	0.45
(2,13)	1:61:A:ILE:HD12	1:145:A:TYR:HE1	15	0.45
(2,13)	1:61:A:ILE:HD12	1:145:A:TYR:HE2	15	0.45
(2,13)	1:61:A:ILE:HD13	1:145:A:TYR:HE1	15	0.45

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,13)	1:61:A:ILE:HD13	1:145:A:TYR:HE2	15	0.45
(1,1008)	1:106:A:PRO:HB2	1:108:A:LYS:H	2	0.45
(1,1008)	1:106:A:PRO:HB3	1:108:A:LYS:H	2	0.45
(1,1008)	1:106:A:PRO:HB2	1:108:A:LYS:H	17	0.45
(1,1008)	1:106:A:PRO:HB3	1:108:A:LYS:H	17	0.45
(1,751)	1:109:A:PRO:HD3	1:110:A:LEU:H	14	0.45
(1,635)	1:109:A:PRO:HA	1:113:A:ALA:H	15	0.45
(1,562)	1:69:A:ARG:H	1:70:A:TRP:H	18	0.45
(1,7)	1:69:A:ARG:HB2	1:70:A:TRP:HD1	14	0.45
(1,985)	1:95:A:TRP:HB2	1:152:A:TRP:HD1	15	0.44
(1,985)	1:95:A:TRP:HB3	1:152:A:TRP:HD1	15	0.44
(1,858)	1:6:A:LYS:HB2	1:8:A:GLY:H	4	0.44
(1,858)	1:6:A:LYS:HB3	1:8:A:GLY:H	4	0.44
(1,846)	1:2:A:GLY:H	1:33:A:GLN:HG2	17	0.44
(1,846)	1:2:A:GLY:H	1:33:A:GLN:HG3	17	0.44
(1,751)	1:109:A:PRO:HD3	1:110:A:LEU:H	15	0.44
(1,656)	1:112:A:ARG:HB2	1:114:A:ASP:H	18	0.44
(1,635)	1:109:A:PRO:HA	1:113:A:ALA:H	16	0.44
(1,594)	1:66:A:SER:H	1:69:A:ARG:HB3	5	0.44
(1,256)	1:69:A:ARG:HB3	1:70:A:TRP:H	8	0.44
(1,200)	1:39:A:LYS:HB2	1:40:A:GLY:H	11	0.44
(1,81)	1:143:A:LEU:HA	1:170:A:VAL:HB	13	0.44
(2,14)	1:61:A:ILE:HD11	1:145:A:TYR:HD1	19	0.43
(2,14)	1:61:A:ILE:HD11	1:145:A:TYR:HD2	19	0.43
(2,14)	1:61:A:ILE:HD12	1:145:A:TYR:HD1	19	0.43
(2,14)	1:61:A:ILE:HD12	1:145:A:TYR:HD2	19	0.43
(2,14)	1:61:A:ILE:HD13	1:145:A:TYR:HD1	19	0.43
(2,14)	1:61:A:ILE:HD13	1:145:A:TYR:HD2	19	0.43
(1,927)	1:54:A:ALA:HB1	1:60:A:GLY:HA2	15	0.43
(1,927)	1:54:A:ALA:HB1	1:60:A:GLY:HA3	15	0.43
(1,927)	1:54:A:ALA:HB2	1:60:A:GLY:HA2	15	0.43
(1,927)	1:54:A:ALA:HB2	1:60:A:GLY:HA3	15	0.43
(1,927)	1:54:A:ALA:HB3	1:60:A:GLY:HA2	15	0.43
(1,927)	1:54:A:ALA:HB3	1:60:A:GLY:HA3	15	0.43
(1,920)	1:47:A:ALA:HB1	1:56:A:GLY:HA2	14	0.43
(1,920)	1:47:A:ALA:HB1	1:56:A:GLY:HA3	14	0.43
(1,920)	1:47:A:ALA:HB2	1:56:A:GLY:HA2	14	0.43
(1,920)	1:47:A:ALA:HB2	1:56:A:GLY:HA3	14	0.43
(1,920)	1:47:A:ALA:HB3	1:56:A:GLY:HA2	14	0.43
(1,920)	1:47:A:ALA:HB3	1:56:A:GLY:HA3	14	0.43
(1,751)	1:109:A:PRO:HD3	1:110:A:LEU:H	1	0.43
(1,562)	1:69:A:ARG:H	1:70:A:TRP:H	20	0.43

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,256)	1:69:A:ARG:HB3	1:70:A:TRP:H	11	0.43
(1,256)	1:69:A:ARG:HB3	1:70:A:TRP:H	14	0.43
(1,167)	1:23:A:LEU:HB3	1:24:A:ASN:H	7	0.43
(1,117)	1:4:A:ILE:HG21	1:84:A:TRP:HA	9	0.43
(1,117)	1:4:A:ILE:HG22	1:84:A:TRP:HA	9	0.43
(1,117)	1:4:A:ILE:HG23	1:84:A:TRP:HA	9	0.43
(1,16)	1:49:A:GLY:HA3	1:162:A:TYR:HE1	17	0.43
(1,16)	1:49:A:GLY:HA3	1:162:A:TYR:HE2	17	0.43
(1,1033)	1:121:A:VAL:HG11	1:134:A:HIS:HD2	16	0.42
(1,1033)	1:121:A:VAL:HG12	1:134:A:HIS:HD2	16	0.42
(1,1033)	1:121:A:VAL:HG13	1:134:A:HIS:HD2	16	0.42
(1,1033)	1:121:A:VAL:HG21	1:134:A:HIS:HD2	16	0.42
(1,1033)	1:121:A:VAL:HG22	1:134:A:HIS:HD2	16	0.42
(1,1033)	1:121:A:VAL:HG23	1:134:A:HIS:HD2	16	0.42
(1,983)	1:95:A:TRP:H	1:122:A:PRO:HB2	14	0.42
(1,983)	1:95:A:TRP:H	1:122:A:PRO:HB3	14	0.42
(1,675)	1:57:A:LEU:HB2	1:58:A:PHE:H	19	0.42
(1,200)	1:39:A:LYS:HB2	1:40:A:GLY:H	12	0.42
(1,200)	1:39:A:LYS:HB2	1:40:A:GLY:H	17	0.42
(2,100)	1:121:A:VAL:HG11	1:135:A:HIS:H	3	0.41
(2,100)	1:121:A:VAL:HG12	1:135:A:HIS:H	3	0.41
(2,100)	1:121:A:VAL:HG13	1:135:A:HIS:H	3	0.41
(2,100)	1:121:A:VAL:HG21	1:135:A:HIS:H	3	0.41
(2,100)	1:121:A:VAL:HG22	1:135:A:HIS:H	3	0.41
(2,100)	1:121:A:VAL:HG23	1:135:A:HIS:H	3	0.41
(1,1027)	1:117:A:LEU:HB2	1:120:A:ALA:HB1	13	0.41
(1,1027)	1:117:A:LEU:HB2	1:120:A:ALA:HB2	13	0.41
(1,1027)	1:117:A:LEU:HB2	1:120:A:ALA:HB3	13	0.41
(1,1027)	1:117:A:LEU:HB3	1:120:A:ALA:HB1	13	0.41
(1,1027)	1:117:A:LEU:HB3	1:120:A:ALA:HB2	13	0.41
(1,1027)	1:117:A:LEU:HB3	1:120:A:ALA:HB3	13	0.41
(1,1004)	1:104:A:TRP:HZ2	1:110:A:LEU:HD11	13	0.41
(1,1004)	1:104:A:TRP:HZ2	1:110:A:LEU:HD12	13	0.41
(1,1004)	1:104:A:TRP:HZ2	1:110:A:LEU:HD13	13	0.41
(1,1004)	1:104:A:TRP:HZ2	1:110:A:LEU:HD21	13	0.41
(1,1004)	1:104:A:TRP:HZ2	1:110:A:LEU:HD22	13	0.41
(1,1004)	1:104:A:TRP:HZ2	1:110:A:LEU:HD23	13	0.41
(1,983)	1:95:A:TRP:H	1:122:A:PRO:HB2	20	0.41
(1,983)	1:95:A:TRP:H	1:122:A:PRO:HB3	20	0.41
(1,872)	1:13:A:LEU:HB2	1:73:A:HIS:HE1	1	0.41
(1,872)	1:13:A:LEU:HB3	1:73:A:HIS:HE1	1	0.41
(1,751)	1:109:A:PRO:HD3	1:110:A:LEU:H	17	0.41

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,563)	1:68:A:ASN:HA	1:70:A:TRP:H	15	0.41
(1,256)	1:69:A:ARG:HB3	1:70:A:TRP:H	20	0.41
(1,21)	1:81:A:THR:HG21	1:135:A:HIS:HE1	12	0.41
(1,21)	1:81:A:THR:HG22	1:135:A:HIS:HE1	12	0.41
(1,21)	1:81:A:THR:HG23	1:135:A:HIS:HE1	12	0.41
(1,16)	1:49:A:GLY:HA3	1:162:A:TYR:HE1	4	0.41
(1,16)	1:49:A:GLY:HA3	1:162:A:TYR:HE2	4	0.41
(1,7)	1:69:A:ARG:HB2	1:70:A:TRP:HD1	9	0.41
(1,562)	1:69:A:ARG:H	1:70:A:TRP:H	4	0.4
(1,345)	1:109:A:PRO:HB2	1:110:A:LEU:H	13	0.4
(1,327)	1:102:A:LYS:H	1:102:A:LYS:HB2	12	0.4
(1,256)	1:69:A:ARG:HB3	1:70:A:TRP:H	15	0.4
(1,256)	1:69:A:ARG:HB3	1:70:A:TRP:H	16	0.4
(1,957)	1:75:A:MET:HB2	1:80:A:HIS:HE1	20	0.39
(1,957)	1:75:A:MET:HB3	1:80:A:HIS:HE1	20	0.39
(1,911)	1:41:A:PHE:HD1	1:43:A:HIS:HB2	8	0.39
(1,911)	1:41:A:PHE:HD1	1:43:A:HIS:HB3	8	0.39
(1,911)	1:41:A:PHE:HD2	1:43:A:HIS:HB2	8	0.39
(1,911)	1:41:A:PHE:HD2	1:43:A:HIS:HB3	8	0.39
(1,751)	1:109:A:PRO:HD3	1:110:A:LEU:H	2	0.39
(1,256)	1:69:A:ARG:HB3	1:70:A:TRP:H	17	0.39
(2,81)	1:33:A:GLN:HG2	1:86:A:TYR:HE1	9	0.38
(2,81)	1:33:A:GLN:HG2	1:86:A:TYR:HE2	9	0.38
(2,81)	1:33:A:GLN:HG3	1:86:A:TYR:HE1	9	0.38
(2,81)	1:33:A:GLN:HG3	1:86:A:TYR:HE2	9	0.38
(1,1032)	1:121:A:VAL:HG11	1:134:A:HIS:HB2	15	0.38
(1,1032)	1:121:A:VAL:HG12	1:134:A:HIS:HB2	15	0.38
(1,1032)	1:121:A:VAL:HG13	1:134:A:HIS:HB2	15	0.38
(1,1032)	1:121:A:VAL:HG21	1:134:A:HIS:HB2	15	0.38
(1,1032)	1:121:A:VAL:HG22	1:134:A:HIS:HB2	15	0.38
(1,1032)	1:121:A:VAL:HG23	1:134:A:HIS:HB2	15	0.38
(1,983)	1:95:A:TRP:H	1:122:A:PRO:HB2	2	0.38
(1,983)	1:95:A:TRP:H	1:122:A:PRO:HB3	2	0.38
(1,983)	1:95:A:TRP:H	1:122:A:PRO:HB2	11	0.38
(1,983)	1:95:A:TRP:H	1:122:A:PRO:HB3	11	0.38
(1,656)	1:112:A:ARG:HB2	1:114:A:ASP:H	1	0.38
(1,656)	1:112:A:ARG:HB2	1:114:A:ASP:H	12	0.38
(1,308)	1:96:A:HIS:H	1:96:A:HIS:HB3	11	0.38
(1,206)	1:48:A:ASP:H	1:48:A:ASP:HB3	17	0.38
(1,7)	1:69:A:ARG:HB2	1:70:A:TRP:HD1	5	0.38
(1,1011)	1:109:A:PRO:HG2	1:110:A:LEU:H	10	0.37
(1,1011)	1:109:A:PRO:HG3	1:110:A:LEU:H	10	0.37

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1008)	1:106:A:PRO:HB2	1:108:A:LYS:H	3	0.37
(1,1008)	1:106:A:PRO:HB3	1:108:A:LYS:H	3	0.37
(1,990)	1:96:A:HIS:HE1	1:151:A:VAL:HG11	20	0.37
(1,990)	1:96:A:HIS:HE1	1:151:A:VAL:HG12	20	0.37
(1,990)	1:96:A:HIS:HE1	1:151:A:VAL:HG13	20	0.37
(1,990)	1:96:A:HIS:HE1	1:151:A:VAL:HG21	20	0.37
(1,990)	1:96:A:HIS:HE1	1:151:A:VAL:HG22	20	0.37
(1,990)	1:96:A:HIS:HE1	1:151:A:VAL:HG23	20	0.37
(1,987)	1:95:A:TRP:HZ3	1:132:A:LEU:HD11	11	0.37
(1,987)	1:95:A:TRP:HZ3	1:132:A:LEU:HD12	11	0.37
(1,987)	1:95:A:TRP:HZ3	1:132:A:LEU:HD13	11	0.37
(1,987)	1:95:A:TRP:HZ3	1:132:A:LEU:HD21	11	0.37
(1,987)	1:95:A:TRP:HZ3	1:132:A:LEU:HD22	11	0.37
(1,987)	1:95:A:TRP:HZ3	1:132:A:LEU:HD23	11	0.37
(1,985)	1:95:A:TRP:HB2	1:152:A:TRP:HD1	11	0.37
(1,985)	1:95:A:TRP:HB3	1:152:A:TRP:HD1	11	0.37
(1,983)	1:95:A:TRP:H	1:122:A:PRO:HB2	16	0.37
(1,983)	1:95:A:TRP:H	1:122:A:PRO:HB3	16	0.37
(1,890)	1:22:A:ASN:HB2	1:23:A:LEU:H	5	0.37
(1,890)	1:22:A:ASN:HB3	1:23:A:LEU:H	5	0.37
(1,506)	1:48:A:ASP:HA	1:51:A:ILE:H	8	0.37
(1,440)	1:154:A:VAL:H	1:154:A:VAL:HB	14	0.37
(1,345)	1:109:A:PRO:HB2	1:110:A:LEU:H	3	0.37
(1,256)	1:69:A:ARG:HB3	1:70:A:TRP:H	9	0.37
(1,200)	1:39:A:LYS:HB2	1:40:A:GLY:H	2	0.37
(2,69)	1:143:A:LEU:HD21	1:172:A:LYS:H	8	0.36
(2,69)	1:143:A:LEU:HD22	1:172:A:LYS:H	8	0.36
(2,69)	1:143:A:LEU:HD23	1:172:A:LYS:H	8	0.36
(1,1027)	1:117:A:LEU:HB2	1:120:A:ALA:HB1	2	0.36
(1,1027)	1:117:A:LEU:HB2	1:120:A:ALA:HB2	2	0.36
(1,1027)	1:117:A:LEU:HB2	1:120:A:ALA:HB3	2	0.36
(1,1027)	1:117:A:LEU:HB3	1:120:A:ALA:HB1	2	0.36
(1,1027)	1:117:A:LEU:HB3	1:120:A:ALA:HB2	2	0.36
(1,1027)	1:117:A:LEU:HB3	1:120:A:ALA:HB3	2	0.36
(1,1027)	1:117:A:LEU:HB2	1:120:A:ALA:HB1	11	0.36
(1,1027)	1:117:A:LEU:HB2	1:120:A:ALA:HB2	11	0.36
(1,1027)	1:117:A:LEU:HB2	1:120:A:ALA:HB3	11	0.36
(1,1027)	1:117:A:LEU:HB3	1:120:A:ALA:HB1	11	0.36
(1,1027)	1:117:A:LEU:HB3	1:120:A:ALA:HB2	11	0.36
(1,1027)	1:117:A:LEU:HB3	1:120:A:ALA:HB3	11	0.36
(1,1008)	1:106:A:PRO:HB2	1:108:A:LYS:H	1	0.36
(1,1008)	1:106:A:PRO:HB3	1:108:A:LYS:H	1	0.36

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,990)	1:96:A:HIS:HE1	1:151:A:VAL:HG11	19	0.36
(1,990)	1:96:A:HIS:HE1	1:151:A:VAL:HG12	19	0.36
(1,990)	1:96:A:HIS:HE1	1:151:A:VAL:HG13	19	0.36
(1,990)	1:96:A:HIS:HE1	1:151:A:VAL:HG21	19	0.36
(1,990)	1:96:A:HIS:HE1	1:151:A:VAL:HG22	19	0.36
(1,990)	1:96:A:HIS:HE1	1:151:A:VAL:HG23	19	0.36
(1,986)	1:95:A:TRP:HD1	1:132:A:LEU:HD11	17	0.36
(1,986)	1:95:A:TRP:HD1	1:132:A:LEU:HD12	17	0.36
(1,986)	1:95:A:TRP:HD1	1:132:A:LEU:HD13	17	0.36
(1,986)	1:95:A:TRP:HD1	1:132:A:LEU:HD21	17	0.36
(1,986)	1:95:A:TRP:HD1	1:132:A:LEU:HD22	17	0.36
(1,986)	1:95:A:TRP:HD1	1:132:A:LEU:HD23	17	0.36
(1,948)	1:71:A:PHE:HE1	1:73:A:HIS:HB2	17	0.36
(1,948)	1:71:A:PHE:HE1	1:73:A:HIS:HB3	17	0.36
(1,948)	1:71:A:PHE:HE2	1:73:A:HIS:HB2	17	0.36
(1,948)	1:71:A:PHE:HE2	1:73:A:HIS:HB3	17	0.36
(1,878)	1:16:A:GLU:HB2	1:19:A:GLY:H	11	0.36
(1,878)	1:16:A:GLU:HB3	1:19:A:GLY:H	11	0.36
(1,874)	1:13:A:LEU:HD11	1:74:A:ILE:H	3	0.36
(1,874)	1:13:A:LEU:HD12	1:74:A:ILE:H	3	0.36
(1,874)	1:13:A:LEU:HD13	1:74:A:ILE:H	3	0.36
(1,874)	1:13:A:LEU:HD21	1:74:A:ILE:H	3	0.36
(1,874)	1:13:A:LEU:HD22	1:74:A:ILE:H	3	0.36
(1,874)	1:13:A:LEU:HD23	1:74:A:ILE:H	3	0.36
(1,676)	1:57:A:LEU:HB2	1:59:A:GLY:H	16	0.36
(1,635)	1:109:A:PRO:HA	1:113:A:ALA:H	4	0.36
(1,396)	1:134:A:HIS:HB2	1:135:A:HIS:H	2	0.36
(1,256)	1:69:A:ARG:HB3	1:70:A:TRP:H	7	0.36
(1,110)	1:93:A:SER:HB2	1:155:A:ALA:HB1	7	0.36
(1,110)	1:93:A:SER:HB2	1:155:A:ALA:HB2	7	0.36
(1,110)	1:93:A:SER:HB2	1:155:A:ALA:HB3	7	0.36
(1,17)	1:4:A:ILE:HD11	1:84:A:TRP:HD1	16	0.36
(1,17)	1:4:A:ILE:HD12	1:84:A:TRP:HD1	16	0.36
(1,17)	1:4:A:ILE:HD13	1:84:A:TRP:HD1	16	0.36
(1,11)	1:98:A:TYR:HD1	1:149:A:LEU:HG	13	0.36
(1,11)	1:98:A:TYR:HD2	1:149:A:LEU:HG	13	0.36
(2,100)	1:121:A:VAL:HG11	1:135:A:HIS:H	16	0.35
(2,100)	1:121:A:VAL:HG12	1:135:A:HIS:H	16	0.35
(2,100)	1:121:A:VAL:HG13	1:135:A:HIS:H	16	0.35
(2,100)	1:121:A:VAL:HG21	1:135:A:HIS:H	16	0.35
(2,100)	1:121:A:VAL:HG22	1:135:A:HIS:H	16	0.35
(2,100)	1:121:A:VAL:HG23	1:135:A:HIS:H	16	0.35

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1027)	1:117:A:LEU:HB2	1:120:A:ALA:HB1	6	0.35
(1,1027)	1:117:A:LEU:HB2	1:120:A:ALA:HB2	6	0.35
(1,1027)	1:117:A:LEU:HB2	1:120:A:ALA:HB3	6	0.35
(1,1027)	1:117:A:LEU:HB3	1:120:A:ALA:HB1	6	0.35
(1,1027)	1:117:A:LEU:HB3	1:120:A:ALA:HB2	6	0.35
(1,1027)	1:117:A:LEU:HB3	1:120:A:ALA:HB3	6	0.35
(1,1011)	1:109:A:PRO:HG2	1:110:A:LEU:H	18	0.35
(1,1011)	1:109:A:PRO:HG3	1:110:A:LEU:H	18	0.35
(1,910)	1:40:A:GLY:HA2	1:41:A:PHE:HD1	13	0.35
(1,910)	1:40:A:GLY:HA2	1:41:A:PHE:HD2	13	0.35
(1,910)	1:40:A:GLY:HA3	1:41:A:PHE:HD1	13	0.35
(1,910)	1:40:A:GLY:HA3	1:41:A:PHE:HD2	13	0.35
(1,882)	1:18:A:PHE:HB2	1:20:A:PHE:H	10	0.35
(1,882)	1:18:A:PHE:HB3	1:20:A:PHE:H	10	0.35
(1,563)	1:68:A:ASN:HA	1:70:A:TRP:H	6	0.35
(1,562)	1:69:A:ARG:H	1:70:A:TRP:H	14	0.35
(1,396)	1:134:A:HIS:HB2	1:135:A:HIS:H	18	0.35
(1,345)	1:109:A:PRO:HB2	1:110:A:LEU:H	5	0.35
(1,345)	1:109:A:PRO:HB2	1:110:A:LEU:H	9	0.35
(1,256)	1:69:A:ARG:HB3	1:70:A:TRP:H	2	0.35
(1,81)	1:143:A:LEU:HA	1:170:A:VAL:HB	7	0.35
(1,12)	1:3:A:PHE:HE1	1:87:A:THR:HB	20	0.35
(1,12)	1:3:A:PHE:HE2	1:87:A:THR:HB	20	0.35
(1,996)	1:99:A:ILE:H	1:115:A:PHE:HB2	17	0.34
(1,996)	1:99:A:ILE:H	1:115:A:PHE:HB3	17	0.34
(1,983)	1:95:A:TRP:H	1:122:A:PRO:HB2	10	0.34
(1,983)	1:95:A:TRP:H	1:122:A:PRO:HB3	10	0.34
(1,911)	1:41:A:PHE:HD1	1:43:A:HIS:HB2	17	0.34
(1,911)	1:41:A:PHE:HD1	1:43:A:HIS:HB3	17	0.34
(1,911)	1:41:A:PHE:HD2	1:43:A:HIS:HB2	17	0.34
(1,911)	1:41:A:PHE:HD2	1:43:A:HIS:HB3	17	0.34
(1,859)	1:6:A:LYS:HG2	1:8:A:GLY:H	15	0.34
(1,859)	1:6:A:LYS:HG3	1:8:A:GLY:H	15	0.34
(1,751)	1:109:A:PRO:HD3	1:110:A:LEU:H	16	0.34
(1,635)	1:109:A:PRO:HA	1:113:A:ALA:H	18	0.34
(2,14)	1:61:A:ILE:HD11	1:145:A:TYR:HD1	1	0.33
(2,14)	1:61:A:ILE:HD11	1:145:A:TYR:HD2	1	0.33
(2,14)	1:61:A:ILE:HD12	1:145:A:TYR:HD1	1	0.33
(2,14)	1:61:A:ILE:HD12	1:145:A:TYR:HD2	1	0.33
(2,14)	1:61:A:ILE:HD13	1:145:A:TYR:HD1	1	0.33
(2,14)	1:61:A:ILE:HD13	1:145:A:TYR:HD2	1	0.33
(1,1011)	1:109:A:PRO:HG2	1:110:A:LEU:H	5	0.33

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1011)	1:109:A:PRO:HG3	1:110:A:LEU:H	5	0.33
(1,1011)	1:109:A:PRO:HG2	1:110:A:LEU:H	7	0.33
(1,1011)	1:109:A:PRO:HG3	1:110:A:LEU:H	7	0.33
(1,987)	1:95:A:TRP:HZ3	1:132:A:LEU:HD11	7	0.33
(1,987)	1:95:A:TRP:HZ3	1:132:A:LEU:HD12	7	0.33
(1,987)	1:95:A:TRP:HZ3	1:132:A:LEU:HD13	7	0.33
(1,987)	1:95:A:TRP:HZ3	1:132:A:LEU:HD21	7	0.33
(1,987)	1:95:A:TRP:HZ3	1:132:A:LEU:HD22	7	0.33
(1,987)	1:95:A:TRP:HZ3	1:132:A:LEU:HD23	7	0.33
(1,983)	1:95:A:TRP:H	1:122:A:PRO:HB2	1	0.33
(1,983)	1:95:A:TRP:H	1:122:A:PRO:HB3	1	0.33
(1,983)	1:95:A:TRP:H	1:122:A:PRO:HB2	8	0.33
(1,983)	1:95:A:TRP:H	1:122:A:PRO:HB3	8	0.33
(1,930)	1:58:A:PHE:HZ	1:111:A:LYS:HE2	7	0.33
(1,930)	1:58:A:PHE:HZ	1:111:A:LYS:HE3	7	0.33
(1,676)	1:57:A:LEU:HB2	1:59:A:GLY:H	8	0.33
(1,635)	1:109:A:PRO:HA	1:113:A:ALA:H	6	0.33
(1,345)	1:109:A:PRO:HB2	1:110:A:LEU:H	7	0.33
(1,308)	1:96:A:HIS:H	1:96:A:HIS:HB3	16	0.33
(1,308)	1:96:A:HIS:H	1:96:A:HIS:HB3	18	0.33
(1,224)	1:57:A:LEU:HA	1:58:A:PHE:H	1	0.33
(1,206)	1:48:A:ASP:H	1:48:A:ASP:HB3	11	0.33
(1,206)	1:48:A:ASP:H	1:48:A:ASP:HB3	13	0.33
(1,200)	1:39:A:LYS:HB2	1:40:A:GLY:H	13	0.33
(1,81)	1:143:A:LEU:HA	1:170:A:VAL:HB	4	0.33
(2,69)	1:143:A:LEU:HD21	1:172:A:LYS:H	16	0.32
(2,69)	1:143:A:LEU:HD22	1:172:A:LYS:H	16	0.32
(2,69)	1:143:A:LEU:HD23	1:172:A:LYS:H	16	0.32
(1,1065)	1:145:A:TYR:HD1	1:168:A:ASP:HB2	4	0.32
(1,1065)	1:145:A:TYR:HD1	1:168:A:ASP:HB3	4	0.32
(1,1065)	1:145:A:TYR:HD2	1:168:A:ASP:HB2	4	0.32
(1,1065)	1:145:A:TYR:HD2	1:168:A:ASP:HB3	4	0.32
(1,1051)	1:136:A:ILE:HG12	1:148:A:ILE:HD11	14	0.32
(1,1051)	1:136:A:ILE:HG12	1:148:A:ILE:HD12	14	0.32
(1,1051)	1:136:A:ILE:HG12	1:148:A:ILE:HD13	14	0.32
(1,1051)	1:136:A:ILE:HG13	1:148:A:ILE:HD11	14	0.32
(1,1051)	1:136:A:ILE:HG13	1:148:A:ILE:HD12	14	0.32
(1,1051)	1:136:A:ILE:HG13	1:148:A:ILE:HD13	14	0.32
(1,1008)	1:106:A:PRO:HB2	1:108:A:LYS:H	18	0.32
(1,1008)	1:106:A:PRO:HB3	1:108:A:LYS:H	18	0.32
(1,983)	1:95:A:TRP:H	1:122:A:PRO:HB2	9	0.32
(1,983)	1:95:A:TRP:H	1:122:A:PRO:HB3	9	0.32

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,911)	1:41:A:PHE:HD1	1:43:A:HIS:HB2	6	0.32
(1,911)	1:41:A:PHE:HD1	1:43:A:HIS:HB3	6	0.32
(1,911)	1:41:A:PHE:HD2	1:43:A:HIS:HB2	6	0.32
(1,911)	1:41:A:PHE:HD2	1:43:A:HIS:HB3	6	0.32
(1,728)	1:134:A:HIS:HD2	1:135:A:HIS:H	3	0.32
(1,711)	1:23:A:LEU:HG	1:24:A:ASN:H	14	0.32
(1,675)	1:57:A:LEU:HB2	1:58:A:PHE:H	13	0.32
(1,656)	1:112:A:ARG:HB2	1:114:A:ASP:H	7	0.32
(1,656)	1:112:A:ARG:HB2	1:114:A:ASP:H	20	0.32
(1,635)	1:109:A:PRO:HA	1:113:A:ALA:H	2	0.32
(1,635)	1:109:A:PRO:HA	1:113:A:ALA:H	5	0.32
(1,22)	1:92:A:THR:HG21	1:123:A:HIS:HD2	8	0.32
(1,22)	1:92:A:THR:HG22	1:123:A:HIS:HD2	8	0.32
(1,22)	1:92:A:THR:HG23	1:123:A:HIS:HD2	8	0.32
(2,100)	1:121:A:VAL:HG11	1:135:A:HIS:H	17	0.31
(2,100)	1:121:A:VAL:HG12	1:135:A:HIS:H	17	0.31
(2,100)	1:121:A:VAL:HG13	1:135:A:HIS:H	17	0.31
(2,100)	1:121:A:VAL:HG21	1:135:A:HIS:H	17	0.31
(2,100)	1:121:A:VAL:HG22	1:135:A:HIS:H	17	0.31
(2,100)	1:121:A:VAL:HG23	1:135:A:HIS:H	17	0.31
(1,1033)	1:121:A:VAL:HG11	1:134:A:HIS:HD2	17	0.31
(1,1033)	1:121:A:VAL:HG12	1:134:A:HIS:HD2	17	0.31
(1,1033)	1:121:A:VAL:HG13	1:134:A:HIS:HD2	17	0.31
(1,1033)	1:121:A:VAL:HG21	1:134:A:HIS:HD2	17	0.31
(1,1033)	1:121:A:VAL:HG22	1:134:A:HIS:HD2	17	0.31
(1,1033)	1:121:A:VAL:HG23	1:134:A:HIS:HD2	17	0.31
(1,1032)	1:121:A:VAL:HG11	1:134:A:HIS:HB2	3	0.31
(1,1032)	1:121:A:VAL:HG12	1:134:A:HIS:HB2	3	0.31
(1,1032)	1:121:A:VAL:HG13	1:134:A:HIS:HB2	3	0.31
(1,1032)	1:121:A:VAL:HG21	1:134:A:HIS:HB2	3	0.31
(1,1032)	1:121:A:VAL:HG22	1:134:A:HIS:HB2	3	0.31
(1,1032)	1:121:A:VAL:HG23	1:134:A:HIS:HB2	3	0.31
(1,1011)	1:109:A:PRO:HG2	1:110:A:LEU:H	6	0.31
(1,1011)	1:109:A:PRO:HG3	1:110:A:LEU:H	6	0.31
(1,986)	1:95:A:TRP:HD1	1:132:A:LEU:HD11	16	0.31
(1,986)	1:95:A:TRP:HD1	1:132:A:LEU:HD12	16	0.31
(1,986)	1:95:A:TRP:HD1	1:132:A:LEU:HD13	16	0.31
(1,986)	1:95:A:TRP:HD1	1:132:A:LEU:HD21	16	0.31
(1,986)	1:95:A:TRP:HD1	1:132:A:LEU:HD22	16	0.31
(1,986)	1:95:A:TRP:HD1	1:132:A:LEU:HD23	16	0.31
(1,983)	1:95:A:TRP:H	1:122:A:PRO:HB2	3	0.31
(1,983)	1:95:A:TRP:H	1:122:A:PRO:HB3	3	0.31

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,920)	1:47:A:ALA:HB1	1:56:A:GLY:HA2	18	0.31
(1,920)	1:47:A:ALA:HB1	1:56:A:GLY:HA3	18	0.31
(1,920)	1:47:A:ALA:HB2	1:56:A:GLY:HA2	18	0.31
(1,920)	1:47:A:ALA:HB2	1:56:A:GLY:HA3	18	0.31
(1,920)	1:47:A:ALA:HB3	1:56:A:GLY:HA2	18	0.31
(1,920)	1:47:A:ALA:HB3	1:56:A:GLY:HA3	18	0.31
(1,911)	1:41:A:PHE:HD1	1:43:A:HIS:HB2	13	0.31
(1,911)	1:41:A:PHE:HD1	1:43:A:HIS:HB3	13	0.31
(1,911)	1:41:A:PHE:HD2	1:43:A:HIS:HB2	13	0.31
(1,911)	1:41:A:PHE:HD2	1:43:A:HIS:HB3	13	0.31
(1,897)	1:28:A:VAL:HG11	1:68:A:ASN:HB2	5	0.31
(1,897)	1:28:A:VAL:HG11	1:68:A:ASN:HB3	5	0.31
(1,897)	1:28:A:VAL:HG12	1:68:A:ASN:HB2	5	0.31
(1,897)	1:28:A:VAL:HG12	1:68:A:ASN:HB3	5	0.31
(1,897)	1:28:A:VAL:HG13	1:68:A:ASN:HB2	5	0.31
(1,897)	1:28:A:VAL:HG13	1:68:A:ASN:HB3	5	0.31
(1,897)	1:28:A:VAL:HG21	1:68:A:ASN:HB2	5	0.31
(1,897)	1:28:A:VAL:HG21	1:68:A:ASN:HB3	5	0.31
(1,897)	1:28:A:VAL:HG22	1:68:A:ASN:HB2	5	0.31
(1,897)	1:28:A:VAL:HG22	1:68:A:ASN:HB3	5	0.31
(1,897)	1:28:A:VAL:HG23	1:68:A:ASN:HB2	5	0.31
(1,897)	1:28:A:VAL:HG23	1:68:A:ASN:HB3	5	0.31
(1,676)	1:57:A:LEU:HB2	1:59:A:GLY:H	18	0.31
(1,656)	1:112:A:ARG:HB2	1:114:A:ASP:H	13	0.31
(1,654)	1:6:A:LYS:HA	1:8:A:GLY:H	18	0.31
(1,396)	1:134:A:HIS:HB2	1:135:A:HIS:H	7	0.31
(1,308)	1:96:A:HIS:H	1:96:A:HIS:HB3	9	0.31
(1,308)	1:96:A:HIS:H	1:96:A:HIS:HB3	14	0.31
(1,304)	1:93:A:SER:H	1:93:A:SER:HB2	14	0.31
(1,224)	1:57:A:LEU:HA	1:58:A:PHE:H	3	0.31
(1,224)	1:57:A:LEU:HA	1:58:A:PHE:H	8	0.31
(1,114)	1:75:A:MET:HE1	1:80:A:HIS:HD2	18	0.31
(1,114)	1:75:A:MET:HE2	1:80:A:HIS:HD2	18	0.31
(1,114)	1:75:A:MET:HE3	1:80:A:HIS:HD2	18	0.31
(1,81)	1:143:A:LEU:HA	1:170:A:VAL:HB	11	0.31
(1,22)	1:92:A:THR:HG21	1:123:A:HIS:HD2	17	0.31
(1,22)	1:92:A:THR:HG22	1:123:A:HIS:HD2	17	0.31
(1,22)	1:92:A:THR:HG23	1:123:A:HIS:HD2	17	0.31
(1,22)	1:92:A:THR:HG21	1:123:A:HIS:HD2	19	0.31
(1,22)	1:92:A:THR:HG22	1:123:A:HIS:HD2	19	0.31
(1,22)	1:92:A:THR:HG23	1:123:A:HIS:HD2	19	0.31
(1,7)	1:69:A:ARG:HB2	1:70:A:TRP:HD1	17	0.31

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1011)	1:109:A:PRO:HG2	1:110:A:LEU:H	12	0.3
(1,1011)	1:109:A:PRO:HG3	1:110:A:LEU:H	12	0.3
(1,1011)	1:109:A:PRO:HG2	1:110:A:LEU:H	20	0.3
(1,1011)	1:109:A:PRO:HG3	1:110:A:LEU:H	20	0.3
(1,1005)	1:104:A:TRP:HH2	1:110:A:LEU:HD11	2	0.3
(1,1005)	1:104:A:TRP:HH2	1:110:A:LEU:HD12	2	0.3
(1,1005)	1:104:A:TRP:HH2	1:110:A:LEU:HD13	2	0.3
(1,1005)	1:104:A:TRP:HH2	1:110:A:LEU:HD21	2	0.3
(1,1005)	1:104:A:TRP:HH2	1:110:A:LEU:HD22	2	0.3
(1,1005)	1:104:A:TRP:HH2	1:110:A:LEU:HD23	2	0.3
(1,920)	1:47:A:ALA:HB1	1:56:A:GLY:HA2	20	0.3
(1,920)	1:47:A:ALA:HB1	1:56:A:GLY:HA3	20	0.3
(1,920)	1:47:A:ALA:HB2	1:56:A:GLY:HA2	20	0.3
(1,920)	1:47:A:ALA:HB2	1:56:A:GLY:HA3	20	0.3
(1,920)	1:47:A:ALA:HB3	1:56:A:GLY:HA2	20	0.3
(1,920)	1:47:A:ALA:HB3	1:56:A:GLY:HA3	20	0.3
(1,914)	1:43:A:HIS:HB2	1:44:A:SER:H	8	0.3
(1,914)	1:43:A:HIS:HB3	1:44:A:SER:H	8	0.3
(1,861)	1:7:A:PRO:HB2	1:73:A:HIS:HD2	3	0.3
(1,861)	1:7:A:PRO:HB3	1:73:A:HIS:HD2	3	0.3
(1,749)	1:75:A:MET:H	1:167:A:VAL:HB	8	0.3
(1,676)	1:57:A:LEU:HB2	1:59:A:GLY:H	19	0.3
(1,676)	1:57:A:LEU:HB2	1:59:A:GLY:H	20	0.3
(1,594)	1:66:A:SER:H	1:69:A:ARG:HB3	7	0.3
(1,594)	1:66:A:SER:H	1:69:A:ARG:HB3	16	0.3
(1,578)	1:39:A:LYS:H	1:159:A:ASN:HA	7	0.3
(1,308)	1:96:A:HIS:H	1:96:A:HIS:HB3	10	0.3
(1,304)	1:93:A:SER:H	1:93:A:SER:HB2	2	0.3
(1,109)	1:153:A:ASP:HA	1:160:A:ALA:HB1	19	0.3
(1,109)	1:153:A:ASP:HA	1:160:A:ALA:HB2	19	0.3
(1,109)	1:153:A:ASP:HA	1:160:A:ALA:HB3	19	0.3
(1,22)	1:92:A:THR:HG21	1:123:A:HIS:HD2	16	0.3
(1,22)	1:92:A:THR:HG22	1:123:A:HIS:HD2	16	0.3
(1,22)	1:92:A:THR:HG23	1:123:A:HIS:HD2	16	0.3
(1,12)	1:3:A:PHE:HE1	1:87:A:THR:HB	1	0.3
(1,12)	1:3:A:PHE:HE2	1:87:A:THR:HB	1	0.3
(1,7)	1:69:A:ARG:HB2	1:70:A:TRP:HD1	7	0.3
(2,81)	1:33:A:GLN:HG2	1:86:A:TYR:HE1	5	0.29
(2,81)	1:33:A:GLN:HG2	1:86:A:TYR:HE2	5	0.29
(2,81)	1:33:A:GLN:HG3	1:86:A:TYR:HE1	5	0.29
(2,81)	1:33:A:GLN:HG3	1:86:A:TYR:HE2	5	0.29
(2,14)	1:61:A:ILE:HD11	1:145:A:TYR:HD1	7	0.29

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,14)	1:61:A:ILE:HD11	1:145:A:TYR:HD2	7	0.29
(2,14)	1:61:A:ILE:HD12	1:145:A:TYR:HD1	7	0.29
(2,14)	1:61:A:ILE:HD12	1:145:A:TYR:HD2	7	0.29
(2,14)	1:61:A:ILE:HD13	1:145:A:TYR:HD1	7	0.29
(2,14)	1:61:A:ILE:HD13	1:145:A:TYR:HD2	7	0.29
(2,14)	1:61:A:ILE:HD11	1:145:A:TYR:HD1	16	0.29
(2,14)	1:61:A:ILE:HD11	1:145:A:TYR:HD2	16	0.29
(2,14)	1:61:A:ILE:HD12	1:145:A:TYR:HD1	16	0.29
(2,14)	1:61:A:ILE:HD12	1:145:A:TYR:HD2	16	0.29
(2,14)	1:61:A:ILE:HD13	1:145:A:TYR:HD1	16	0.29
(2,14)	1:61:A:ILE:HD13	1:145:A:TYR:HD2	16	0.29
(2,14)	1:61:A:ILE:HD11	1:145:A:TYR:HD1	17	0.29
(2,14)	1:61:A:ILE:HD11	1:145:A:TYR:HD2	17	0.29
(2,14)	1:61:A:ILE:HD12	1:145:A:TYR:HD1	17	0.29
(2,14)	1:61:A:ILE:HD12	1:145:A:TYR:HD2	17	0.29
(2,14)	1:61:A:ILE:HD13	1:145:A:TYR:HD1	17	0.29
(2,14)	1:61:A:ILE:HD13	1:145:A:TYR:HD2	17	0.29
(1,1011)	1:109:A:PRO:HG2	1:110:A:LEU:H	19	0.29
(1,1011)	1:109:A:PRO:HG3	1:110:A:LEU:H	19	0.29
(1,987)	1:95:A:TRP:HZ3	1:132:A:LEU:HD11	18	0.29
(1,987)	1:95:A:TRP:HZ3	1:132:A:LEU:HD12	18	0.29
(1,987)	1:95:A:TRP:HZ3	1:132:A:LEU:HD13	18	0.29
(1,987)	1:95:A:TRP:HZ3	1:132:A:LEU:HD21	18	0.29
(1,987)	1:95:A:TRP:HZ3	1:132:A:LEU:HD22	18	0.29
(1,987)	1:95:A:TRP:HZ3	1:132:A:LEU:HD23	18	0.29
(1,985)	1:95:A:TRP:HB2	1:152:A:TRP:HD1	10	0.29
(1,985)	1:95:A:TRP:HB3	1:152:A:TRP:HD1	10	0.29
(1,920)	1:47:A:ALA:HB1	1:56:A:GLY:HA2	19	0.29
(1,920)	1:47:A:ALA:HB1	1:56:A:GLY:HA3	19	0.29
(1,920)	1:47:A:ALA:HB2	1:56:A:GLY:HA2	19	0.29
(1,920)	1:47:A:ALA:HB2	1:56:A:GLY:HA3	19	0.29
(1,920)	1:47:A:ALA:HB3	1:56:A:GLY:HA2	19	0.29
(1,920)	1:47:A:ALA:HB3	1:56:A:GLY:HA3	19	0.29
(1,729)	1:38:A:LYS:HB2	1:160:A:ALA:H	2	0.29
(1,729)	1:38:A:LYS:HB2	1:160:A:ALA:H	3	0.29
(1,728)	1:134:A:HIS:HD2	1:135:A:HIS:H	10	0.29
(1,675)	1:57:A:LEU:HB2	1:58:A:PHE:H	7	0.29
(1,594)	1:66:A:SER:H	1:69:A:ARG:HB3	12	0.29
(1,563)	1:68:A:ASN:HA	1:70:A:TRP:H	1	0.29
(1,563)	1:68:A:ASN:HA	1:70:A:TRP:H	10	0.29
(1,563)	1:68:A:ASN:HA	1:70:A:TRP:H	17	0.29
(1,548)	1:26:A:GLY:H	1:27:A:SER:H	19	0.29

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,396)	1:134:A:HIS:HB2	1:135:A:HIS:H	12	0.29
(1,308)	1:96:A:HIS:H	1:96:A:HIS:HB3	15	0.29
(1,16)	1:49:A:GLY:HA3	1:162:A:TYR:HE1	2	0.29
(1,16)	1:49:A:GLY:HA3	1:162:A:TYR:HE2	2	0.29
(2,14)	1:61:A:ILE:HD11	1:145:A:TYR:HD1	6	0.28
(2,14)	1:61:A:ILE:HD11	1:145:A:TYR:HD2	6	0.28
(2,14)	1:61:A:ILE:HD12	1:145:A:TYR:HD1	6	0.28
(2,14)	1:61:A:ILE:HD12	1:145:A:TYR:HD2	6	0.28
(2,14)	1:61:A:ILE:HD13	1:145:A:TYR:HD1	6	0.28
(2,14)	1:61:A:ILE:HD13	1:145:A:TYR:HD2	6	0.28
(1,1011)	1:109:A:PRO:HG2	1:110:A:LEU:H	17	0.28
(1,1011)	1:109:A:PRO:HG3	1:110:A:LEU:H	17	0.28
(1,957)	1:75:A:MET:HB2	1:80:A:HIS:HE1	7	0.28
(1,957)	1:75:A:MET:HB3	1:80:A:HIS:HE1	7	0.28
(1,920)	1:47:A:ALA:HB1	1:56:A:GLY:HA2	4	0.28
(1,920)	1:47:A:ALA:HB1	1:56:A:GLY:HA3	4	0.28
(1,920)	1:47:A:ALA:HB2	1:56:A:GLY:HA2	4	0.28
(1,920)	1:47:A:ALA:HB2	1:56:A:GLY:HA3	4	0.28
(1,920)	1:47:A:ALA:HB3	1:56:A:GLY:HA2	4	0.28
(1,920)	1:47:A:ALA:HB3	1:56:A:GLY:HA3	4	0.28
(1,911)	1:41:A:PHE:HD1	1:43:A:HIS:HB2	11	0.28
(1,911)	1:41:A:PHE:HD1	1:43:A:HIS:HB3	11	0.28
(1,911)	1:41:A:PHE:HD2	1:43:A:HIS:HB2	11	0.28
(1,911)	1:41:A:PHE:HD2	1:43:A:HIS:HB3	11	0.28
(1,874)	1:13:A:LEU:HD11	1:74:A:ILE:H	6	0.28
(1,874)	1:13:A:LEU:HD12	1:74:A:ILE:H	6	0.28
(1,874)	1:13:A:LEU:HD13	1:74:A:ILE:H	6	0.28
(1,874)	1:13:A:LEU:HD21	1:74:A:ILE:H	6	0.28
(1,874)	1:13:A:LEU:HD22	1:74:A:ILE:H	6	0.28
(1,874)	1:13:A:LEU:HD23	1:74:A:ILE:H	6	0.28
(1,872)	1:13:A:LEU:HB2	1:73:A:HIS:HE1	8	0.28
(1,872)	1:13:A:LEU:HB3	1:73:A:HIS:HE1	8	0.28
(1,858)	1:6:A:LYS:HB2	1:8:A:GLY:H	14	0.28
(1,858)	1:6:A:LYS:HB3	1:8:A:GLY:H	14	0.28
(1,818)	1:71:A:PHE:H	1:165:A:ILE:HG21	12	0.28
(1,818)	1:71:A:PHE:H	1:165:A:ILE:HG22	12	0.28
(1,818)	1:71:A:PHE:H	1:165:A:ILE:HG23	12	0.28
(1,656)	1:112:A:ARG:HB2	1:114:A:ASP:H	14	0.28
(1,656)	1:112:A:ARG:HB2	1:114:A:ASP:H	17	0.28
(1,654)	1:6:A:LYS:HA	1:8:A:GLY:H	2	0.28
(1,596)	1:154:A:VAL:H	1:160:A:ALA:HA	19	0.28
(1,563)	1:68:A:ASN:HA	1:70:A:TRP:H	9	0.28

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,563)	1:68:A:ASN:HA	1:70:A:TRP:H	19	0.28
(1,486)	1:172:A:LYS:H	1:172:A:LYS:HB3	6	0.28
(1,304)	1:93:A:SER:H	1:93:A:SER:HB2	13	0.28
(1,81)	1:143:A:LEU:HA	1:170:A:VAL:HB	5	0.28
(1,81)	1:143:A:LEU:HA	1:170:A:VAL:HB	16	0.28
(1,81)	1:143:A:LEU:HA	1:170:A:VAL:HB	17	0.28
(1,957)	1:75:A:MET:HB2	1:80:A:HIS:HE1	14	0.27
(1,957)	1:75:A:MET:HB3	1:80:A:HIS:HE1	14	0.27
(1,908)	1:35:A:LEU:HD11	1:163:A:GLN:HA	9	0.27
(1,908)	1:35:A:LEU:HD12	1:163:A:GLN:HA	9	0.27
(1,908)	1:35:A:LEU:HD13	1:163:A:GLN:HA	9	0.27
(1,908)	1:35:A:LEU:HD21	1:163:A:GLN:HA	9	0.27
(1,908)	1:35:A:LEU:HD22	1:163:A:GLN:HA	9	0.27
(1,908)	1:35:A:LEU:HD23	1:163:A:GLN:HA	9	0.27
(1,818)	1:71:A:PHE:H	1:165:A:ILE:HG21	1	0.27
(1,818)	1:71:A:PHE:H	1:165:A:ILE:HG22	1	0.27
(1,818)	1:71:A:PHE:H	1:165:A:ILE:HG23	1	0.27
(1,728)	1:134:A:HIS:HD2	1:135:A:HIS:H	13	0.27
(1,656)	1:112:A:ARG:HB2	1:114:A:ASP:H	10	0.27
(1,578)	1:39:A:LYS:H	1:159:A:ASN:HA	19	0.27
(1,506)	1:48:A:ASP:HA	1:51:A:ILE:H	7	0.27
(1,476)	1:167:A:VAL:HB	1:168:A:ASP:H	12	0.27
(1,396)	1:134:A:HIS:HB2	1:135:A:HIS:H	5	0.27
(1,396)	1:134:A:HIS:HB2	1:135:A:HIS:H	9	0.27
(1,345)	1:109:A:PRO:HB2	1:110:A:LEU:H	18	0.27
(1,304)	1:93:A:SER:H	1:93:A:SER:HB2	12	0.27
(1,19)	1:81:A:THR:HG21	1:135:A:HIS:HD2	5	0.27
(1,19)	1:81:A:THR:HG22	1:135:A:HIS:HD2	5	0.27
(1,19)	1:81:A:THR:HG23	1:135:A:HIS:HD2	5	0.27
(2,100)	1:121:A:VAL:HG11	1:135:A:HIS:H	7	0.26
(2,100)	1:121:A:VAL:HG12	1:135:A:HIS:H	7	0.26
(2,100)	1:121:A:VAL:HG13	1:135:A:HIS:H	7	0.26
(2,100)	1:121:A:VAL:HG21	1:135:A:HIS:H	7	0.26
(2,100)	1:121:A:VAL:HG22	1:135:A:HIS:H	7	0.26
(2,100)	1:121:A:VAL:HG23	1:135:A:HIS:H	7	0.26
(2,14)	1:61:A:ILE:HD11	1:145:A:TYR:HD1	15	0.26
(2,14)	1:61:A:ILE:HD11	1:145:A:TYR:HD2	15	0.26
(2,14)	1:61:A:ILE:HD12	1:145:A:TYR:HD1	15	0.26
(2,14)	1:61:A:ILE:HD12	1:145:A:TYR:HD2	15	0.26
(2,14)	1:61:A:ILE:HD13	1:145:A:TYR:HD1	15	0.26
(2,14)	1:61:A:ILE:HD13	1:145:A:TYR:HD2	15	0.26
(2,2)	1:30:A:TYR:HE1	1:34:A:SER:HB2	9	0.26

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,2)	1:30:A:TYR:HE2	1:34:A:SER:HB2	9	0.26
(1,1076)	1:150:A:ALA:H	1:164:A:VAL:HG11	13	0.26
(1,1076)	1:150:A:ALA:H	1:164:A:VAL:HG12	13	0.26
(1,1076)	1:150:A:ALA:H	1:164:A:VAL:HG13	13	0.26
(1,1076)	1:150:A:ALA:H	1:164:A:VAL:HG21	13	0.26
(1,1076)	1:150:A:ALA:H	1:164:A:VAL:HG22	13	0.26
(1,1076)	1:150:A:ALA:H	1:164:A:VAL:HG23	13	0.26
(1,983)	1:95:A:TRP:H	1:122:A:PRO:HB2	15	0.26
(1,983)	1:95:A:TRP:H	1:122:A:PRO:HB3	15	0.26
(1,957)	1:75:A:MET:HB2	1:80:A:HIS:HE1	3	0.26
(1,957)	1:75:A:MET:HB3	1:80:A:HIS:HE1	3	0.26
(1,914)	1:43:A:HIS:HB2	1:44:A:SER:H	16	0.26
(1,914)	1:43:A:HIS:HB3	1:44:A:SER:H	16	0.26
(1,676)	1:57:A:LEU:HB2	1:59:A:GLY:H	17	0.26
(1,654)	1:6:A:LYS:HA	1:8:A:GLY:H	5	0.26
(1,635)	1:109:A:PRO:HA	1:113:A:ALA:H	17	0.26
(1,623)	1:20:A:PHE:H	1:22:A:ASN:H	11	0.26
(1,576)	1:92:A:THR:HA	1:155:A:ALA:H	8	0.26
(1,548)	1:26:A:GLY:H	1:27:A:SER:H	9	0.26
(1,345)	1:109:A:PRO:HB2	1:110:A:LEU:H	10	0.26
(1,308)	1:96:A:HIS:H	1:96:A:HIS:HB3	4	0.26
(1,224)	1:57:A:LEU:HA	1:58:A:PHE:H	17	0.26
(1,206)	1:48:A:ASP:H	1:48:A:ASP:HB3	18	0.26
(1,22)	1:92:A:THR:HG21	1:123:A:HIS:HD2	4	0.26
(1,22)	1:92:A:THR:HG22	1:123:A:HIS:HD2	4	0.26
(1,22)	1:92:A:THR:HG23	1:123:A:HIS:HD2	4	0.26
(1,16)	1:49:A:GLY:HA3	1:162:A:TYR:HE1	12	0.26
(1,16)	1:49:A:GLY:HA3	1:162:A:TYR:HE2	12	0.26
(2,81)	1:33:A:GLN:HG2	1:86:A:TYR:HE1	19	0.25
(2,81)	1:33:A:GLN:HG2	1:86:A:TYR:HE2	19	0.25
(2,81)	1:33:A:GLN:HG3	1:86:A:TYR:HE1	19	0.25
(2,81)	1:33:A:GLN:HG3	1:86:A:TYR:HE2	19	0.25
(2,72)	1:143:A:LEU:HD11	1:172:A:LYS:H	3	0.25
(2,72)	1:143:A:LEU:HD12	1:172:A:LYS:H	3	0.25
(2,72)	1:143:A:LEU:HD13	1:172:A:LYS:H	3	0.25
(1,1002)	1:103:A:GLY:HA2	1:104:A:TRP:HD1	16	0.25
(1,1002)	1:103:A:GLY:HA3	1:104:A:TRP:HD1	16	0.25
(1,985)	1:95:A:TRP:HB2	1:152:A:TRP:HD1	18	0.25
(1,985)	1:95:A:TRP:HB3	1:152:A:TRP:HD1	18	0.25
(1,983)	1:95:A:TRP:H	1:122:A:PRO:HB2	4	0.25
(1,983)	1:95:A:TRP:H	1:122:A:PRO:HB3	4	0.25
(1,983)	1:95:A:TRP:H	1:122:A:PRO:HB2	5	0.25

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,983)	1:95:A:TRP:H	1:122:A:PRO:HB3	5	0.25
(1,981)	1:94:A:GLN:HG2	1:96:A:HIS:HD2	13	0.25
(1,981)	1:94:A:GLN:HG3	1:96:A:HIS:HD2	13	0.25
(1,724)	1:95:A:TRP:H	1:95:A:TRP:HD1	8	0.25
(1,673)	1:57:A:LEU:HA	1:59:A:GLY:H	1	0.25
(1,656)	1:112:A:ARG:HB2	1:114:A:ASP:H	5	0.25
(1,578)	1:39:A:LYS:H	1:159:A:ASN:HA	14	0.25
(1,517)	1:6:A:LYS:H	1:83:A:THR:H	3	0.25
(1,375)	1:127:A:PRO:HA	1:128:A:ALA:H	5	0.25
(1,348)	1:112:A:ARG:HB3	1:113:A:ALA:H	1	0.25
(1,345)	1:109:A:PRO:HB2	1:110:A:LEU:H	20	0.25
(1,308)	1:96:A:HIS:H	1:96:A:HIS:HB3	2	0.25
(1,304)	1:93:A:SER:H	1:93:A:SER:HB2	8	0.25
(1,224)	1:57:A:LEU:HA	1:58:A:PHE:H	20	0.25
(1,200)	1:39:A:LYS:HB2	1:40:A:GLY:H	20	0.25
(1,194)	1:36:A:GLU:HB2	1:37:A:ALA:H	7	0.25
(2,100)	1:121:A:VAL:HG11	1:135:A:HIS:H	2	0.24
(2,100)	1:121:A:VAL:HG12	1:135:A:HIS:H	2	0.24
(2,100)	1:121:A:VAL:HG13	1:135:A:HIS:H	2	0.24
(2,100)	1:121:A:VAL:HG21	1:135:A:HIS:H	2	0.24
(2,100)	1:121:A:VAL:HG22	1:135:A:HIS:H	2	0.24
(2,100)	1:121:A:VAL:HG23	1:135:A:HIS:H	2	0.24
(2,14)	1:61:A:ILE:HD11	1:145:A:TYR:HD1	11	0.24
(2,14)	1:61:A:ILE:HD11	1:145:A:TYR:HD2	11	0.24
(2,14)	1:61:A:ILE:HD12	1:145:A:TYR:HD1	11	0.24
(2,14)	1:61:A:ILE:HD12	1:145:A:TYR:HD2	11	0.24
(2,14)	1:61:A:ILE:HD13	1:145:A:TYR:HD1	11	0.24
(2,14)	1:61:A:ILE:HD13	1:145:A:TYR:HD2	11	0.24
(2,2)	1:30:A:TYR:HE1	1:34:A:SER:HB2	6	0.24
(2,2)	1:30:A:TYR:HE2	1:34:A:SER:HB2	6	0.24
(1,1005)	1:104:A:TRP:HH2	1:110:A:LEU:HD11	14	0.24
(1,1005)	1:104:A:TRP:HH2	1:110:A:LEU:HD12	14	0.24
(1,1005)	1:104:A:TRP:HH2	1:110:A:LEU:HD13	14	0.24
(1,1005)	1:104:A:TRP:HH2	1:110:A:LEU:HD21	14	0.24
(1,1005)	1:104:A:TRP:HH2	1:110:A:LEU:HD22	14	0.24
(1,1005)	1:104:A:TRP:HH2	1:110:A:LEU:HD23	14	0.24
(1,749)	1:75:A:MET:H	1:167:A:VAL:HB	2	0.24
(1,711)	1:23:A:LEU:HG	1:24:A:ASN:H	2	0.24
(1,710)	1:23:A:LEU:H	1:23:A:LEU:HG	4	0.24
(1,676)	1:57:A:LEU:HB2	1:59:A:GLY:H	6	0.24
(1,562)	1:69:A:ARG:H	1:70:A:TRP:H	3	0.24
(1,546)	1:20:A:PHE:H	1:21:A:LEU:H	14	0.24

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,486)	1:172:A:LYS:H	1:172:A:LYS:HB3	11	0.24
(1,308)	1:96:A:HIS:H	1:96:A:HIS:HB3	5	0.24
(1,224)	1:57:A:LEU:HA	1:58:A:PHE:H	12	0.24
(1,194)	1:36:A:GLU:HB2	1:37:A:ALA:H	20	0.24
(1,9)	1:97:A:TYR:HE1	1:134:A:HIS:HB2	17	0.24
(1,9)	1:97:A:TYR:HE2	1:134:A:HIS:HB2	17	0.24
(2,100)	1:121:A:VAL:HG11	1:135:A:HIS:H	12	0.23
(2,100)	1:121:A:VAL:HG12	1:135:A:HIS:H	12	0.23
(2,100)	1:121:A:VAL:HG13	1:135:A:HIS:H	12	0.23
(2,100)	1:121:A:VAL:HG21	1:135:A:HIS:H	12	0.23
(2,100)	1:121:A:VAL:HG22	1:135:A:HIS:H	12	0.23
(2,100)	1:121:A:VAL:HG23	1:135:A:HIS:H	12	0.23
(2,6)	1:4:A:ILE:HD11	1:82:A:PHE:HD1	18	0.23
(2,6)	1:4:A:ILE:HD11	1:82:A:PHE:HD2	18	0.23
(2,6)	1:4:A:ILE:HD12	1:82:A:PHE:HD1	18	0.23
(2,6)	1:4:A:ILE:HD12	1:82:A:PHE:HD2	18	0.23
(2,6)	1:4:A:ILE:HD13	1:82:A:PHE:HD1	18	0.23
(2,6)	1:4:A:ILE:HD13	1:82:A:PHE:HD2	18	0.23
(1,1064)	1:145:A:TYR:HB2	1:168:A:ASP:HA	9	0.23
(1,1064)	1:145:A:TYR:HB3	1:168:A:ASP:HA	9	0.23
(1,1017)	1:111:A:LYS:HE2	1:112:A:ARG:H	16	0.23
(1,1017)	1:111:A:LYS:HE3	1:112:A:ARG:H	16	0.23
(1,1011)	1:109:A:PRO:HG2	1:110:A:LEU:H	15	0.23
(1,1011)	1:109:A:PRO:HG3	1:110:A:LEU:H	15	0.23
(1,1005)	1:104:A:TRP:HH2	1:110:A:LEU:HD11	6	0.23
(1,1005)	1:104:A:TRP:HH2	1:110:A:LEU:HD12	6	0.23
(1,1005)	1:104:A:TRP:HH2	1:110:A:LEU:HD13	6	0.23
(1,1005)	1:104:A:TRP:HH2	1:110:A:LEU:HD21	6	0.23
(1,1005)	1:104:A:TRP:HH2	1:110:A:LEU:HD22	6	0.23
(1,1005)	1:104:A:TRP:HH2	1:110:A:LEU:HD23	6	0.23
(1,985)	1:95:A:TRP:HB2	1:152:A:TRP:HD1	12	0.23
(1,985)	1:95:A:TRP:HB3	1:152:A:TRP:HD1	12	0.23
(1,983)	1:95:A:TRP:H	1:122:A:PRO:HB2	13	0.23
(1,983)	1:95:A:TRP:H	1:122:A:PRO:HB3	13	0.23
(1,983)	1:95:A:TRP:H	1:122:A:PRO:HB2	17	0.23
(1,983)	1:95:A:TRP:H	1:122:A:PRO:HB3	17	0.23
(1,818)	1:71:A:PHE:H	1:165:A:ILE:HG21	6	0.23
(1,818)	1:71:A:PHE:H	1:165:A:ILE:HG22	6	0.23
(1,818)	1:71:A:PHE:H	1:165:A:ILE:HG23	6	0.23
(1,676)	1:57:A:LEU:HB2	1:59:A:GLY:H	4	0.23
(1,635)	1:109:A:PRO:HA	1:113:A:ALA:H	3	0.23
(1,635)	1:109:A:PRO:HA	1:113:A:ALA:H	14	0.23

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,576)	1:92:A:THR:HA	1:155:A:ALA:H	3	0.23
(1,563)	1:68:A:ASN:HA	1:70:A:TRP:H	16	0.23
(1,506)	1:48:A:ASP:HA	1:51:A:ILE:H	19	0.23
(1,486)	1:172:A:LYS:H	1:172:A:LYS:HB3	3	0.23
(1,396)	1:134:A:HIS:HB2	1:135:A:HIS:H	16	0.23
(1,396)	1:134:A:HIS:HB2	1:135:A:HIS:H	20	0.23
(1,345)	1:109:A:PRO:HB2	1:110:A:LEU:H	19	0.23
(1,304)	1:93:A:SER:H	1:93:A:SER:HB2	10	0.23
(1,304)	1:93:A:SER:H	1:93:A:SER:HB2	17	0.23
(1,304)	1:93:A:SER:H	1:93:A:SER:HB2	18	0.23
(1,206)	1:48:A:ASP:H	1:48:A:ASP:HB3	2	0.23
(1,114)	1:75:A:MET:HE1	1:80:A:HIS:HD2	5	0.23
(1,114)	1:75:A:MET:HE2	1:80:A:HIS:HD2	5	0.23
(1,114)	1:75:A:MET:HE3	1:80:A:HIS:HD2	5	0.23
(1,16)	1:49:A:GLY:HA3	1:162:A:TYR:HE1	3	0.23
(1,16)	1:49:A:GLY:HA3	1:162:A:TYR:HE2	3	0.23
(1,16)	1:49:A:GLY:HA3	1:162:A:TYR:HE1	10	0.23
(1,16)	1:49:A:GLY:HA3	1:162:A:TYR:HE2	10	0.23
(2,69)	1:143:A:LEU:HD21	1:172:A:LYS:H	4	0.22
(2,69)	1:143:A:LEU:HD22	1:172:A:LYS:H	4	0.22
(2,69)	1:143:A:LEU:HD23	1:172:A:LYS:H	4	0.22
(2,2)	1:30:A:TYR:HE1	1:34:A:SER:HB2	12	0.22
(2,2)	1:30:A:TYR:HE2	1:34:A:SER:HB2	12	0.22
(1,983)	1:95:A:TRP:H	1:122:A:PRO:HB2	6	0.22
(1,983)	1:95:A:TRP:H	1:122:A:PRO:HB3	6	0.22
(1,960)	1:77:A:GLY:H	1:169:A:LEU:HD11	1	0.22
(1,960)	1:77:A:GLY:H	1:169:A:LEU:HD12	1	0.22
(1,960)	1:77:A:GLY:H	1:169:A:LEU:HD13	1	0.22
(1,960)	1:77:A:GLY:H	1:169:A:LEU:HD21	1	0.22
(1,960)	1:77:A:GLY:H	1:169:A:LEU:HD22	1	0.22
(1,960)	1:77:A:GLY:H	1:169:A:LEU:HD23	1	0.22
(1,957)	1:75:A:MET:HB2	1:80:A:HIS:HE1	19	0.22
(1,957)	1:75:A:MET:HB3	1:80:A:HIS:HE1	19	0.22
(1,746)	1:150:A:ALA:H	1:163:A:GLN:HB3	20	0.22
(1,723)	1:86:A:TYR:H	1:132:A:LEU:HG	17	0.22
(1,711)	1:23:A:LEU:HG	1:24:A:ASN:H	10	0.22
(1,711)	1:23:A:LEU:HG	1:24:A:ASN:H	16	0.22
(1,594)	1:66:A:SER:H	1:69:A:ARG:HB3	9	0.22
(1,562)	1:69:A:ARG:H	1:70:A:TRP:H	13	0.22
(1,486)	1:172:A:LYS:H	1:172:A:LYS:HB3	15	0.22
(1,456)	1:158:A:GLU:HB3	1:159:A:ASN:H	6	0.22
(1,396)	1:134:A:HIS:HB2	1:135:A:HIS:H	3	0.22

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,375)	1:127:A:PRO:HA	1:128:A:ALA:H	3	0.22
(1,308)	1:96:A:HIS:H	1:96:A:HIS:HB3	3	0.22
(1,308)	1:96:A:HIS:H	1:96:A:HIS:HB3	8	0.22
(1,224)	1:57:A:LEU:HA	1:58:A:PHE:H	10	0.22
(1,224)	1:57:A:LEU:HA	1:58:A:PHE:H	16	0.22
(1,114)	1:75:A:MET:HE1	1:80:A:HIS:HD2	8	0.22
(1,114)	1:75:A:MET:HE2	1:80:A:HIS:HD2	8	0.22
(1,114)	1:75:A:MET:HE3	1:80:A:HIS:HD2	8	0.22
(1,81)	1:143:A:LEU:HA	1:170:A:VAL:HB	8	0.22
(2,81)	1:33:A:GLN:HG2	1:86:A:TYR:HE1	4	0.21
(2,81)	1:33:A:GLN:HG2	1:86:A:TYR:HE2	4	0.21
(2,81)	1:33:A:GLN:HG3	1:86:A:TYR:HE1	4	0.21
(2,81)	1:33:A:GLN:HG3	1:86:A:TYR:HE2	4	0.21
(2,3)	1:58:A:PHE:HE1	1:110:A:LEU:HG	12	0.21
(2,3)	1:58:A:PHE:HE2	1:110:A:LEU:HG	12	0.21
(2,2)	1:30:A:TYR:HE1	1:34:A:SER:HB2	10	0.21
(2,2)	1:30:A:TYR:HE2	1:34:A:SER:HB2	10	0.21
(2,2)	1:30:A:TYR:HE1	1:34:A:SER:HB2	11	0.21
(2,2)	1:30:A:TYR:HE2	1:34:A:SER:HB2	11	0.21
(1,1065)	1:145:A:TYR:HD1	1:168:A:ASP:HB2	17	0.21
(1,1065)	1:145:A:TYR:HD1	1:168:A:ASP:HB3	17	0.21
(1,1065)	1:145:A:TYR:HD2	1:168:A:ASP:HB2	17	0.21
(1,1065)	1:145:A:TYR:HD2	1:168:A:ASP:HB3	17	0.21
(1,1051)	1:136:A:ILE:HG12	1:148:A:ILE:HD11	13	0.21
(1,1051)	1:136:A:ILE:HG12	1:148:A:ILE:HD12	13	0.21
(1,1051)	1:136:A:ILE:HG12	1:148:A:ILE:HD13	13	0.21
(1,1051)	1:136:A:ILE:HG13	1:148:A:ILE:HD11	13	0.21
(1,1051)	1:136:A:ILE:HG13	1:148:A:ILE:HD12	13	0.21
(1,1051)	1:136:A:ILE:HG13	1:148:A:ILE:HD13	13	0.21
(1,1027)	1:117:A:LEU:HB2	1:120:A:ALA:HB1	7	0.21
(1,1027)	1:117:A:LEU:HB2	1:120:A:ALA:HB2	7	0.21
(1,1027)	1:117:A:LEU:HB2	1:120:A:ALA:HB3	7	0.21
(1,1027)	1:117:A:LEU:HB3	1:120:A:ALA:HB1	7	0.21
(1,1027)	1:117:A:LEU:HB3	1:120:A:ALA:HB2	7	0.21
(1,1027)	1:117:A:LEU:HB3	1:120:A:ALA:HB3	7	0.21
(1,1027)	1:117:A:LEU:HB2	1:120:A:ALA:HB1	20	0.21
(1,1027)	1:117:A:LEU:HB2	1:120:A:ALA:HB2	20	0.21
(1,1027)	1:117:A:LEU:HB2	1:120:A:ALA:HB3	20	0.21
(1,1027)	1:117:A:LEU:HB3	1:120:A:ALA:HB1	20	0.21
(1,1027)	1:117:A:LEU:HB3	1:120:A:ALA:HB2	20	0.21
(1,1027)	1:117:A:LEU:HB3	1:120:A:ALA:HB3	20	0.21
(1,1004)	1:104:A:TRP:HZ2	1:110:A:LEU:HD11	4	0.21

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1004)	1:104:A:TRP:HZ2	1:110:A:LEU:HD12	4	0.21
(1,1004)	1:104:A:TRP:HZ2	1:110:A:LEU:HD13	4	0.21
(1,1004)	1:104:A:TRP:HZ2	1:110:A:LEU:HD21	4	0.21
(1,1004)	1:104:A:TRP:HZ2	1:110:A:LEU:HD22	4	0.21
(1,1004)	1:104:A:TRP:HZ2	1:110:A:LEU:HD23	4	0.21
(1,1002)	1:103:A:GLY:HA2	1:104:A:TRP:HD1	7	0.21
(1,1002)	1:103:A:GLY:HA3	1:104:A:TRP:HD1	7	0.21
(1,986)	1:95:A:TRP:HD1	1:132:A:LEU:HD11	5	0.21
(1,986)	1:95:A:TRP:HD1	1:132:A:LEU:HD12	5	0.21
(1,986)	1:95:A:TRP:HD1	1:132:A:LEU:HD13	5	0.21
(1,986)	1:95:A:TRP:HD1	1:132:A:LEU:HD21	5	0.21
(1,986)	1:95:A:TRP:HD1	1:132:A:LEU:HD22	5	0.21
(1,986)	1:95:A:TRP:HD1	1:132:A:LEU:HD23	5	0.21
(1,957)	1:75:A:MET:HB2	1:80:A:HIS:HE1	8	0.21
(1,957)	1:75:A:MET:HB3	1:80:A:HIS:HE1	8	0.21
(1,880)	1:16:A:GLU:HB2	1:22:A:ASN:H	16	0.21
(1,880)	1:16:A:GLU:HB3	1:22:A:ASN:H	16	0.21
(1,858)	1:6:A:LYS:HB2	1:8:A:GLY:H	13	0.21
(1,858)	1:6:A:LYS:HB3	1:8:A:GLY:H	13	0.21
(1,711)	1:23:A:LEU:HG	1:24:A:ASN:H	18	0.21
(1,396)	1:134:A:HIS:HB2	1:135:A:HIS:H	6	0.21
(1,396)	1:134:A:HIS:HB2	1:135:A:HIS:H	15	0.21
(1,345)	1:109:A:PRO:HB2	1:110:A:LEU:H	16	0.21
(1,304)	1:93:A:SER:H	1:93:A:SER:HB2	6	0.21
(1,206)	1:48:A:ASP:H	1:48:A:ASP:HB3	6	0.21
(1,108)	1:117:A:LEU:HG	1:120:A:ALA:HB1	4	0.21
(1,108)	1:117:A:LEU:HG	1:120:A:ALA:HB2	4	0.21
(1,108)	1:117:A:LEU:HG	1:120:A:ALA:HB3	4	0.21
(1,7)	1:69:A:ARG:HB2	1:70:A:TRP:HD1	20	0.21
(1,6)	1:69:A:ARG:HA	1:70:A:TRP:HD1	3	0.21
(2,14)	1:61:A:ILE:HD11	1:145:A:TYR:HD1	4	0.2
(2,14)	1:61:A:ILE:HD11	1:145:A:TYR:HD2	4	0.2
(2,14)	1:61:A:ILE:HD12	1:145:A:TYR:HD1	4	0.2
(2,14)	1:61:A:ILE:HD12	1:145:A:TYR:HD2	4	0.2
(2,14)	1:61:A:ILE:HD13	1:145:A:TYR:HD1	4	0.2
(2,14)	1:61:A:ILE:HD13	1:145:A:TYR:HD2	4	0.2
(2,7)	1:82:A:PHE:HD1	1:148:A:ILE:HG21	8	0.2
(2,7)	1:82:A:PHE:HD1	1:148:A:ILE:HG22	8	0.2
(2,7)	1:82:A:PHE:HD1	1:148:A:ILE:HG23	8	0.2
(2,7)	1:82:A:PHE:HD2	1:148:A:ILE:HG21	8	0.2
(2,7)	1:82:A:PHE:HD2	1:148:A:ILE:HG22	8	0.2
(2,7)	1:82:A:PHE:HD2	1:148:A:ILE:HG23	8	0.2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,2)	1:30:A:TYR:HE1	1:34:A:SER:HB2	1	0.2
(2,2)	1:30:A:TYR:HE2	1:34:A:SER:HB2	1	0.2
(2,2)	1:30:A:TYR:HE1	1:34:A:SER:HB2	14	0.2
(2,2)	1:30:A:TYR:HE2	1:34:A:SER:HB2	14	0.2
(1,1065)	1:145:A:TYR:HD1	1:168:A:ASP:HB2	12	0.2
(1,1065)	1:145:A:TYR:HD1	1:168:A:ASP:HB3	12	0.2
(1,1065)	1:145:A:TYR:HD2	1:168:A:ASP:HB2	12	0.2
(1,1065)	1:145:A:TYR:HD2	1:168:A:ASP:HB3	12	0.2
(1,1064)	1:145:A:TYR:HB2	1:168:A:ASP:HA	1	0.2
(1,1064)	1:145:A:TYR:HB3	1:168:A:ASP:HA	1	0.2
(1,1032)	1:121:A:VAL:HG11	1:134:A:HIS:HB2	9	0.2
(1,1032)	1:121:A:VAL:HG12	1:134:A:HIS:HB2	9	0.2
(1,1032)	1:121:A:VAL:HG13	1:134:A:HIS:HB2	9	0.2
(1,1032)	1:121:A:VAL:HG21	1:134:A:HIS:HB2	9	0.2
(1,1032)	1:121:A:VAL:HG22	1:134:A:HIS:HB2	9	0.2
(1,1032)	1:121:A:VAL:HG23	1:134:A:HIS:HB2	9	0.2
(1,1032)	1:121:A:VAL:HG11	1:134:A:HIS:HB2	10	0.2
(1,1032)	1:121:A:VAL:HG12	1:134:A:HIS:HB2	10	0.2
(1,1032)	1:121:A:VAL:HG13	1:134:A:HIS:HB2	10	0.2
(1,1032)	1:121:A:VAL:HG21	1:134:A:HIS:HB2	10	0.2
(1,1032)	1:121:A:VAL:HG22	1:134:A:HIS:HB2	10	0.2
(1,1032)	1:121:A:VAL:HG23	1:134:A:HIS:HB2	10	0.2
(1,985)	1:95:A:TRP:HB2	1:152:A:TRP:HD1	9	0.2
(1,985)	1:95:A:TRP:HB3	1:152:A:TRP:HD1	9	0.2
(1,983)	1:95:A:TRP:H	1:122:A:PRO:HB2	12	0.2
(1,983)	1:95:A:TRP:H	1:122:A:PRO:HB3	12	0.2
(1,880)	1:16:A:GLU:HB2	1:22:A:ASN:H	10	0.2
(1,880)	1:16:A:GLU:HB3	1:22:A:ASN:H	10	0.2
(1,723)	1:86:A:TYR:H	1:132:A:LEU:HG	3	0.2
(1,723)	1:86:A:TYR:H	1:132:A:LEU:HG	20	0.2
(1,715)	1:132:A:LEU:H	1:132:A:LEU:HG	1	0.2
(1,711)	1:23:A:LEU:HG	1:24:A:ASN:H	15	0.2
(1,676)	1:57:A:LEU:HB2	1:59:A:GLY:H	10	0.2
(1,656)	1:112:A:ARG:HB2	1:114:A:ASP:H	4	0.2
(1,517)	1:6:A:LYS:H	1:83:A:THR:H	18	0.2
(1,374)	1:124:A:ASP:HB2	1:125:A:GLY:H	2	0.2
(1,350)	1:114:A:ASP:H	1:114:A:ASP:HB3	12	0.2
(1,348)	1:112:A:ARG:HB3	1:113:A:ALA:H	18	0.2
(1,308)	1:96:A:HIS:H	1:96:A:HIS:HB3	7	0.2
(1,238)	1:64:A:GLN:HA	1:65:A:GLN:H	5	0.2
(1,107)	1:4:A:ILE:HG21	1:84:A:TRP:HD1	18	0.2
(1,107)	1:4:A:ILE:HG22	1:84:A:TRP:HD1	18	0.2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,107)	1:4:A:ILE:HG23	1:84:A:TRP:HD1	18	0.2
(1,16)	1:49:A:GLY:HA3	1:162:A:TYR:HE1	20	0.2
(1,16)	1:49:A:GLY:HA3	1:162:A:TYR:HE2	20	0.2
(2,100)	1:121:A:VAL:HG11	1:135:A:HIS:H	20	0.19
(2,100)	1:121:A:VAL:HG12	1:135:A:HIS:H	20	0.19
(2,100)	1:121:A:VAL:HG13	1:135:A:HIS:H	20	0.19
(2,100)	1:121:A:VAL:HG21	1:135:A:HIS:H	20	0.19
(2,100)	1:121:A:VAL:HG22	1:135:A:HIS:H	20	0.19
(2,100)	1:121:A:VAL:HG23	1:135:A:HIS:H	20	0.19
(2,69)	1:143:A:LEU:HD21	1:172:A:LYS:H	5	0.19
(2,69)	1:143:A:LEU:HD22	1:172:A:LYS:H	5	0.19
(2,69)	1:143:A:LEU:HD23	1:172:A:LYS:H	5	0.19
(2,14)	1:61:A:ILE:HD11	1:145:A:TYR:HD1	3	0.19
(2,14)	1:61:A:ILE:HD11	1:145:A:TYR:HD2	3	0.19
(2,14)	1:61:A:ILE:HD12	1:145:A:TYR:HD1	3	0.19
(2,14)	1:61:A:ILE:HD12	1:145:A:TYR:HD2	3	0.19
(2,14)	1:61:A:ILE:HD13	1:145:A:TYR:HD1	3	0.19
(2,14)	1:61:A:ILE:HD13	1:145:A:TYR:HD2	3	0.19
(2,3)	1:58:A:PHE:HE1	1:110:A:LEU:HG	2	0.19
(2,3)	1:58:A:PHE:HE2	1:110:A:LEU:HG	2	0.19
(1,1011)	1:109:A:PRO:HG2	1:110:A:LEU:H	3	0.19
(1,1011)	1:109:A:PRO:HG3	1:110:A:LEU:H	3	0.19
(1,1011)	1:109:A:PRO:HG2	1:110:A:LEU:H	14	0.19
(1,1011)	1:109:A:PRO:HG3	1:110:A:LEU:H	14	0.19
(1,985)	1:95:A:TRP:HB2	1:152:A:TRP:HD1	20	0.19
(1,985)	1:95:A:TRP:HB3	1:152:A:TRP:HD1	20	0.19
(1,874)	1:13:A:LEU:HD11	1:74:A:ILE:H	14	0.19
(1,874)	1:13:A:LEU:HD12	1:74:A:ILE:H	14	0.19
(1,874)	1:13:A:LEU:HD13	1:74:A:ILE:H	14	0.19
(1,874)	1:13:A:LEU:HD21	1:74:A:ILE:H	14	0.19
(1,874)	1:13:A:LEU:HD22	1:74:A:ILE:H	14	0.19
(1,874)	1:13:A:LEU:HD23	1:74:A:ILE:H	14	0.19
(1,848)	1:2:A:GLY:HA2	1:86:A:TYR:HA	7	0.19
(1,848)	1:2:A:GLY:HA3	1:86:A:TYR:HA	7	0.19
(1,686)	1:82:A:PHE:H	1:135:A:HIS:HA	6	0.19
(1,660)	1:17:A:ALA:HA	1:20:A:PHE:H	11	0.19
(1,586)	1:75:A:MET:H	1:168:A:ASP:H	12	0.19
(1,548)	1:26:A:GLY:H	1:27:A:SER:H	18	0.19
(1,506)	1:48:A:ASP:HA	1:51:A:ILE:H	1	0.19
(1,486)	1:172:A:LYS:H	1:172:A:LYS:HB3	12	0.19
(1,456)	1:158:A:GLU:HB3	1:159:A:ASN:H	1	0.19
(1,345)	1:109:A:PRO:HB2	1:110:A:LEU:H	12	0.19

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,308)	1:96:A:HIS:H	1:96:A:HIS:HB3	6	0.19
(1,308)	1:96:A:HIS:H	1:96:A:HIS:HB3	19	0.19
(1,304)	1:93:A:SER:H	1:93:A:SER:HB2	15	0.19
(1,304)	1:93:A:SER:H	1:93:A:SER:HB2	20	0.19
(1,206)	1:48:A:ASP:H	1:48:A:ASP:HB3	16	0.19
(1,81)	1:143:A:LEU:HA	1:170:A:VAL:HB	14	0.19
(1,81)	1:143:A:LEU:HA	1:170:A:VAL:HB	19	0.19
(1,13)	1:114:A:ASP:HB3	1:115:A:PHE:HD1	7	0.19
(1,13)	1:114:A:ASP:HB3	1:115:A:PHE:HD2	7	0.19
(1,1076)	1:150:A:ALA:H	1:164:A:VAL:HG11	3	0.18
(1,1076)	1:150:A:ALA:H	1:164:A:VAL:HG12	3	0.18
(1,1076)	1:150:A:ALA:H	1:164:A:VAL:HG13	3	0.18
(1,1076)	1:150:A:ALA:H	1:164:A:VAL:HG21	3	0.18
(1,1076)	1:150:A:ALA:H	1:164:A:VAL:HG22	3	0.18
(1,1076)	1:150:A:ALA:H	1:164:A:VAL:HG23	3	0.18
(1,1064)	1:145:A:TYR:HB2	1:168:A:ASP:HA	14	0.18
(1,1064)	1:145:A:TYR:HB3	1:168:A:ASP:HA	14	0.18
(1,1011)	1:109:A:PRO:HG2	1:110:A:LEU:H	9	0.18
(1,1011)	1:109:A:PRO:HG3	1:110:A:LEU:H	9	0.18
(1,986)	1:95:A:TRP:HD1	1:132:A:LEU:HD11	18	0.18
(1,986)	1:95:A:TRP:HD1	1:132:A:LEU:HD12	18	0.18
(1,986)	1:95:A:TRP:HD1	1:132:A:LEU:HD13	18	0.18
(1,986)	1:95:A:TRP:HD1	1:132:A:LEU:HD21	18	0.18
(1,986)	1:95:A:TRP:HD1	1:132:A:LEU:HD22	18	0.18
(1,986)	1:95:A:TRP:HD1	1:132:A:LEU:HD23	18	0.18
(1,983)	1:95:A:TRP:H	1:122:A:PRO:HB2	19	0.18
(1,983)	1:95:A:TRP:H	1:122:A:PRO:HB3	19	0.18
(1,872)	1:13:A:LEU:HB2	1:73:A:HIS:HE1	14	0.18
(1,872)	1:13:A:LEU:HB3	1:73:A:HIS:HE1	14	0.18
(1,818)	1:71:A:PHE:H	1:165:A:ILE:HG21	8	0.18
(1,818)	1:71:A:PHE:H	1:165:A:ILE:HG22	8	0.18
(1,818)	1:71:A:PHE:H	1:165:A:ILE:HG23	8	0.18
(1,729)	1:38:A:LYS:HB2	1:160:A:ALA:H	5	0.18
(1,712)	1:57:A:LEU:H	1:57:A:LEU:HG	1	0.18
(1,711)	1:23:A:LEU:HG	1:24:A:ASN:H	11	0.18
(1,635)	1:109:A:PRO:HA	1:113:A:ALA:H	13	0.18
(1,546)	1:20:A:PHE:H	1:21:A:LEU:H	17	0.18
(1,345)	1:109:A:PRO:HB2	1:110:A:LEU:H	17	0.18
(1,308)	1:96:A:HIS:H	1:96:A:HIS:HB3	20	0.18
(1,304)	1:93:A:SER:H	1:93:A:SER:HB2	11	0.18
(1,304)	1:93:A:SER:H	1:93:A:SER:HB2	16	0.18
(1,200)	1:39:A:LYS:HB2	1:40:A:GLY:H	8	0.18

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,200)	1:39:A:LYS:HB2	1:40:A:GLY:H	18	0.18
(1,194)	1:36:A:GLU:HB2	1:37:A:ALA:H	9	0.18
(1,114)	1:75:A:MET:HE1	1:80:A:HIS:HD2	20	0.18
(1,114)	1:75:A:MET:HE2	1:80:A:HIS:HD2	20	0.18
(1,114)	1:75:A:MET:HE3	1:80:A:HIS:HD2	20	0.18
(1,76)	1:92:A:THR:HB	1:123:A:HIS:HD2	18	0.18
(1,21)	1:81:A:THR:HG21	1:135:A:HIS:HE1	3	0.18
(1,21)	1:81:A:THR:HG22	1:135:A:HIS:HE1	3	0.18
(1,21)	1:81:A:THR:HG23	1:135:A:HIS:HE1	3	0.18
(1,19)	1:81:A:THR:HG21	1:135:A:HIS:HD2	4	0.18
(1,19)	1:81:A:THR:HG22	1:135:A:HIS:HD2	4	0.18
(1,19)	1:81:A:THR:HG23	1:135:A:HIS:HD2	4	0.18
(1,11)	1:98:A:TYR:HD1	1:149:A:LEU:HG	8	0.18
(1,11)	1:98:A:TYR:HD2	1:149:A:LEU:HG	8	0.18
(2,2)	1:30:A:TYR:HE1	1:34:A:SER:HB2	15	0.17
(2,2)	1:30:A:TYR:HE2	1:34:A:SER:HB2	15	0.17
(1,1076)	1:150:A:ALA:H	1:164:A:VAL:HG11	12	0.17
(1,1076)	1:150:A:ALA:H	1:164:A:VAL:HG12	12	0.17
(1,1076)	1:150:A:ALA:H	1:164:A:VAL:HG13	12	0.17
(1,1076)	1:150:A:ALA:H	1:164:A:VAL:HG21	12	0.17
(1,1076)	1:150:A:ALA:H	1:164:A:VAL:HG22	12	0.17
(1,1076)	1:150:A:ALA:H	1:164:A:VAL:HG23	12	0.17
(1,1065)	1:145:A:TYR:HD1	1:168:A:ASP:HB2	5	0.17
(1,1065)	1:145:A:TYR:HD1	1:168:A:ASP:HB3	5	0.17
(1,1065)	1:145:A:TYR:HD2	1:168:A:ASP:HB2	5	0.17
(1,1065)	1:145:A:TYR:HD2	1:168:A:ASP:HB3	5	0.17
(1,1065)	1:145:A:TYR:HD1	1:168:A:ASP:HB2	9	0.17
(1,1065)	1:145:A:TYR:HD1	1:168:A:ASP:HB3	9	0.17
(1,1065)	1:145:A:TYR:HD2	1:168:A:ASP:HB2	9	0.17
(1,1065)	1:145:A:TYR:HD2	1:168:A:ASP:HB3	9	0.17
(1,1002)	1:103:A:GLY:HA2	1:104:A:TRP:HD1	11	0.17
(1,1002)	1:103:A:GLY:HA3	1:104:A:TRP:HD1	11	0.17
(1,947)	1:70:A:TRP:HD1	1:164:A:VAL:HG11	3	0.17
(1,947)	1:70:A:TRP:HD1	1:164:A:VAL:HG12	3	0.17
(1,947)	1:70:A:TRP:HD1	1:164:A:VAL:HG13	3	0.17
(1,947)	1:70:A:TRP:HD1	1:164:A:VAL:HG21	3	0.17
(1,947)	1:70:A:TRP:HD1	1:164:A:VAL:HG22	3	0.17
(1,947)	1:70:A:TRP:HD1	1:164:A:VAL:HG23	3	0.17
(1,920)	1:47:A:ALA:HB1	1:56:A:GLY:HA2	10	0.17
(1,920)	1:47:A:ALA:HB1	1:56:A:GLY:HA3	10	0.17
(1,920)	1:47:A:ALA:HB2	1:56:A:GLY:HA2	10	0.17
(1,920)	1:47:A:ALA:HB2	1:56:A:GLY:HA3	10	0.17

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,920)	1:47:A:ALA:HB3	1:56:A:GLY:HA2	10	0.17
(1,920)	1:47:A:ALA:HB3	1:56:A:GLY:HA3	10	0.17
(1,872)	1:13:A:LEU:HB2	1:73:A:HIS:HE1	9	0.17
(1,872)	1:13:A:LEU:HB3	1:73:A:HIS:HE1	9	0.17
(1,861)	1:7:A:PRO:HB2	1:73:A:HIS:HD2	15	0.17
(1,861)	1:7:A:PRO:HB3	1:73:A:HIS:HD2	15	0.17
(1,818)	1:71:A:PHE:H	1:165:A:ILE:HG21	3	0.17
(1,818)	1:71:A:PHE:H	1:165:A:ILE:HG22	3	0.17
(1,818)	1:71:A:PHE:H	1:165:A:ILE:HG23	3	0.17
(1,750)	1:94:A:GLN:HG2	1:95:A:TRP:H	11	0.17
(1,749)	1:75:A:MET:H	1:167:A:VAL:HB	4	0.17
(1,749)	1:75:A:MET:H	1:167:A:VAL:HB	15	0.17
(1,675)	1:57:A:LEU:HB2	1:58:A:PHE:H	4	0.17
(1,654)	1:6:A:LYS:HA	1:8:A:GLY:H	9	0.17
(1,649)	1:11:A:ALA:HA	1:13:A:LEU:H	7	0.17
(1,551)	1:150:A:ALA:H	1:164:A:VAL:HA	13	0.17
(1,548)	1:26:A:GLY:H	1:27:A:SER:H	16	0.17
(1,517)	1:6:A:LYS:H	1:83:A:THR:H	16	0.17
(1,486)	1:172:A:LYS:H	1:172:A:LYS:HB3	13	0.17
(1,350)	1:114:A:ASP:H	1:114:A:ASP:HB3	11	0.17
(1,348)	1:112:A:ARG:HB3	1:113:A:ALA:H	11	0.17
(1,304)	1:93:A:SER:H	1:93:A:SER:HB2	7	0.17
(1,224)	1:57:A:LEU:HA	1:58:A:PHE:H	11	0.17
(1,206)	1:48:A:ASP:H	1:48:A:ASP:HB3	20	0.17
(1,194)	1:36:A:GLU:HB2	1:37:A:ALA:H	16	0.17
(1,110)	1:93:A:SER:HB2	1:155:A:ALA:HB1	4	0.17
(1,110)	1:93:A:SER:HB2	1:155:A:ALA:HB2	4	0.17
(1,110)	1:93:A:SER:HB2	1:155:A:ALA:HB3	4	0.17
(1,78)	1:149:A:LEU:HA	1:164:A:VAL:HB	11	0.17
(1,22)	1:92:A:THR:HG21	1:123:A:HIS:HD2	9	0.17
(1,22)	1:92:A:THR:HG22	1:123:A:HIS:HD2	9	0.17
(1,22)	1:92:A:THR:HG23	1:123:A:HIS:HD2	9	0.17
(1,1033)	1:121:A:VAL:HG11	1:134:A:HIS:HD2	2	0.16
(1,1033)	1:121:A:VAL:HG12	1:134:A:HIS:HD2	2	0.16
(1,1033)	1:121:A:VAL:HG13	1:134:A:HIS:HD2	2	0.16
(1,1033)	1:121:A:VAL:HG21	1:134:A:HIS:HD2	2	0.16
(1,1033)	1:121:A:VAL:HG22	1:134:A:HIS:HD2	2	0.16
(1,1033)	1:121:A:VAL:HG23	1:134:A:HIS:HD2	2	0.16
(1,1011)	1:109:A:PRO:HG2	1:110:A:LEU:H	1	0.16
(1,1011)	1:109:A:PRO:HG3	1:110:A:LEU:H	1	0.16
(1,1002)	1:103:A:GLY:HA2	1:104:A:TRP:HD1	17	0.16
(1,1002)	1:103:A:GLY:HA3	1:104:A:TRP:HD1	17	0.16

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,987)	1:95:A:TRP:HZ3	1:132:A:LEU:HD11	1	0.16
(1,987)	1:95:A:TRP:HZ3	1:132:A:LEU:HD12	1	0.16
(1,987)	1:95:A:TRP:HZ3	1:132:A:LEU:HD13	1	0.16
(1,987)	1:95:A:TRP:HZ3	1:132:A:LEU:HD21	1	0.16
(1,987)	1:95:A:TRP:HZ3	1:132:A:LEU:HD22	1	0.16
(1,987)	1:95:A:TRP:HZ3	1:132:A:LEU:HD23	1	0.16
(1,859)	1:6:A:LYS:HG2	1:8:A:GLY:H	19	0.16
(1,859)	1:6:A:LYS:HG3	1:8:A:GLY:H	19	0.16
(1,750)	1:94:A:GLN:HG2	1:95:A:TRP:H	9	0.16
(1,746)	1:150:A:ALA:H	1:163:A:GLN:HB3	1	0.16
(1,729)	1:38:A:LYS:HB2	1:160:A:ALA:H	4	0.16
(1,724)	1:95:A:TRP:H	1:95:A:TRP:HD1	6	0.16
(1,723)	1:86:A:TYR:H	1:132:A:LEU:HG	9	0.16
(1,656)	1:112:A:ARG:HB2	1:114:A:ASP:H	15	0.16
(1,649)	1:11:A:ALA:HA	1:13:A:LEU:H	9	0.16
(1,606)	1:38:A:LYS:HA	1:39:A:LYS:H	19	0.16
(1,563)	1:68:A:ASN:HA	1:70:A:TRP:H	4	0.16
(1,548)	1:26:A:GLY:H	1:27:A:SER:H	2	0.16
(1,457)	1:158:A:GLU:HB2	1:159:A:ASN:H	9	0.16
(1,456)	1:158:A:GLU:HB3	1:159:A:ASN:H	20	0.16
(1,255)	1:69:A:ARG:HB2	1:70:A:TRP:H	14	0.16
(1,194)	1:36:A:GLU:HB2	1:37:A:ALA:H	19	0.16
(1,177)	1:28:A:VAL:H	1:28:A:VAL:HB	5	0.16
(1,110)	1:93:A:SER:HB2	1:155:A:ALA:HB1	14	0.16
(1,110)	1:93:A:SER:HB2	1:155:A:ALA:HB2	14	0.16
(1,110)	1:93:A:SER:HB2	1:155:A:ALA:HB3	14	0.16
(2,72)	1:143:A:LEU:HD11	1:172:A:LYS:H	9	0.15
(2,72)	1:143:A:LEU:HD12	1:172:A:LYS:H	9	0.15
(2,72)	1:143:A:LEU:HD13	1:172:A:LYS:H	9	0.15
(2,69)	1:143:A:LEU:HD21	1:172:A:LYS:H	13	0.15
(2,69)	1:143:A:LEU:HD22	1:172:A:LYS:H	13	0.15
(2,69)	1:143:A:LEU:HD23	1:172:A:LYS:H	13	0.15
(2,69)	1:143:A:LEU:HD21	1:172:A:LYS:H	14	0.15
(2,69)	1:143:A:LEU:HD22	1:172:A:LYS:H	14	0.15
(2,69)	1:143:A:LEU:HD23	1:172:A:LYS:H	14	0.15
(2,2)	1:30:A:TYR:HE1	1:34:A:SER:HB2	18	0.15
(2,2)	1:30:A:TYR:HE2	1:34:A:SER:HB2	18	0.15
(1,1064)	1:145:A:TYR:HB2	1:168:A:ASP:HA	20	0.15
(1,1064)	1:145:A:TYR:HB3	1:168:A:ASP:HA	20	0.15
(1,1011)	1:109:A:PRO:HG2	1:110:A:LEU:H	16	0.15
(1,1011)	1:109:A:PRO:HG3	1:110:A:LEU:H	16	0.15
(1,1002)	1:103:A:GLY:HA2	1:104:A:TRP:HD1	10	0.15

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1002)	1:103:A:GLY:HA3	1:104:A:TRP:HD1	10	0.15
(1,861)	1:7:A:PRO:HB2	1:73:A:HIS:HD2	11	0.15
(1,861)	1:7:A:PRO:HB3	1:73:A:HIS:HD2	11	0.15
(1,710)	1:23:A:LEU:H	1:23:A:LEU:HG	6	0.15
(1,676)	1:57:A:LEU:HB2	1:59:A:GLY:H	5	0.15
(1,676)	1:57:A:LEU:HB2	1:59:A:GLY:H	11	0.15
(1,669)	1:61:A:ILE:HA	1:64:A:GLN:H	7	0.15
(1,656)	1:112:A:ARG:HB2	1:114:A:ASP:H	2	0.15
(1,654)	1:6:A:LYS:HA	1:8:A:GLY:H	7	0.15
(1,654)	1:6:A:LYS:HA	1:8:A:GLY:H	8	0.15
(1,635)	1:109:A:PRO:HA	1:113:A:ALA:H	20	0.15
(1,626)	1:48:A:ASP:HA	1:50:A:GLN:H	9	0.15
(1,580)	1:100:A:THR:H	1:148:A:ILE:HA	2	0.15
(1,548)	1:26:A:GLY:H	1:27:A:SER:H	11	0.15
(1,456)	1:158:A:GLU:HB3	1:159:A:ASN:H	18	0.15
(1,396)	1:134:A:HIS:HB2	1:135:A:HIS:H	11	0.15
(1,374)	1:124:A:ASP:HB2	1:125:A:GLY:H	12	0.15
(1,374)	1:124:A:ASP:HB2	1:125:A:GLY:H	13	0.15
(1,345)	1:109:A:PRO:HB2	1:110:A:LEU:H	1	0.15
(1,343)	1:107:A:ASP:HB2	1:108:A:LYS:H	19	0.15
(1,114)	1:75:A:MET:HE1	1:80:A:HIS:HD2	1	0.15
(1,114)	1:75:A:MET:HE2	1:80:A:HIS:HD2	1	0.15
(1,114)	1:75:A:MET:HE3	1:80:A:HIS:HD2	1	0.15
(1,81)	1:143:A:LEU:HA	1:170:A:VAL:HB	10	0.15
(1,18)	1:80:A:HIS:HD2	1:138:A:ILE:HD11	17	0.15
(1,18)	1:80:A:HIS:HD2	1:138:A:ILE:HD12	17	0.15
(1,18)	1:80:A:HIS:HD2	1:138:A:ILE:HD13	17	0.15
(1,7)	1:69:A:ARG:HB2	1:70:A:TRP:HD1	18	0.15
(2,100)	1:121:A:VAL:HG11	1:135:A:HIS:H	15	0.14
(2,100)	1:121:A:VAL:HG12	1:135:A:HIS:H	15	0.14
(2,100)	1:121:A:VAL:HG13	1:135:A:HIS:H	15	0.14
(2,100)	1:121:A:VAL:HG21	1:135:A:HIS:H	15	0.14
(2,100)	1:121:A:VAL:HG22	1:135:A:HIS:H	15	0.14
(2,100)	1:121:A:VAL:HG23	1:135:A:HIS:H	15	0.14
(1,1104)	1:172:A:LYS:H	1:172:A:LYS:HD2	16	0.14
(1,1104)	1:172:A:LYS:H	1:172:A:LYS:HD3	16	0.14
(1,1104)	1:172:A:LYS:H	1:172:A:LYS:HD2	18	0.14
(1,1104)	1:172:A:LYS:H	1:172:A:LYS:HD3	18	0.14
(1,1051)	1:136:A:ILE:HG12	1:148:A:ILE:HD11	7	0.14
(1,1051)	1:136:A:ILE:HG12	1:148:A:ILE:HD12	7	0.14
(1,1051)	1:136:A:ILE:HG12	1:148:A:ILE:HD13	7	0.14
(1,1051)	1:136:A:ILE:HG13	1:148:A:ILE:HD11	7	0.14

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1051)	1:136:A:ILE:HG13	1:148:A:ILE:HD12	7	0.14
(1,1051)	1:136:A:ILE:HG13	1:148:A:ILE:HD13	7	0.14
(1,1051)	1:136:A:ILE:HG12	1:148:A:ILE:HD11	8	0.14
(1,1051)	1:136:A:ILE:HG12	1:148:A:ILE:HD12	8	0.14
(1,1051)	1:136:A:ILE:HG12	1:148:A:ILE:HD13	8	0.14
(1,1051)	1:136:A:ILE:HG13	1:148:A:ILE:HD11	8	0.14
(1,1051)	1:136:A:ILE:HG13	1:148:A:ILE:HD12	8	0.14
(1,1051)	1:136:A:ILE:HG13	1:148:A:ILE:HD13	8	0.14
(1,1005)	1:104:A:TRP:HH2	1:110:A:LEU:HD11	11	0.14
(1,1005)	1:104:A:TRP:HH2	1:110:A:LEU:HD12	11	0.14
(1,1005)	1:104:A:TRP:HH2	1:110:A:LEU:HD13	11	0.14
(1,1005)	1:104:A:TRP:HH2	1:110:A:LEU:HD21	11	0.14
(1,1005)	1:104:A:TRP:HH2	1:110:A:LEU:HD22	11	0.14
(1,1005)	1:104:A:TRP:HH2	1:110:A:LEU:HD23	11	0.14
(1,990)	1:96:A:HIS:HE1	1:151:A:VAL:HG11	6	0.14
(1,990)	1:96:A:HIS:HE1	1:151:A:VAL:HG12	6	0.14
(1,990)	1:96:A:HIS:HE1	1:151:A:VAL:HG13	6	0.14
(1,990)	1:96:A:HIS:HE1	1:151:A:VAL:HG21	6	0.14
(1,990)	1:96:A:HIS:HE1	1:151:A:VAL:HG22	6	0.14
(1,990)	1:96:A:HIS:HE1	1:151:A:VAL:HG23	6	0.14
(1,987)	1:95:A:TRP:HZ3	1:132:A:LEU:HD11	13	0.14
(1,987)	1:95:A:TRP:HZ3	1:132:A:LEU:HD12	13	0.14
(1,987)	1:95:A:TRP:HZ3	1:132:A:LEU:HD13	13	0.14
(1,987)	1:95:A:TRP:HZ3	1:132:A:LEU:HD21	13	0.14
(1,987)	1:95:A:TRP:HZ3	1:132:A:LEU:HD22	13	0.14
(1,987)	1:95:A:TRP:HZ3	1:132:A:LEU:HD23	13	0.14
(1,969)	1:81:A:THR:HG21	1:133:A:SER:HB2	10	0.14
(1,969)	1:81:A:THR:HG21	1:133:A:SER:HB3	10	0.14
(1,969)	1:81:A:THR:HG22	1:133:A:SER:HB2	10	0.14
(1,969)	1:81:A:THR:HG22	1:133:A:SER:HB3	10	0.14
(1,969)	1:81:A:THR:HG23	1:133:A:SER:HB2	10	0.14
(1,969)	1:81:A:THR:HG23	1:133:A:SER:HB3	10	0.14
(1,957)	1:75:A:MET:HB2	1:80:A:HIS:HE1	11	0.14
(1,957)	1:75:A:MET:HB3	1:80:A:HIS:HE1	11	0.14
(1,957)	1:75:A:MET:HB2	1:80:A:HIS:HE1	12	0.14
(1,957)	1:75:A:MET:HB3	1:80:A:HIS:HE1	12	0.14
(1,749)	1:75:A:MET:H	1:167:A:VAL:HB	1	0.14
(1,676)	1:57:A:LEU:HB2	1:59:A:GLY:H	7	0.14
(1,631)	1:58:A:PHE:HA	1:61:A:ILE:H	13	0.14
(1,596)	1:154:A:VAL:H	1:160:A:ALA:HA	8	0.14
(1,563)	1:68:A:ASN:HA	1:70:A:TRP:H	8	0.14
(1,563)	1:68:A:ASN:HA	1:70:A:TRP:H	20	0.14

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,552)	1:151:A:VAL:HA	1:163:A:GLN:H	10	0.14
(1,530)	1:3:A:PHE:H	1:86:A:TYR:HA	20	0.14
(1,518)	1:99:A:ILE:H	1:117:A:LEU:HA	1	0.14
(1,396)	1:134:A:HIS:HB2	1:135:A:HIS:H	4	0.14
(1,396)	1:134:A:HIS:HB2	1:135:A:HIS:H	10	0.14
(1,374)	1:124:A:ASP:HB2	1:125:A:GLY:H	11	0.14
(1,348)	1:112:A:ARG:HB3	1:113:A:ALA:H	4	0.14
(1,345)	1:109:A:PRO:HB2	1:110:A:LEU:H	6	0.14
(1,266)	1:75:A:MET:H	1:75:A:MET:HB3	4	0.14
(1,266)	1:75:A:MET:H	1:75:A:MET:HB3	15	0.14
(1,262)	1:72:A:LYS:HB2	1:73:A:HIS:H	1	0.14
(1,255)	1:69:A:ARG:HB2	1:70:A:TRP:H	5	0.14
(1,224)	1:57:A:LEU:HA	1:58:A:PHE:H	18	0.14
(1,210)	1:48:A:ASP:HB3	1:49:A:GLY:H	19	0.14
(1,74)	1:134:A:HIS:HA	1:134:A:HIS:HD2	3	0.14
(2,81)	1:33:A:GLN:HG2	1:86:A:TYR:HE1	12	0.13
(2,81)	1:33:A:GLN:HG2	1:86:A:TYR:HE2	12	0.13
(2,81)	1:33:A:GLN:HG3	1:86:A:TYR:HE1	12	0.13
(2,81)	1:33:A:GLN:HG3	1:86:A:TYR:HE2	12	0.13
(2,81)	1:33:A:GLN:HG2	1:86:A:TYR:HE1	16	0.13
(2,81)	1:33:A:GLN:HG2	1:86:A:TYR:HE2	16	0.13
(2,81)	1:33:A:GLN:HG3	1:86:A:TYR:HE1	16	0.13
(2,81)	1:33:A:GLN:HG3	1:86:A:TYR:HE2	16	0.13
(2,3)	1:58:A:PHE:HE1	1:110:A:LEU:HG	10	0.13
(2,3)	1:58:A:PHE:HE2	1:110:A:LEU:HG	10	0.13
(1,1033)	1:121:A:VAL:HG11	1:134:A:HIS:HD2	20	0.13
(1,1033)	1:121:A:VAL:HG12	1:134:A:HIS:HD2	20	0.13
(1,1033)	1:121:A:VAL:HG13	1:134:A:HIS:HD2	20	0.13
(1,1033)	1:121:A:VAL:HG21	1:134:A:HIS:HD2	20	0.13
(1,1033)	1:121:A:VAL:HG22	1:134:A:HIS:HD2	20	0.13
(1,1033)	1:121:A:VAL:HG23	1:134:A:HIS:HD2	20	0.13
(1,1027)	1:117:A:LEU:HB2	1:120:A:ALA:HB1	9	0.13
(1,1027)	1:117:A:LEU:HB2	1:120:A:ALA:HB2	9	0.13
(1,1027)	1:117:A:LEU:HB2	1:120:A:ALA:HB3	9	0.13
(1,1027)	1:117:A:LEU:HB3	1:120:A:ALA:HB1	9	0.13
(1,1027)	1:117:A:LEU:HB3	1:120:A:ALA:HB2	9	0.13
(1,1027)	1:117:A:LEU:HB3	1:120:A:ALA:HB3	9	0.13
(1,981)	1:94:A:GLN:HG2	1:96:A:HIS:HD2	15	0.13
(1,981)	1:94:A:GLN:HG3	1:96:A:HIS:HD2	15	0.13
(1,969)	1:81:A:THR:HG21	1:133:A:SER:HB2	6	0.13
(1,969)	1:81:A:THR:HG21	1:133:A:SER:HB3	6	0.13
(1,969)	1:81:A:THR:HG22	1:133:A:SER:HB2	6	0.13

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,969)	1:81:A:THR:HG22	1:133:A:SER:HB3	6	0.13
(1,969)	1:81:A:THR:HG23	1:133:A:SER:HB2	6	0.13
(1,969)	1:81:A:THR:HG23	1:133:A:SER:HB3	6	0.13
(1,927)	1:54:A:ALA:HB1	1:60:A:GLY:HA2	14	0.13
(1,927)	1:54:A:ALA:HB1	1:60:A:GLY:HA3	14	0.13
(1,927)	1:54:A:ALA:HB2	1:60:A:GLY:HA2	14	0.13
(1,927)	1:54:A:ALA:HB2	1:60:A:GLY:HA3	14	0.13
(1,927)	1:54:A:ALA:HB3	1:60:A:GLY:HA2	14	0.13
(1,927)	1:54:A:ALA:HB3	1:60:A:GLY:HA3	14	0.13
(1,880)	1:16:A:GLU:HB2	1:22:A:ASN:H	6	0.13
(1,880)	1:16:A:GLU:HB3	1:22:A:ASN:H	6	0.13
(1,880)	1:16:A:GLU:HB2	1:22:A:ASN:H	7	0.13
(1,880)	1:16:A:GLU:HB3	1:22:A:ASN:H	7	0.13
(1,879)	1:16:A:GLU:HB2	1:21:A:LEU:H	12	0.13
(1,879)	1:16:A:GLU:HB3	1:21:A:LEU:H	12	0.13
(1,872)	1:13:A:LEU:HB2	1:73:A:HIS:HE1	3	0.13
(1,872)	1:13:A:LEU:HB3	1:73:A:HIS:HE1	3	0.13
(1,861)	1:7:A:PRO:HB2	1:73:A:HIS:HD2	12	0.13
(1,861)	1:7:A:PRO:HB3	1:73:A:HIS:HD2	12	0.13
(1,729)	1:38:A:LYS:HB2	1:160:A:ALA:H	14	0.13
(1,724)	1:95:A:TRP:H	1:95:A:TRP:HD1	18	0.13
(1,585)	1:76:A:THR:HA	1:170:A:VAL:H	19	0.13
(1,562)	1:69:A:ARG:H	1:70:A:TRP:H	12	0.13
(1,551)	1:150:A:ALA:H	1:164:A:VAL:HA	4	0.13
(1,546)	1:20:A:PHE:H	1:21:A:LEU:H	12	0.13
(1,532)	1:24:A:ASN:H	1:25:A:CYS:H	8	0.13
(1,459)	1:159:A:ASN:HB2	1:160:A:ALA:H	4	0.13
(1,456)	1:158:A:GLU:HB3	1:159:A:ASN:H	9	0.13
(1,396)	1:134:A:HIS:HB2	1:135:A:HIS:H	8	0.13
(1,348)	1:112:A:ARG:HB3	1:113:A:ALA:H	10	0.13
(1,320)	1:98:A:TYR:HB2	1:99:A:ILE:H	14	0.13
(1,308)	1:96:A:HIS:H	1:96:A:HIS:HB3	17	0.13
(1,304)	1:93:A:SER:H	1:93:A:SER:HB2	1	0.13
(1,304)	1:93:A:SER:H	1:93:A:SER:HB2	3	0.13
(1,262)	1:72:A:LYS:HB2	1:73:A:HIS:H	8	0.13
(1,194)	1:36:A:GLU:HB2	1:37:A:ALA:H	13	0.13
(1,68)	1:11:A:ALA:HA	1:14:A:CYS:HB2	5	0.13
(1,22)	1:92:A:THR:HG21	1:123:A:HIS:HD2	18	0.13
(1,22)	1:92:A:THR:HG22	1:123:A:HIS:HD2	18	0.13
(1,22)	1:92:A:THR:HG23	1:123:A:HIS:HD2	18	0.13
(1,12)	1:3:A:PHE:HE1	1:87:A:THR:HB	13	0.13
(1,12)	1:3:A:PHE:HE2	1:87:A:THR:HB	13	0.13

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,9)	1:97:A:TYR:HE1	1:134:A:HIS:HB2	7	0.13
(1,9)	1:97:A:TYR:HE2	1:134:A:HIS:HB2	7	0.13
(1,7)	1:69:A:ARG:HB2	1:70:A:TRP:HD1	6	0.13
(2,69)	1:143:A:LEU:HD21	1:172:A:LYS:H	1	0.12
(2,69)	1:143:A:LEU:HD22	1:172:A:LYS:H	1	0.12
(2,69)	1:143:A:LEU:HD23	1:172:A:LYS:H	1	0.12
(1,1076)	1:150:A:ALA:H	1:164:A:VAL:HG11	8	0.12
(1,1076)	1:150:A:ALA:H	1:164:A:VAL:HG12	8	0.12
(1,1076)	1:150:A:ALA:H	1:164:A:VAL:HG13	8	0.12
(1,1076)	1:150:A:ALA:H	1:164:A:VAL:HG21	8	0.12
(1,1076)	1:150:A:ALA:H	1:164:A:VAL:HG22	8	0.12
(1,1076)	1:150:A:ALA:H	1:164:A:VAL:HG23	8	0.12
(1,1032)	1:121:A:VAL:HG11	1:134:A:HIS:HB2	6	0.12
(1,1032)	1:121:A:VAL:HG12	1:134:A:HIS:HB2	6	0.12
(1,1032)	1:121:A:VAL:HG13	1:134:A:HIS:HB2	6	0.12
(1,1032)	1:121:A:VAL:HG21	1:134:A:HIS:HB2	6	0.12
(1,1032)	1:121:A:VAL:HG22	1:134:A:HIS:HB2	6	0.12
(1,1032)	1:121:A:VAL:HG23	1:134:A:HIS:HB2	6	0.12
(1,1032)	1:121:A:VAL:HG11	1:134:A:HIS:HB2	17	0.12
(1,1032)	1:121:A:VAL:HG12	1:134:A:HIS:HB2	17	0.12
(1,1032)	1:121:A:VAL:HG13	1:134:A:HIS:HB2	17	0.12
(1,1032)	1:121:A:VAL:HG21	1:134:A:HIS:HB2	17	0.12
(1,1032)	1:121:A:VAL:HG22	1:134:A:HIS:HB2	17	0.12
(1,1032)	1:121:A:VAL:HG23	1:134:A:HIS:HB2	17	0.12
(1,1011)	1:109:A:PRO:HG2	1:110:A:LEU:H	11	0.12
(1,1011)	1:109:A:PRO:HG3	1:110:A:LEU:H	11	0.12
(1,988)	1:96:A:HIS:HA	1:121:A:VAL:HG11	9	0.12
(1,988)	1:96:A:HIS:HA	1:121:A:VAL:HG12	9	0.12
(1,988)	1:96:A:HIS:HA	1:121:A:VAL:HG13	9	0.12
(1,988)	1:96:A:HIS:HA	1:121:A:VAL:HG21	9	0.12
(1,988)	1:96:A:HIS:HA	1:121:A:VAL:HG22	9	0.12
(1,988)	1:96:A:HIS:HA	1:121:A:VAL:HG23	9	0.12
(1,987)	1:95:A:TRP:HZ3	1:132:A:LEU:HD11	4	0.12
(1,987)	1:95:A:TRP:HZ3	1:132:A:LEU:HD12	4	0.12
(1,987)	1:95:A:TRP:HZ3	1:132:A:LEU:HD13	4	0.12
(1,987)	1:95:A:TRP:HZ3	1:132:A:LEU:HD21	4	0.12
(1,987)	1:95:A:TRP:HZ3	1:132:A:LEU:HD22	4	0.12
(1,987)	1:95:A:TRP:HZ3	1:132:A:LEU:HD23	4	0.12
(1,957)	1:75:A:MET:HB2	1:80:A:HIS:HE1	1	0.12
(1,957)	1:75:A:MET:HB3	1:80:A:HIS:HE1	1	0.12
(1,920)	1:47:A:ALA:HB1	1:56:A:GLY:HA2	16	0.12
(1,920)	1:47:A:ALA:HB1	1:56:A:GLY:HA3	16	0.12

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,920)	1:47:A:ALA:HB2	1:56:A:GLY:HA2	16	0.12
(1,920)	1:47:A:ALA:HB2	1:56:A:GLY:HA3	16	0.12
(1,920)	1:47:A:ALA:HB3	1:56:A:GLY:HA2	16	0.12
(1,920)	1:47:A:ALA:HB3	1:56:A:GLY:HA3	16	0.12
(1,751)	1:109:A:PRO:HD3	1:110:A:LEU:H	4	0.12
(1,750)	1:94:A:GLN:HG2	1:95:A:TRP:H	5	0.12
(1,723)	1:86:A:TYR:H	1:132:A:LEU:HG	2	0.12
(1,673)	1:57:A:LEU:HA	1:59:A:GLY:H	14	0.12
(1,654)	1:6:A:LYS:HA	1:8:A:GLY:H	11	0.12
(1,641)	1:155:A:ALA:HA	1:157:A:THR:H	14	0.12
(1,238)	1:64:A:GLN:HA	1:65:A:GLN:H	12	0.12
(1,157)	1:20:A:PHE:H	1:20:A:PHE:HB3	13	0.12
(1,9)	1:97:A:TYR:HE1	1:134:A:HIS:HB2	6	0.12
(1,9)	1:97:A:TYR:HE2	1:134:A:HIS:HB2	6	0.12
(2,61)	1:80:A:HIS:HD2	1:81:A:THR:H	3	0.11
(2,2)	1:30:A:TYR:HE1	1:34:A:SER:HB2	5	0.11
(2,2)	1:30:A:TYR:HE2	1:34:A:SER:HB2	5	0.11
(1,1051)	1:136:A:ILE:HG12	1:148:A:ILE:HD11	20	0.11
(1,1051)	1:136:A:ILE:HG12	1:148:A:ILE:HD12	20	0.11
(1,1051)	1:136:A:ILE:HG12	1:148:A:ILE:HD13	20	0.11
(1,1051)	1:136:A:ILE:HG13	1:148:A:ILE:HD11	20	0.11
(1,1051)	1:136:A:ILE:HG13	1:148:A:ILE:HD12	20	0.11
(1,1051)	1:136:A:ILE:HG13	1:148:A:ILE:HD13	20	0.11
(1,1027)	1:117:A:LEU:HB2	1:120:A:ALA:HB1	10	0.11
(1,1027)	1:117:A:LEU:HB2	1:120:A:ALA:HB2	10	0.11
(1,1027)	1:117:A:LEU:HB2	1:120:A:ALA:HB3	10	0.11
(1,1027)	1:117:A:LEU:HB3	1:120:A:ALA:HB1	10	0.11
(1,1027)	1:117:A:LEU:HB3	1:120:A:ALA:HB2	10	0.11
(1,1027)	1:117:A:LEU:HB3	1:120:A:ALA:HB3	10	0.11
(1,1011)	1:109:A:PRO:HG2	1:110:A:LEU:H	13	0.11
(1,1011)	1:109:A:PRO:HG3	1:110:A:LEU:H	13	0.11
(1,872)	1:13:A:LEU:HB2	1:73:A:HIS:HE1	13	0.11
(1,872)	1:13:A:LEU:HB3	1:73:A:HIS:HE1	13	0.11
(1,859)	1:6:A:LYS:HG2	1:8:A:GLY:H	17	0.11
(1,859)	1:6:A:LYS:HG3	1:8:A:GLY:H	17	0.11
(1,750)	1:94:A:GLN:HG2	1:95:A:TRP:H	18	0.11
(1,654)	1:6:A:LYS:HA	1:8:A:GLY:H	4	0.11
(1,578)	1:39:A:LYS:H	1:159:A:ASN:HA	10	0.11
(1,417)	1:142:A:ARG:HB3	1:143:A:LEU:H	16	0.11
(1,374)	1:124:A:ASP:HB2	1:125:A:GLY:H	10	0.11
(1,304)	1:93:A:SER:H	1:93:A:SER:HB2	19	0.11
(1,255)	1:69:A:ARG:HB2	1:70:A:TRP:H	18	0.11

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,238)	1:64:A:GLN:HA	1:65:A:GLN:H	14	0.11
(1,224)	1:57:A:LEU:HA	1:58:A:PHE:H	6	0.11
(1,194)	1:36:A:GLU:HB2	1:37:A:ALA:H	5	0.11
(1,157)	1:20:A:PHE:H	1:20:A:PHE:HB3	15	0.11
(1,136)	1:14:A:CYS:H	1:14:A:CYS:HB3	12	0.11
(1,73)	1:62:A:LEU:HA	1:62:A:LEU:HG	16	0.11
(2,14)	1:61:A:ILE:HD11	1:145:A:TYR:HD1	20	0.1
(2,14)	1:61:A:ILE:HD11	1:145:A:TYR:HD2	20	0.1
(2,14)	1:61:A:ILE:HD12	1:145:A:TYR:HD1	20	0.1
(2,14)	1:61:A:ILE:HD12	1:145:A:TYR:HD2	20	0.1
(2,14)	1:61:A:ILE:HD13	1:145:A:TYR:HD1	20	0.1
(2,14)	1:61:A:ILE:HD13	1:145:A:TYR:HD2	20	0.1
(1,911)	1:41:A:PHE:HD1	1:43:A:HIS:HB2	20	0.1
(1,911)	1:41:A:PHE:HD1	1:43:A:HIS:HB3	20	0.1
(1,911)	1:41:A:PHE:HD2	1:43:A:HIS:HB2	20	0.1
(1,911)	1:41:A:PHE:HD2	1:43:A:HIS:HB3	20	0.1
(1,861)	1:7:A:PRO:HB2	1:73:A:HIS:HD2	2	0.1
(1,861)	1:7:A:PRO:HB3	1:73:A:HIS:HD2	2	0.1
(1,666)	1:55:A:GLY:H	1:57:A:LEU:H	11	0.1
(1,456)	1:158:A:GLU:HB3	1:159:A:ASN:H	8	0.1
(1,348)	1:112:A:ARG:HB3	1:113:A:ALA:H	12	0.1
(1,343)	1:107:A:ASP:HB2	1:108:A:LYS:H	13	0.1

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

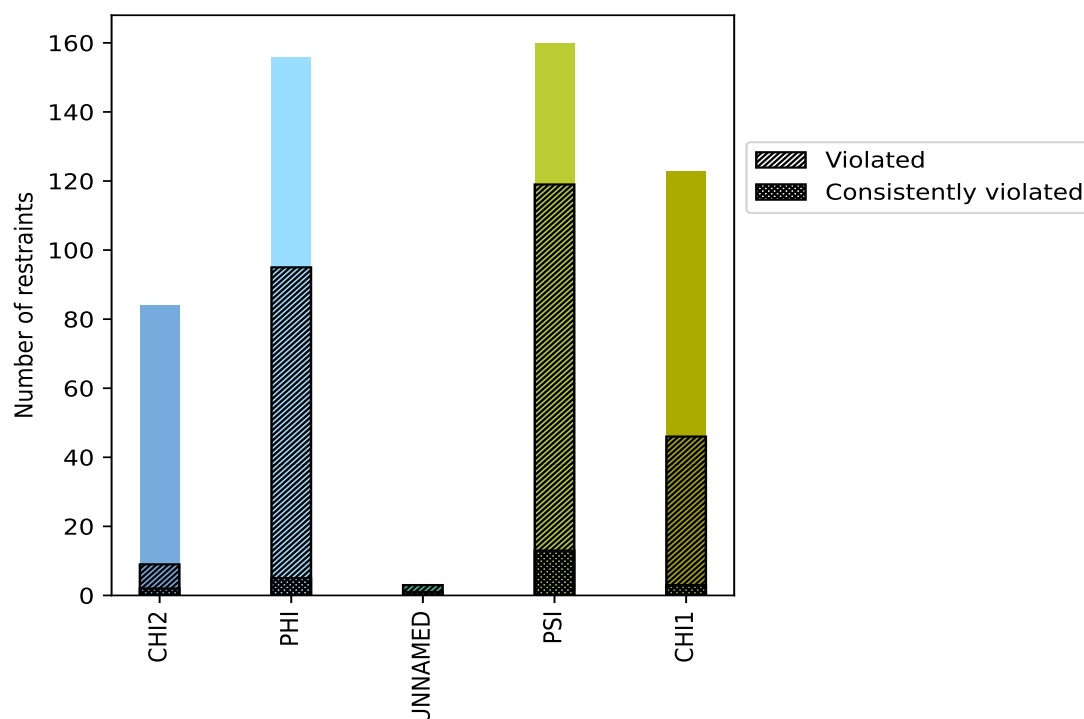
10.1 Summary of dihedral-angle violations [i](#)

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
CHI2	84	16.0	9	10.7	1.7	2	2.4	0.4
PHI	156	29.7	95	60.9	18.1	5	3.2	1.0
UNNAMED	3	0.6	3	100.0	0.6	1	33.3	0.2
PSI	160	30.4	119	74.4	22.6	13	8.1	2.5
CHI1	123	23.4	46	37.4	8.7	3	2.4	0.6
Total	526	100.0	272	51.7	51.7	24	4.6	4.6

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](#)



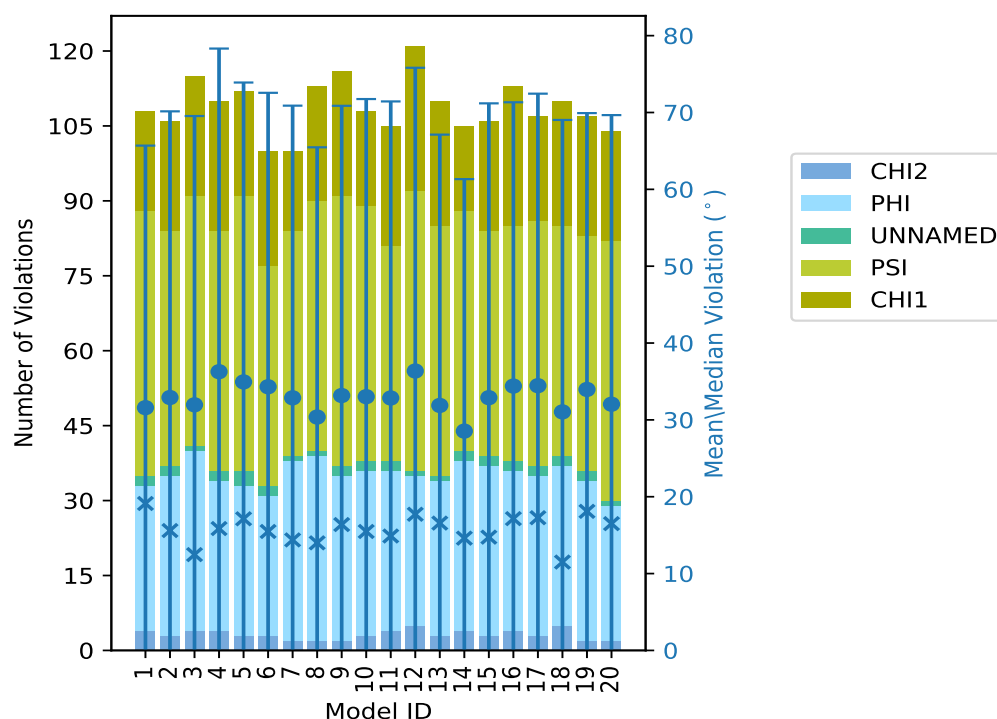
Violated and consistently violated restraints are shown using different hatch patterns in their respective categories

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
	CHI2	PHI	UNNAMED	PSI	CHI1	Total				
1	4	29	2	53	20	108	31.59	141.31	34.1	19.12
2	3	32	2	47	22	106	32.91	152.78	37.24	15.6
3	4	36	1	50	24	115	31.96	150.38	37.58	12.47
4	4	30	2	48	26	110	36.27	154.41	42.05	15.86
5	3	30	3	55	21	112	34.94	151.56	38.96	17.13
6	3	28	2	44	23	100	34.31	144.3	38.25	15.48
7	2	36	1	45	16	100	32.87	152.32	38.02	14.38
8	2	37	1	50	23	113	30.37	158.51	35.1	14.0
9	2	33	2	54	25	116	33.17	153.95	37.7	16.38
10	3	33	2	51	19	108	33.02	147.41	38.73	15.48
11	4	32	2	43	24	105	32.85	154.77	38.59	14.89
12	5	30	1	56	29	121	36.36	160.06	39.46	17.72
13	3	31	1	50	25	110	31.88	131.95	35.24	16.57
14	4	34	2	48	17	105	28.54	133.22	32.79	14.61
15	3	34	2	45	22	106	32.89	151.86	38.3	14.74
16	4	32	2	47	28	113	34.4	147.5	36.93	17.15
17	3	32	2	49	21	107	34.45	155.92	38.0	17.27
18	5	32	2	46	25	110	31.04	148.09	37.99	11.5
19	2	32	2	47	24	107	33.96	136.71	35.96	18.1
20	2	27	1	52	22	104	32.04	155.19	37.62	16.5

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	
CHI2	PHI	UNNAMED	PSI	CHI1	Total	Count ¹	%
3	16	0	15	4	38	1	5.0
1	13	0	13	4	31	2	10.0
1	12	1	9	2	25	3	15.0
0	7	0	10	4	21	4	20.0
0	5	0	9	3	17	5	25.0
0	5	0	8	2	15	6	30.0
1	5	0	3	1	10	7	35.0
0	3	0	3	2	8	8	40.0
0	5	0	4	2	11	9	45.0
1	2	0	4	1	8	10	50.0
0	1	0	7	0	8	11	55.0

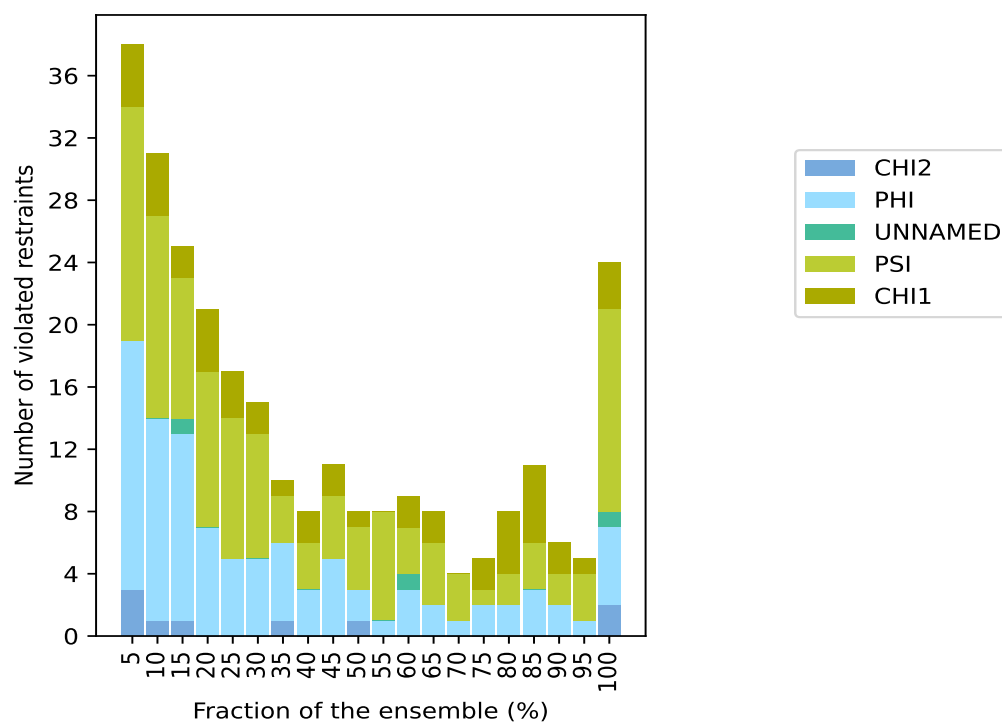
Continued on next page...

Continued from previous page...

Number of violated restraints						Fraction of the ensemble	
CHI2	PHI	UNNAMED	PSI	CHI1	Total	Count ¹	%
0	3	1	3	2	9	12	60.0
0	2	0	4	2	8	13	65.0
0	1	0	3	0	4	14	70.0
0	2	0	1	2	5	15	75.0
0	2	0	2	4	8	16	80.0
0	3	0	3	5	11	17	85.0
0	2	0	2	2	6	18	90.0
0	1	0	3	1	5	19	95.0
2	5	1	13	3	24	20	100.0

¹ Number of models with violations

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

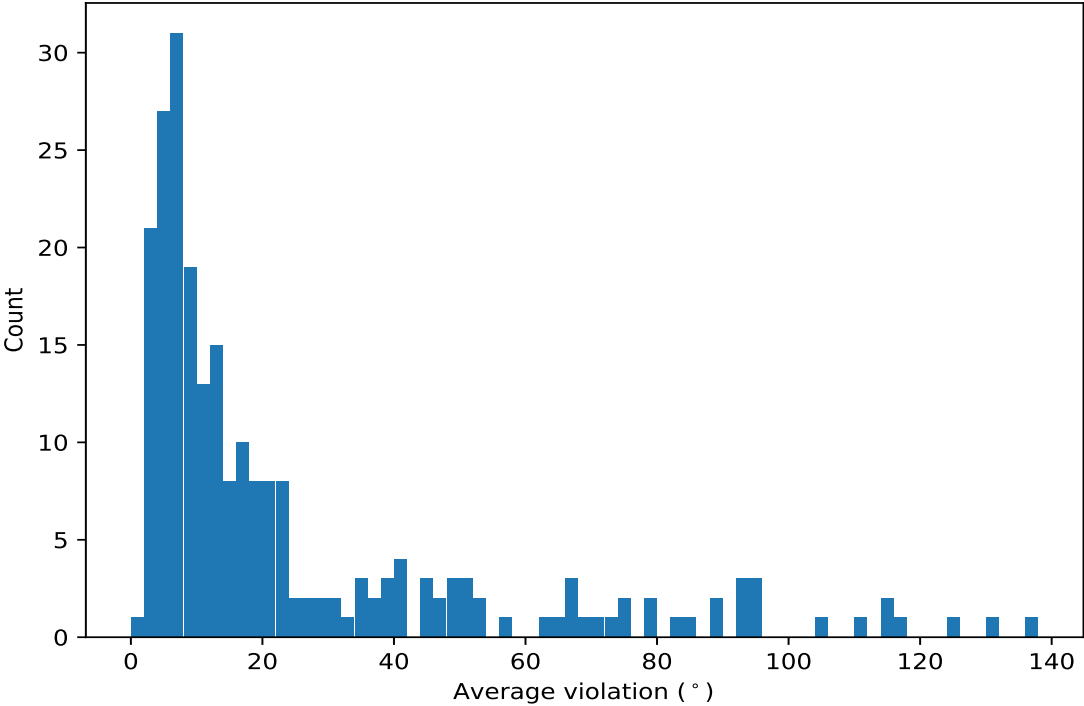


10.4 Most violated dihedral-angle restraints in the ensemble ⓘ

10.4.1 Histogram : Distribution of mean dihedral-angle violations ⓘ

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

in the ensemble



10.4.2 Table: Most violated dihedral-angle restraints ⓘ

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

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Models ¹	Mean	SD ²	Med
(1,55)	1:72:A:LYS:C	1:73:A:HIS:N	1:73:A:HIS:CA	2:173:A:CU1:CU	20	137.99	18.29	144
(1,323)	1:69:A:ARG:N	1:69:A:ARG:CA	1:69:A:ARG:C	1:70:A:TRP:N	20	125.58	9.35	125
(1,296)	1:57:A:LEU:N	1:57:A:LEU:CA	1:57:A:LEU:C	1:58:A:PHE:N	20	117.94	46.9	144
(1,211)	1:17:A:ALA:C	1:18:A:PHE:N	1:18:A:PHE:CA	1:18:A:PHE:C	20	115.9	10.68	111
(1,376)	1:101:A:LYS:C	1:102:A:LYS:N	1:102:A:LYS:CA	1:102:A:LYS:C	20	110.25	15.23	105
(1,282)	1:48:A:ASP:N	1:48:A:ASP:CA	1:48:A:ASP:CB	1:48:A:ASP:CG	20	93.58	7.15	93.5
(1,230)	1:23:A:LEU:CA	1:23:A:LEU:CB	1:23:A:LEU:CG	1:23:A:LEU:CD2	20	88.68	50.18	127
(1,294)	1:57:A:LEU:N	1:57:A:LEU:CA	1:57:A:LEU:CB	1:57:A:LEU:CG	20	83.66	18.34	85
(1,398)	1:109:A:PRO:N	1:109:A:PRO:CA	1:109:A:PRO:C	1:110:A:LEU:N	20	71.88	26.44	61.5
(1,56)	1:73:A:HIS:N	1:73:A:HIS:CA	2:173:A:CU1:CU	1:51:A:ILE:N	20	66.49	9.96	66.5
(1,340)	1:80:A:HIS:CA	1:80:A:HIS:CB	1:80:A:HIS:CG	1:80:A:HIS:ND1	20	64.71	25.2	58.6
(1,240)	1:26:A:GLY:N	1:26:A:GLY:CA	1:26:A:GLY:C	1:27:A:SER:N	20	63.72	34.92	71.3
(1,293)	1:56:A:GLY:C	1:57:A:LEU:N	1:57:A:LEU:CA	1:57:A:LEU:C	20	57.91	14.47	53.2
(1,415)	1:114:A:ASP:N	1:114:A:ASP:CA	1:114:A:ASP:C	1:115:A:PHE:N	20	51.17	24.15	56.3
(1,49)	1:69:A:ARG:C	1:70:A:TRP:N	1:70:A:TRP:CA	1:70:A:TRP:C	20	50.94	15.35	52
(1,393)	1:107:A:ASP:N	1:107:A:ASP:CA	1:107:A:ASP:C	1:108:A:LYS:N	20	47.62	9.83	48.6
(1,438)	1:124:A:ASP:N	1:124:A:ASP:CA	1:124:A:ASP:CB	1:124:A:ASP:CG	20	44.02	44.03	15.8
(1,388)	1:105:A:ASP:N	1:105:A:ASP:CA	1:105:A:ASP:C	1:106:A:PRO:N	20	41.89	12.09	41.5
(1,295)	1:57:A:LEU:CA	1:57:A:LEU:CB	1:57:A:LEU:CG	1:57:A:LEU:CD1	20	39.56	8.91	38.0
(1,58)	1:51:A:ILE:N	1:74:A:ILE:CA	1:74:A:ILE:C	1:75:A:MET:N	20	39.09	11.36	38.1

Continued on next page

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Models ¹	Mean	SD ²	Med
(1,465)	1:138:A:ILE:N	1:138:A:ILE:CA	1:138:A:ILE:C	1:139:A:PRO:N	20	35.23	8.2	36.5
(1,181)	1:155:A:ALA:N	1:155:A:ALA:CA	1:155:A:ALA:C	1:156:A:ASP:N	20	26.74	6.5	26.3
(1,100)	1:121:A:VAL:N	1:121:A:VAL:CA	1:121:A:VAL:C	1:122:A:PRO:N	20	22.61	11.91	21.4
(1,231)	1:23:A:LEU:N	1:23:A:LEU:CA	1:23:A:LEU:C	1:24:A:ASN:N	20	21.51	7.64	22.0
(1,277)	1:44:A:SER:N	1:44:A:SER:CA	1:44:A:SER:C	1:45:A:GLY:N	19	95.92	27.0	103.0
(1,268)	1:39:A:LYS:N	1:39:A:LYS:CA	1:39:A:LYS:CB	1:39:A:LYS:CG	19	49.78	18.26	52.2
(1,116)	1:134:A:HIS:N	1:134:A:HIS:CA	2:173:A:CU1:CU	1:135:A:HIS:N	19	40.45	20.29	41.2
(1,214)	1:18:A:PHE:N	1:18:A:PHE:CA	1:18:A:PHE:C	1:19:A:GLY:N	19	35.22	15.12	33.3
(1,47)	1:67:A:GLU:C	1:68:A:ASN:N	1:68:A:ASN:CA	1:68:A:ASN:C	19	17.42	8.25	16.8
(1,102)	1:123:A:HIS:N	1:123:A:HIS:CA	1:123:A:HIS:C	1:124:A:ASP:N	18	48.92	28.55	53.7
(1,308)	1:64:A:GLN:N	1:64:A:GLN:CA	1:64:A:GLN:C	1:65:A:GLN:N	18	37.99	14.22	40.9
(1,500)	1:158:A:GLU:N	1:158:A:GLU:CA	1:158:A:GLU:CB	1:158:A:GLU:CG	18	34.12	16.15	33.2
(1,386)	1:104:A:TRP:C	1:105:A:ASP:N	1:105:A:ASP:CA	1:105:A:ASP:C	18	22.19	11.61	23.0
(1,212)	1:18:A:PHE:N	1:18:A:PHE:CA	1:18:A:PHE:CB	1:18:A:PHE:CG	18	13.78	6.15	13.2
(1,89)	1:95:A:TRP:C	1:96:A:HIS:N	1:96:A:HIS:CA	1:96:A:HIS:C	18	11.9	6.34	10.5
(1,482)	1:145:A:TYR:N	1:145:A:TYR:CA	1:145:A:TYR:CB	1:145:A:TYR:CG	17	48.39	28.8	46.1
(1,452)	1:134:A:HIS:N	1:134:A:HIS:CA	1:134:A:HIS:CB	1:134:A:HIS:CG	17	24.91	15.44	24.9
(1,449)	1:132:A:LEU:N	1:132:A:LEU:CA	1:132:A:LEU:CB	1:132:A:LEU:CG	17	18.68	9.83	23.5
(1,316)	1:67:A:GLU:N	1:67:A:GLU:CA	1:67:A:GLU:CB	1:67:A:GLU:CG	17	16.38	12.34	10.4
(1,172)	1:39:A:LYS:N	1:39:A:LYS:CA	1:39:A:LYS:C	1:40:A:GLY:N	17	13.28	8.28	13.4
(1,61)	1:75:A:MET:C	1:76:A:THR:N	1:76:A:THR:CA	1:76:A:THR:C	17	12.41	7.16	12.0
(1,390)	1:106:A:PRO:C	1:107:A:ASP:N	1:107:A:ASP:CA	1:107:A:ASP:C	17	11.35	6.11	9.4
(1,263)	1:36:A:GLU:N	1:36:A:GLU:CA	1:36:A:GLU:C	1:37:A:ALA:N	17	10.83	8.8	7.0
(1,43)	1:62:A:LEU:C	1:63:A:ASP:N	1:63:A:ASP:CA	1:63:A:ASP:C	17	8.88	9.87	7.7
(1,261)	1:36:A:GLU:N	1:36:A:GLU:CA	1:36:A:GLU:CB	1:36:A:GLU:CG	17	7.07	3.13	7.6
(1,252)	1:32:A:PRO:N	1:32:A:PRO:CA	1:32:A:PRO:C	1:33:A:GLN:N	17	6.87	3.75	5.1
(1,271)	1:42:A:PRO:N	1:42:A:PRO:CA	1:42:A:PRO:C	1:43:A:HIS:N	16	114.13	38.65	126.0
(1,498)	1:157:A:THR:N	1:157:A:THR:CA	1:157:A:THR:CB	1:157:A:THR:OG1	16	95.64	8.18	96.0
(1,216)	1:19:A:GLY:C	1:20:A:PHE:N	1:20:A:PHE:CA	1:20:A:PHE:C	16	92.63	16.65	96.4
(1,414)	1:114:A:ASP:N	1:114:A:ASP:CA	1:114:A:ASP:CB	1:114:A:ASP:CG	16	79.83	15.64	82.4
(1,361)	1:96:A:HIS:N	1:96:A:HIS:CA	1:96:A:HIS:CB	1:96:A:HIS:CG	16	22.85	30.05	10.8
(1,303)	1:63:A:ASP:N	1:63:A:ASP:CA	1:63:A:ASP:CB	1:63:A:ASP:CG	16	10.14	8.03	7.1
(1,21)	1:36:A:GLU:C	1:37:A:ALA:N	1:37:A:ALA:CA	1:37:A:ALA:C	16	9.46	4.22	8.5
(1,66)	1:79:A:GLU:N	1:79:A:GLU:CA	1:79:A:GLU:C	1:80:A:HIS:N	16	6.96	3.99	6.9
(1,229)	1:23:A:LEU:N	1:23:A:LEU:CA	1:23:A:LEU:CB	1:23:A:LEU:CG	15	92.41	62.52	132.0
(1,337)	1:79:A:GLU:N	1:79:A:GLU:CA	1:79:A:GLU:CB	1:79:A:GLU:CG	15	67.4	45.96	96.6
(1,113)	1:132:A:LEU:C	1:133:A:SER:N	1:133:A:SER:CA	1:133:A:SER:C	15	17.96	8.84	17.5
(1,260)	1:35:A:LEU:C	1:36:A:GLU:N	1:36:A:GLU:CA	1:36:A:GLU:C	15	15.4	10.15	17.1
(1,54)	1:72:A:LYS:N	1:72:A:LYS:CA	1:72:A:LYS:C	1:73:A:HIS:N	15	12.56	14.46	7.6
(1,312)	1:65:A:GLN:N	1:65:A:GLN:CA	1:65:A:GLN:C	1:66:A:SER:N	14	13.29	9.93	10.0
(1,44)	1:63:A:ASP:N	1:63:A:ASP:CA	1:63:A:ASP:C	1:64:A:GLN:N	14	9.64	8.77	6.5
(1,135)	1:150:A:ALA:C	1:151:A:VAL:N	1:151:A:VAL:CA	1:151:A:VAL:C	14	7.73	4.77	5.9
(1,90)	1:96:A:HIS:N	1:96:A:HIS:CA	1:96:A:HIS:C	1:97:A:TYR:N	14	5.48	3.96	3.3
(1,333)	1:75:A:MET:N	1:75:A:MET:CA	1:75:A:MET:CB	1:75:A:MET:CG	13	37.02	13.96	39.4
(1,440)	1:124:A:ASP:N	1:124:A:ASP:CA	1:124:A:ASP:C	1:125:A:GLY:N	13	22.47	19.82	13.2
(1,507)	1:161:A:PHE:N	1:161:A:PHE:CA	1:161:A:PHE:CB	1:161:A:PHE:CG	13	19.65	9.82	19.0
(1,126)	1:146:A:HIS:N	1:146:A:HIS:CA	2:173:A:CU1:CU	1:147:A:VAL:N	13	13.09	7.43	14.0
(1,180)	1:154:A:VAL:C	1:155:A:ALA:N	1:155:A:ALA:CA	1:155:A:ALA:C	13	12.45	5.86	14.0
(1,123)	1:144:A:GLY:C	1:145:A:TYR:N	1:145:A:TYR:CA	1:145:A:TYR:C	13	12.09	6.51	13.9
(1,76)	1:84:A:TRP:N	1:84:A:TRP:CA	1:84:A:TRP:C	1:85:A:THR:N	13	11.59	5.49	10.4
(1,406)	1:111:A:LYS:N	1:111:A:LYS:CA	1:111:A:LYS:C	1:112:A:ARG:N	13	7.87	6.55	5.6

Continued on next page

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Models ¹	Mean	SD ²	Med
(1,275)	1:43:A:HIS:C	1:44:A:SER:N	1:44:A:SER:CA	1:44:A:SER:C	12	66.54	42.63	93.2
(1,328)	1:72:A:LYS:N	1:72:A:LYS:CA	1:72:A:LYS:CB	1:72:A:LYS:CG	12	46.06	46.66	18.7
(1,302)	1:62:A:LEU:CA	1:62:A:LEU:CB	1:62:A:LEU:CG	1:62:A:LEU:CD2	12	38.65	47.9	5.3
(1,235)	1:24:A:ASN:N	1:24:A:ASN:CA	1:24:A:ASN:C	1:25:A:CYS:N	12	28.26	20.94	20.2
(1,281)	1:47:A:ALA:C	1:48:A:ASP:N	1:48:A:ASP:CA	1:48:A:ASP:C	12	23.45	12.27	26.3
(1,97)	1:114:A:ASP:C	1:115:A:PHE:N	1:115:A:PHE:CA	1:115:A:PHE:C	12	11.5	4.56	12.8
(1,493)	1:153:A:ASP:N	1:153:A:ASP:CA	1:153:A:ASP:CB	1:153:A:ASP:CG	12	9.87	4.88	9.3
(1,8)	1:13:A:LEU:N	1:13:A:LEU:CA	1:13:A:LEU:C	1:14:A:CYS:N	12	8.91	4.96	8.1
(1,12)	1:27:A:SER:N	1:27:A:SER:CA	1:27:A:SER:C	1:28:A:VAL:N	12	6.73	3.74	5.4
(1,22)	1:37:A:ALA:N	1:37:A:ALA:CA	1:37:A:ALA:C	1:38:A:LYS:N	11	22.97	19.04	11.9
(1,502)	1:158:A:GLU:N	1:158:A:GLU:CA	1:158:A:GLU:C	1:159:A:ASN:N	11	14.13	10.73	15.2
(1,67)	1:79:A:GLU:C	1:80:A:HIS:N	1:80:A:HIS:CA	2:173:A:CU1:CU	11	13.99	7.03	13.6
(1,32)	1:54:A:ALA:N	1:54:A:ALA:CA	1:54:A:ALA:C	1:55:A:GLY:N	11	12.33	10.38	11.5
(1,238)	1:25:A:CYS:N	1:25:A:CYS:CA	1:25:A:CYS:C	1:26:A:GLY:N	11	12.21	9.22	9.0
(1,140)	1:153:A:ASP:N	1:153:A:ASP:CA	1:153:A:ASP:C	1:154:A:VAL:N	11	9.54	4.22	10.5
(1,203)	1:14:A:CYS:N	1:14:A:CYS:CA	1:14:A:CYS:C	1:15:A:SER:N	11	8.93	4.79	9.6
(1,435)	1:122:A:PRO:N	1:122:A:PRO:CA	1:122:A:PRO:C	1:123:A:HIS:N	11	6.38	3.79	5.7
(1,82)	1:88:A:ALA:N	1:88:A:ALA:CA	1:88:A:ALA:C	1:89:A:PRO:N	10	21.67	37.33	7.4
(1,48)	1:68:A:ASN:N	1:68:A:ASN:CA	1:68:A:ASN:C	1:69:A:ARG:N	10	13.98	13.55	11.4
(1,112)	1:132:A:LEU:N	1:132:A:LEU:CA	1:132:A:LEU:C	1:133:A:SER:N	10	11.33	13.1	5.7
(1,453)	1:134:A:HIS:CA	1:134:A:HIS:CB	1:134:A:HIS:CG	1:134:A:HIS:ND1	10	11.3	9.75	7.0
(1,117)	1:134:A:HIS:C	1:135:A:HIS:N	1:135:A:HIS:CA	1:135:A:HIS:C	10	7.22	4.9	6.2
(1,23)	1:46:A:PRO:C	1:47:A:ALA:N	1:47:A:ALA:CA	1:47:A:ALA:C	10	7.2	6.48	5.0
(1,391)	1:107:A:ASP:N	1:107:A:ASP:CA	1:107:A:ASP:CB	1:107:A:ASP:CG	10	4.96	4.71	3.8
(1,189)	1:5:A:GLU:N	1:5:A:GLU:CA	1:5:A:GLU:C	1:6:A:LYS:N	10	4.25	1.81	4.6
(1,511)	1:163:A:GLN:N	1:163:A:GLN:CA	1:163:A:GLN:CB	1:163:A:GLN:CG	9	85.46	20.7	87.8
(1,264)	1:37:A:ALA:C	1:38:A:LYS:N	1:38:A:LYS:CA	1:38:A:LYS:C	9	20.35	7.79	19.7
(1,202)	1:14:A:CYS:N	1:14:A:CYS:CA	1:14:A:CYS:CB	1:14:A:CYS:SG	9	20.17	15.08	13.9
(1,467)	1:139:A:PRO:C	1:140:A:GLU:N	1:140:A:GLU:CA	1:140:A:GLU:C	9	19.27	17.58	10.8
(1,53)	1:71:A:PHE:C	1:72:A:LYS:N	1:72:A:LYS:CA	1:72:A:LYS:C	9	16.99	8.96	15.5
(1,16)	1:29:A:MET:N	1:29:A:MET:CA	1:29:A:MET:C	1:30:A:TYR:N	9	14.04	11.62	8.8
(1,236)	1:24:A:ASN:C	1:25:A:CYS:N	1:25:A:CYS:CA	1:25:A:CYS:C	9	9.9	4.12	10.
(1,10)	1:16:A:GLU:N	1:16:A:GLU:CA	1:16:A:GLU:C	1:17:A:ALA:N	9	9.17	6.66	7.3
(1,474)	1:141:A:ASP:N	1:141:A:ASP:CA	1:141:A:ASP:C	1:142:A:ARG:N	9	9.05	6.88	6.6
(1,125)	1:145:A:TYR:C	1:146:A:HIS:N	1:146:A:HIS:CA	1:146:A:HIS:C	9	8.26	3.76	9.4
(1,46)	1:67:A:GLU:N	1:67:A:GLU:CA	1:67:A:GLU:C	1:68:A:ASN:N	9	5.73	2.86	7.3
(1,525)	1:172:A:LYS:N	1:172:A:LYS:CA	1:172:A:LYS:CB	1:172:A:LYS:CG	8	95.52	5.03	96.9
(1,377)	1:102:A:LYS:N	1:102:A:LYS:CA	1:102:A:LYS:CB	1:102:A:LYS:CG	8	74.78	38.97	97.6
(1,24)	1:47:A:ALA:N	1:47:A:ALA:CA	1:47:A:ALA:C	1:48:A:ASP:N	8	27.59	16.52	29.
(1,437)	1:123:A:HIS:C	1:124:A:ASP:N	1:124:A:ASP:CA	1:124:A:ASP:C	8	21.99	29.13	13.2
(1,101)	1:122:A:PRO:C	1:123:A:HIS:N	1:123:A:HIS:CA	1:123:A:HIS:C	8	19.39	7.63	21.8
(1,124)	1:145:A:TYR:N	1:145:A:TYR:CA	1:145:A:TYR:C	1:146:A:HIS:N	8	9.26	6.31	10.5
(1,42)	1:62:A:LEU:N	1:62:A:LEU:CA	1:62:A:LEU:C	1:63:A:ASP:N	8	7.83	7.54	6.8
(1,81)	1:87:A:THR:C	1:88:A:ALA:N	1:88:A:ALA:CA	1:88:A:ALA:C	8	7.57	4.36	7.4
(1,362)	1:96:A:HIS:CA	1:96:A:HIS:CB	1:96:A:HIS:CG	1:96:A:HIS:ND1	7	32.03	25.04	19.6
(1,399)	1:109:A:PRO:C	1:110:A:LEU:N	1:110:A:LEU:CA	1:110:A:LEU:C	7	28.51	18.54	28.2
(1,121)	1:142:A:ARG:C	1:143:A:LEU:N	1:143:A:LEU:CA	1:143:A:LEU:C	7	18.2	4.08	15.4
(1,283)	1:48:A:ASP:N	1:48:A:ASP:CA	1:48:A:ASP:C	1:49:A:GLY:N	7	13.67	7.79	14.8
(1,151)	1:162:A:TYR:C	1:163:A:GLN:N	1:163:A:GLN:CA	1:163:A:GLN:C	7	10.67	4.95	11.6
(1,147)	1:160:A:ALA:C	1:161:A:PHE:N	1:161:A:PHE:CA	1:161:A:PHE:C	7	8.19	6.46	4.4
(1,150)	1:162:A:TYR:N	1:162:A:TYR:CA	1:162:A:TYR:C	1:163:A:GLN:N	7	7.84	3.57	7.3

Continued on next page

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Models ¹	Mean	SD ²	Med
(1,301)	1:62:A:LEU:N	1:62:A:LEU:CA	1:62:A:LEU:CB	1:62:A:LEU:CG	7	7.74	5.9	4.0
(1,118)	1:135:A:HIS:N	1:135:A:HIS:CA	1:135:A:HIS:C	1:136:A:ILE:N	7	7.1	1.63	7.5
(1,153)	1:163:A:GLN:C	1:164:A:VAL:N	1:164:A:VAL:CA	1:164:A:VAL:C	7	5.47	2.95	5.9
(1,444)	1:127:A:PRO:N	1:127:A:PRO:CA	1:127:A:PRO:C	1:128:A:ALA:N	6	78.0	12.51	78.8
(1,233)	1:24:A:ASN:N	1:24:A:ASN:CA	1:24:A:ASN:CB	1:24:A:ASN:CG	6	73.31	42.85	85.0
(1,265)	1:38:A:LYS:N	1:38:A:LYS:CA	1:38:A:LYS:CB	1:38:A:LYS:CG	6	19.82	21.93	6.8
(1,98)	1:115:A:PHE:N	1:115:A:PHE:CA	1:115:A:PHE:C	1:116:A:GLU:N	6	15.72	22.39	5.3
(1,471)	1:140:A:GLU:C	1:141:A:ASP:N	1:141:A:ASP:CA	1:141:A:ASP:C	6	14.54	8.9	14.7
(1,160)	1:167:A:VAL:N	1:167:A:VAL:CA	1:167:A:VAL:C	1:168:A:ASP:N	6	7.46	3.97	7.7
(1,75)	1:83:A:THR:C	1:84:A:TRP:N	1:84:A:TRP:CA	1:84:A:TRP:C	6	6.71	3.94	5.7
(1,149)	1:161:A:PHE:C	1:162:A:TYR:N	1:162:A:TYR:CA	1:162:A:TYR:C	6	6.56	4.75	5.5
(1,80)	1:86:A:TYR:N	1:86:A:TYR:CA	1:86:A:TYR:C	1:87:A:THR:N	6	5.99	6.26	3.2
(1,106)	1:129:A:SER:N	1:129:A:SER:CA	1:129:A:SER:C	1:130:A:ARG:N	6	5.82	5.65	4.1
(1,120)	1:136:A:ILE:N	1:136:A:ILE:CA	1:136:A:ILE:C	1:137:A:TYR:N	6	5.32	1.31	5.0
(1,429)	1:118:A:ILE:N	1:118:A:ILE:CA	1:118:A:ILE:C	1:119:A:GLY:N	6	4.69	2.69	3.5
(1,132)	1:149:A:LEU:N	1:149:A:LEU:CA	1:149:A:LEU:C	1:150:A:ALA:N	6	4.62	1.13	4.4
(1,115)	1:133:A:SER:C	1:134:A:HIS:N	1:134:A:HIS:CA	1:134:A:HIS:C	6	3.92	2.41	3.3
(1,77)	1:84:A:TRP:C	1:85:A:THR:N	1:85:A:THR:CA	1:85:A:THR:C	6	3.68	1.5	3.9
(1,227)	1:22:A:ASN:N	1:22:A:ASN:CA	1:22:A:ASN:C	1:23:A:LEU:N	5	22.16	36.79	4.3
(1,217)	1:20:A:PHE:N	1:20:A:PHE:CA	1:20:A:PHE:CB	1:20:A:PHE:CG	5	21.71	8.29	18.1
(1,504)	1:159:A:ASN:N	1:159:A:ASN:CA	1:159:A:ASN:CB	1:159:A:ASN:CG	5	16.11	17.28	4.2
(1,38)	1:60:A:GLY:N	1:60:A:GLY:CA	1:60:A:GLY:C	1:61:A:ILE:N	5	8.88	5.85	5.7
(1,174)	1:49:A:GLY:N	1:49:A:GLY:CA	1:49:A:GLY:C	1:50:A:GLN:N	5	7.83	3.54	6.2
(1,107)	1:129:A:SER:C	1:130:A:ARG:N	1:130:A:ARG:CA	1:130:A:ARG:C	5	7.26	5.14	4.5
(1,154)	1:164:A:VAL:N	1:164:A:VAL:CA	1:164:A:VAL:C	1:165:A:ILE:N	5	7.18	4.74	5.4
(1,407)	1:111:A:LYS:C	1:112:A:ARG:N	1:112:A:ARG:CA	1:112:A:ARG:C	5	6.66	4.3	5.2
(1,163)	1:168:A:ASP:C	1:169:A:LEU:N	1:169:A:LEU:CA	1:169:A:LEU:C	5	5.79	2.44	5.3
(1,14)	1:28:A:VAL:N	1:28:A:VAL:CA	1:28:A:VAL:C	1:29:A:MET:N	5	5.04	3.17	4.4
(1,1)	1:3:A:PHE:C	1:4:A:ILE:N	1:4:A:ILE:CA	1:4:A:ILE:C	5	4.97	2.96	4.1
(1,190)	1:7:A:PRO:N	1:7:A:PRO:CA	1:7:A:PRO:C	1:8:A:GLY:N	5	4.79	4.15	3.3
(1,410)	1:112:A:ARG:N	1:112:A:ARG:CA	1:112:A:ARG:C	1:113:A:ALA:N	5	3.73	1.62	3.1
(1,161)	1:167:A:VAL:C	1:168:A:ASP:N	1:168:A:ASP:CA	1:168:A:ASP:C	5	3.56	2.54	2.5
(1,299)	1:61:A:ILE:N	1:61:A:ILE:CA	1:61:A:ILE:CB	1:61:A:ILE:CG1	5	3.15	2.53	1.8
(1,34)	1:58:A:PHE:N	1:58:A:PHE:CA	1:58:A:PHE:C	1:59:A:GLY:N	5	3.02	1.84	1.6
(1,210)	1:17:A:ALA:N	1:17:A:ALA:CA	1:17:A:ALA:C	1:18:A:PHE:N	5	2.54	0.99	2.6
(1,256)	1:34:A:SER:N	1:34:A:SER:CA	1:34:A:SER:CB	1:34:A:SER:OG	4	52.14	29.65	67.1
(1,192)	1:8:A:GLY:N	1:8:A:GLY:CA	1:8:A:GLY:C	1:9:A:SER:N	4	44.24	23.26	35.9
(1,470)	1:140:A:GLU:N	1:140:A:GLU:CA	1:140:A:GLU:C	1:141:A:ASP:N	4	40.69	17.44	44.4
(1,468)	1:140:A:GLU:N	1:140:A:GLU:CA	1:140:A:GLU:CB	1:140:A:GLU:CG	4	30.52	28.64	26.5
(1,237)	1:25:A:CYS:N	1:25:A:CYS:CA	1:25:A:CYS:CB	1:25:A:CYS:SG	4	24.2	23.71	14.
(1,274)	1:43:A:HIS:N	1:43:A:HIS:CA	1:43:A:HIS:C	1:44:A:SER:N	4	21.75	9.22	19.7
(1,11)	1:26:A:GLY:C	1:27:A:SER:N	1:27:A:SER:CA	1:27:A:SER:C	4	17.73	11.92	14.8
(1,17)	1:32:A:PRO:C	1:33:A:GLN:N	1:33:A:GLN:CA	1:33:A:GLN:C	4	16.02	8.18	14.0
(1,320)	1:68:A:ASN:C	1:69:A:ARG:N	1:69:A:ARG:CA	1:69:A:ARG:C	4	13.7	18.33	3.5
(1,108)	1:130:A:ARG:N	1:130:A:ARG:CA	1:130:A:ARG:C	1:131:A:ASN:N	4	10.5	6.49	10.7
(1,19)	1:34:A:SER:C	1:35:A:LEU:N	1:35:A:LEU:CA	1:35:A:LEU:C	4	9.85	7.86	8.1
(1,146)	1:160:A:ALA:N	1:160:A:ALA:CA	1:160:A:ALA:C	1:161:A:PHE:N	4	8.72	3.34	8.1
(1,60)	1:75:A:MET:N	1:75:A:MET:CA	1:75:A:MET:C	1:76:A:THR:N	4	7.28	6.45	4.3
(1,74)	1:83:A:THR:N	1:83:A:THR:CA	1:83:A:THR:C	1:84:A:TRP:N	4	6.44	4.17	5.7
(1,18)	1:33:A:GLN:N	1:33:A:GLN:CA	1:33:A:GLN:C	1:34:A:SER:N	4	6.03	6.3	2.9
(1,321)	1:69:A:ARG:N	1:69:A:ARG:CA	1:69:A:ARG:CB	1:69:A:ARG:CG	4	5.26	2.98	5.2

Continued on next page

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Models ¹	Mean	SD ²	Med
(1,79)	1:85:A:THR:C	1:86:A:TYR:N	1:86:A:TYR:CA	1:86:A:TYR:C	4	5.09	1.49	4.6
(1,524)	1:171:A:ASN:C	1:172:A:LYS:N	1:172:A:LYS:CA	1:172:A:LYS:C	4	4.97	3.19	4.3
(1,26)	1:51:A:ILE:N	1:51:A:ILE:CA	1:51:A:ILE:C	1:52:A:ALA:N	4	4.39	4.85	1.8
(1,109)	1:130:A:ARG:C	1:131:A:ASN:N	1:131:A:ASN:CA	1:131:A:ASN:C	4	3.92	2.91	2.9
(1,506)	1:159:A:ASN:N	1:159:A:ASN:CA	1:159:A:ASN:C	1:160:A:ALA:N	4	2.97	0.88	2.9
(1,284)	1:49:A:GLY:C	1:50:A:GLN:N	1:50:A:GLN:CA	1:50:A:GLN:C	3	105.46	2.48	107.
(1,450)	1:132:A:LEU:CA	1:132:A:LEU:CB	1:132:A:LEU:CG	1:132:A:LEU:CD2	3	88.46	23.8	104.
(1,318)	1:68:A:ASN:N	1:68:A:ASN:CA	1:68:A:ASN:CB	1:68:A:ASN:CG	3	75.63	7.7	79.9
(1,300)	1:61:A:ILE:CA	1:61:A:ILE:CB	1:61:A:ILE:CG1	1:61:A:ILE:CD1	3	68.47	45.01	99.6
(1,187)	1:5:A:GLU:N	1:5:A:GLU:CA	1:5:A:GLU:CB	1:5:A:GLU:CG	3	41.43	4.74	42.3
(1,267)	1:38:A:LYS:N	1:38:A:LYS:CA	1:38:A:LYS:C	1:39:A:LYS:N	3	31.93	41.88	2.7
(1,145)	1:159:A:ASN:C	1:160:A:ALA:N	1:160:A:ALA:CA	1:160:A:ALA:C	3	20.28	18.44	10.
(1,29)	1:52:A:ALA:C	1:53:A:SER:N	1:53:A:SER:CA	1:53:A:SER:C	3	17.99	11.0	23.1
(1,104)	1:128:A:ALA:N	1:128:A:ALA:CA	1:128:A:ALA:C	1:129:A:SER:N	3	15.82	3.43	17.1
(1,110)	1:131:A:ASN:N	1:131:A:ASN:CA	1:131:A:ASN:C	1:132:A:LEU:N	3	14.34	5.76	16.1
(1,122)	1:143:A:LEU:N	1:143:A:LEU:CA	1:143:A:LEU:C	1:144:A:GLY:N	3	9.1	4.2	9.5
(1,219)	1:20:A:PHE:N	1:20:A:PHE:CA	1:20:A:PHE:C	1:21:A:LEU:N	3	8.88	9.76	2.7
(1,128)	1:147:A:VAL:N	1:147:A:VAL:CA	1:147:A:VAL:C	1:148:A:ILE:N	3	8.87	1.34	7.9
(1,127)	1:146:A:HIS:C	1:147:A:VAL:N	1:147:A:VAL:CA	1:147:A:VAL:C	3	7.08	3.49	5.9
(1,413)	1:113:A:ALA:C	1:114:A:ASP:N	1:114:A:ASP:CA	1:114:A:ASP:C	3	7.04	2.59	7.7
(1,119)	1:135:A:HIS:C	1:136:A:ILE:N	1:136:A:ILE:CA	1:136:A:ILE:C	3	6.94	2.51	8.1
(1,9)	1:15:A:SER:C	1:16:A:GLU:N	1:16:A:GLU:CA	1:16:A:GLU:C	3	6.16	2.43	6.8
(1,73)	1:82:A:PHE:C	1:83:A:THR:N	1:83:A:THR:CA	1:83:A:THR:C	3	5.86	5.98	2.0
(1,287)	1:50:A:GLN:N	1:50:A:GLN:CA	1:50:A:GLN:C	1:51:A:ILE:N	3	4.95	3.27	3.0
(1,141)	1:155:A:ALA:C	1:156:A:ASP:N	1:156:A:ASP:CA	1:156:A:ASP:C	3	4.74	3.3	4.1
(1,62)	1:76:A:THR:N	1:76:A:THR:CA	1:76:A:THR:C	1:77:A:GLY:N	3	4.63	1.15	3.9
(1,462)	1:137:A:TYR:C	1:138:A:ILE:N	1:138:A:ILE:CA	1:138:A:ILE:C	3	4.4	1.97	3.6
(1,93)	1:97:A:TYR:C	1:98:A:TYR:N	1:98:A:TYR:CA	1:98:A:TYR:C	3	3.55	3.13	1.3
(1,291)	1:54:A:ALA:C	1:55:A:GLY:N	1:55:A:GLY:CA	1:55:A:GLY:C	3	3.26	1.57	4.0
(1,36)	1:59:A:GLY:N	1:59:A:GLY:CA	1:59:A:GLY:C	1:60:A:GLY:N	3	2.04	0.67	1.7
(1,434)	1:121:A:VAL:N	1:121:A:VAL:CA	1:121:A:VAL:CB	1:121:A:VAL:CG1	2	130.88	16.72	130.
(1,224)	1:21:A:LEU:C	1:22:A:ASN:N	1:22:A:ASN:CA	1:22:A:ASN:C	2	53.09	36.96	53.0
(1,207)	1:16:A:GLU:N	1:16:A:GLU:CA	1:16:A:GLU:CB	1:16:A:GLU:CG	2	50.45	27.08	50.4
(1,272)	1:42:A:PRO:C	1:43:A:HIS:N	1:43:A:HIS:CA	1:43:A:HIS:C	2	45.08	42.68	45.0
(1,177)	1:91:A:ASN:N	1:91:A:ASN:CA	1:91:A:ASN:C	1:92:A:THR:N	2	23.62	13.46	23.6
(1,57)	1:73:A:HIS:C	1:74:A:ILE:N	1:74:A:ILE:CA	1:74:A:ILE:C	2	19.29	4.28	19.2
(1,223)	1:21:A:LEU:N	1:21:A:LEU:CA	1:21:A:LEU:C	1:22:A:ASN:N	2	18.3	2.62	18.
(1,111)	1:131:A:ASN:C	1:132:A:LEU:N	1:132:A:LEU:CA	1:132:A:LEU:C	2	17.94	9.27	17.9
(1,71)	1:81:A:THR:C	1:82:A:PHE:N	1:82:A:PHE:CA	1:82:A:PHE:C	2	17.48	1.12	17.4
(1,70)	1:81:A:THR:N	1:81:A:THR:CA	1:81:A:THR:C	1:82:A:PHE:N	2	14.11	1.27	14.1
(1,129)	1:147:A:VAL:C	1:148:A:ILE:N	1:148:A:ILE:CA	1:148:A:ILE:C	2	13.22	3.3	13.2
(1,148)	1:161:A:PHE:N	1:161:A:PHE:CA	1:161:A:PHE:C	1:162:A:TYR:N	2	10.72	4.06	10.7
(1,176)	1:56:A:GLY:N	1:56:A:GLY:CA	1:56:A:GLY:C	1:57:A:LEU:N	2	10.25	5.69	10.2
(1,356)	1:93:A:SER:N	1:93:A:SER:CA	1:93:A:SER:CB	1:93:A:SER:OG	2	10.12	8.7	10.1
(1,138)	1:152:A:TRP:N	1:152:A:TRP:CA	1:152:A:TRP:C	1:153:A:ASP:N	2	7.6	3.16	7.6
(1,188)	1:5:A:GLU:CA	1:5:A:GLU:CB	1:5:A:GLU:CG	1:5:A:GLU:CD	2	7.28	2.32	7.2
(1,166)	1:170:A:VAL:N	1:170:A:VAL:CA	1:170:A:VAL:C	1:171:A:ASN:N	2	6.69	2.66	6.6
(1,139)	1:152:A:TRP:C	1:153:A:ASP:N	1:153:A:ASP:CA	1:153:A:ASP:C	2	5.98	0.98	5.9
(1,15)	1:28:A:VAL:C	1:29:A:MET:N	1:29:A:MET:CA	1:29:A:MET:C	2	5.67	4.03	5.6
(1,91)	1:96:A:HIS:C	1:97:A:TYR:N	1:97:A:TYR:CA	1:97:A:TYR:C	2	4.97	0.91	4.9
(1,456)	1:136:A:ILE:N	1:136:A:ILE:CA	1:136:A:ILE:CB	1:136:A:ILE:CG1	2	4.03	2.64	4.0

Continued on next page

Continued from previous page...

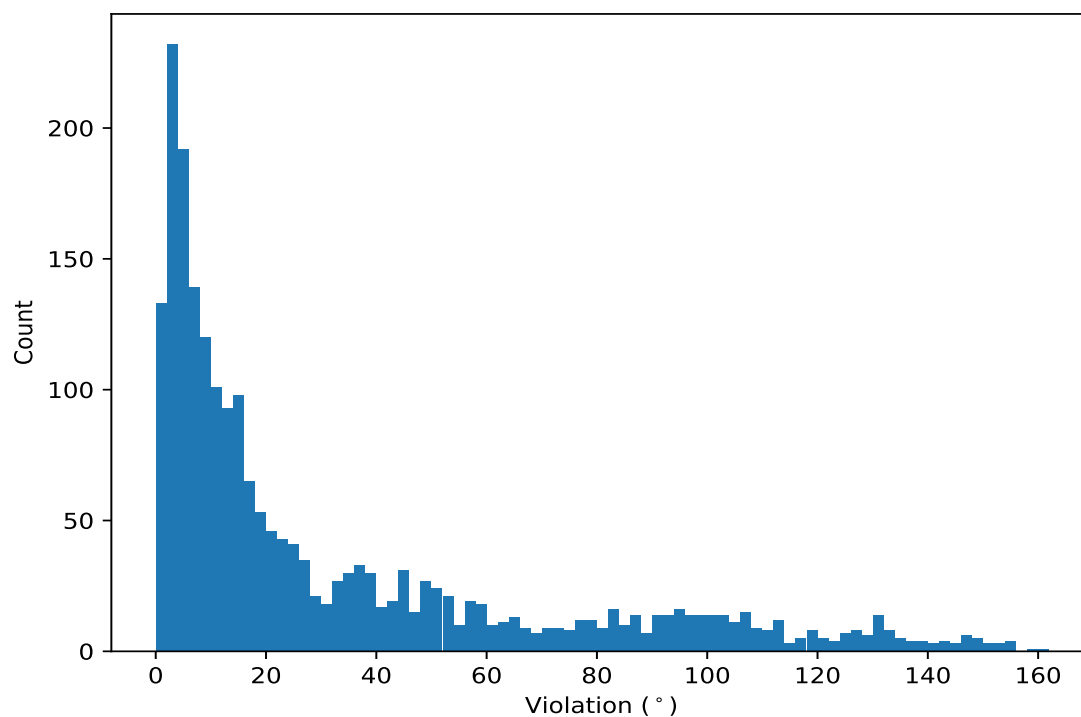
Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Models ¹	Mean	SD ²	Med
(1,37)	1:59:A:GLY:C	1:60:A:GLY:N	1:60:A:GLY:CA	1:60:A:GLY:C	2	3.54	2.16	3.5
(1,96)	1:99:A:ILE:N	1:99:A:ILE:CA	1:99:A:ILE:C	1:100:A:THR:N	2	3.21	1.76	3.2
(1,134)	1:150:A:ALA:N	1:150:A:ALA:CA	1:150:A:ALA:C	1:151:A:VAL:N	2	3.08	1.68	3.0
(1,7)	1:12:A:ALA:C	1:13:A:LEU:N	1:13:A:LEU:CA	1:13:A:LEU:C	2	2.98	1.32	2.9
(1,133)	1:149:A:LEU:C	1:150:A:ALA:N	1:150:A:ALA:CA	1:150:A:ALA:C	2	2.96	0.86	2.9
(1,171)	1:38:A:LYS:C	1:39:A:LYS:N	1:39:A:LYS:CA	1:39:A:LYS:C	2	2.83	1.83	2.8
(1,152)	1:163:A:GLN:N	1:163:A:GLN:CA	1:163:A:GLN:C	1:164:A:VAL:N	2	2.8	1.72	2.8
(1,142)	1:156:A:ASP:N	1:156:A:ASP:CA	1:156:A:ASP:C	1:157:A:THR:N	2	2.5	0.02	2.5
(1,144)	1:157:A:THR:N	1:157:A:THR:CA	1:157:A:THR:C	1:158:A:GLU:N	2	2.49	1.28	2.4
(1,156)	1:165:A:ILE:N	1:165:A:ILE:CA	1:165:A:ILE:C	1:166:A:ASP:N	2	1.9	0.14	1.9

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 (°)
(1,296)	1:57:A:LEU:N	1:57:A:LEU:CA	1:57:A:LEU:C	1:58:A:PHE:N	12	160.06
(1,296)	1:57:A:LEU:N	1:57:A:LEU:CA	1:57:A:LEU:C	1:58:A:PHE:N	8	158.51
(1,296)	1:57:A:LEU:N	1:57:A:LEU:CA	1:57:A:LEU:C	1:58:A:PHE:N	17	155.92
(1,296)	1:57:A:LEU:N	1:57:A:LEU:CA	1:57:A:LEU:C	1:58:A:PHE:N	20	155.19
(1,296)	1:57:A:LEU:N	1:57:A:LEU:CA	1:57:A:LEU:C	1:58:A:PHE:N	11	154.77
(1,55)	1:72:A:LYS:C	1:73:A:HIS:N	1:73:A:HIS:CA	2:173:A:CU1:CU	4	154.41
(1,55)	1:72:A:LYS:C	1:73:A:HIS:N	1:73:A:HIS:CA	2:173:A:CU1:CU	9	153.95
(1,55)	1:72:A:LYS:C	1:73:A:HIS:N	1:73:A:HIS:CA	2:173:A:CU1:CU	2	152.78
(1,55)	1:72:A:LYS:C	1:73:A:HIS:N	1:73:A:HIS:CA	2:173:A:CU1:CU	7	152.32
(1,55)	1:72:A:LYS:C	1:73:A:HIS:N	1:73:A:HIS:CA	2:173:A:CU1:CU	15	151.86
(1,296)	1:57:A:LEU:N	1:57:A:LEU:CA	1:57:A:LEU:C	1:58:A:PHE:N	5	151.56
(1,296)	1:57:A:LEU:N	1:57:A:LEU:CA	1:57:A:LEU:C	1:58:A:PHE:N	3	150.38
(1,55)	1:72:A:LYS:C	1:73:A:HIS:N	1:73:A:HIS:CA	2:173:A:CU1:CU	17	149.51
(1,376)	1:101:A:LYS:C	1:102:A:LYS:N	1:102:A:LYS:CA	1:102:A:LYS:C	11	148.95
(1,55)	1:72:A:LYS:C	1:73:A:HIS:N	1:73:A:HIS:CA	2:173:A:CU1:CU	3	148.82
(1,230)	1:23:A:LEU:CA	1:23:A:LEU:CB	1:23:A:LEU:CG	1:23:A:LEU:CD2	4	148.45
(1,55)	1:72:A:LYS:C	1:73:A:HIS:N	1:73:A:HIS:CA	2:173:A:CU1:CU	18	148.09
(1,434)	1:121:A:VAL:N	1:121:A:VAL:CA	1:121:A:VAL:CB	1:121:A:VAL:CG1	4	147.59
(1,296)	1:57:A:LEU:N	1:57:A:LEU:CA	1:57:A:LEU:C	1:58:A:PHE:N	16	147.5
(1,296)	1:57:A:LEU:N	1:57:A:LEU:CA	1:57:A:LEU:C	1:58:A:PHE:N	18	147.46
(1,296)	1:57:A:LEU:N	1:57:A:LEU:CA	1:57:A:LEU:C	1:58:A:PHE:N	10	147.41
(1,55)	1:72:A:LYS:C	1:73:A:HIS:N	1:73:A:HIS:CA	2:173:A:CU1:CU	12	147.31
(1,271)	1:42:A:PRO:N	1:42:A:PRO:CA	1:42:A:PRO:C	1:43:A:HIS:N	20	146.83
(1,55)	1:72:A:LYS:C	1:73:A:HIS:N	1:73:A:HIS:CA	2:173:A:CU1:CU	11	145.54
(1,211)	1:17:A:ALA:C	1:18:A:PHE:N	1:18:A:PHE:CA	1:18:A:PHE:C	11	144.54
(1,229)	1:23:A:LEU:N	1:23:A:LEU:CA	1:23:A:LEU:CB	1:23:A:LEU:CG	6	144.3
(1,229)	1:23:A:LEU:N	1:23:A:LEU:CA	1:23:A:LEU:CB	1:23:A:LEU:CG	16	142.89
(1,55)	1:72:A:LYS:C	1:73:A:HIS:N	1:73:A:HIS:CA	2:173:A:CU1:CU	5	142.87
(1,271)	1:42:A:PRO:N	1:42:A:PRO:CA	1:42:A:PRO:C	1:43:A:HIS:N	12	142.54
(1,55)	1:72:A:LYS:C	1:73:A:HIS:N	1:73:A:HIS:CA	2:173:A:CU1:CU	20	142.29
(1,55)	1:72:A:LYS:C	1:73:A:HIS:N	1:73:A:HIS:CA	2:173:A:CU1:CU	16	141.93
(1,230)	1:23:A:LEU:CA	1:23:A:LEU:CB	1:23:A:LEU:CG	1:23:A:LEU:CD2	6	141.53
(1,296)	1:57:A:LEU:N	1:57:A:LEU:CA	1:57:A:LEU:C	1:58:A:PHE:N	1	141.31
(1,55)	1:72:A:LYS:C	1:73:A:HIS:N	1:73:A:HIS:CA	2:173:A:CU1:CU	10	139.48
(1,271)	1:42:A:PRO:N	1:42:A:PRO:CA	1:42:A:PRO:C	1:43:A:HIS:N	5	139.46
(1,229)	1:23:A:LEU:N	1:23:A:LEU:CA	1:23:A:LEU:CB	1:23:A:LEU:CG	15	139.44
(1,229)	1:23:A:LEU:N	1:23:A:LEU:CA	1:23:A:LEU:CB	1:23:A:LEU:CG	8	138.18
(1,229)	1:23:A:LEU:N	1:23:A:LEU:CA	1:23:A:LEU:CB	1:23:A:LEU:CG	11	137.27
(1,323)	1:69:A:ARG:N	1:69:A:ARG:CA	1:69:A:ARG:C	1:70:A:TRP:N	15	137.25
(1,323)	1:69:A:ARG:N	1:69:A:ARG:CA	1:69:A:ARG:C	1:70:A:TRP:N	19	136.71
(1,229)	1:23:A:LEU:N	1:23:A:LEU:CA	1:23:A:LEU:CB	1:23:A:LEU:CG	10	136.61
(1,323)	1:69:A:ARG:N	1:69:A:ARG:CA	1:69:A:ARG:C	1:70:A:TRP:N	7	135.76
(1,230)	1:23:A:LEU:CA	1:23:A:LEU:CB	1:23:A:LEU:CG	1:23:A:LEU:CD2	9	135.34
(1,296)	1:57:A:LEU:N	1:57:A:LEU:CA	1:57:A:LEU:C	1:58:A:PHE:N	7	134.81
(1,323)	1:69:A:ARG:N	1:69:A:ARG:CA	1:69:A:ARG:C	1:70:A:TRP:N	8	134.62
(1,211)	1:17:A:ALA:C	1:18:A:PHE:N	1:18:A:PHE:CA	1:18:A:PHE:C	10	134.54
(1,323)	1:69:A:ARG:N	1:69:A:ARG:CA	1:69:A:ARG:C	1:70:A:TRP:N	17	133.98
(1,229)	1:23:A:LEU:N	1:23:A:LEU:CA	1:23:A:LEU:CB	1:23:A:LEU:CG	2	133.69
(1,323)	1:69:A:ARG:N	1:69:A:ARG:CA	1:69:A:ARG:C	1:70:A:TRP:N	9	133.53
(1,55)	1:72:A:LYS:C	1:73:A:HIS:N	1:73:A:HIS:CA	2:173:A:CU1:CU	14	133.22
(1,229)	1:23:A:LEU:N	1:23:A:LEU:CA	1:23:A:LEU:CB	1:23:A:LEU:CG	14	132.8
(1,230)	1:23:A:LEU:CA	1:23:A:LEU:CB	1:23:A:LEU:CG	1:23:A:LEU:CD2	5	132.36

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,323)	1:69:A:ARG:N	1:69:A:ARG:CA	1:69:A:ARG:C	1:70:A:TRP:N	11	132.34
(1,230)	1:23:A:LEU:CA	1:23:A:LEU:CB	1:23:A:LEU:CG	1:23:A:LEU:CD2	17	132.27
(1,229)	1:23:A:LEU:N	1:23:A:LEU:CA	1:23:A:LEU:CB	1:23:A:LEU:CG	13	131.95
(1,323)	1:69:A:ARG:N	1:69:A:ARG:CA	1:69:A:ARG:C	1:70:A:TRP:N	16	131.91
(1,376)	1:101:A:LYS:C	1:102:A:LYS:N	1:102:A:LYS:CA	1:102:A:LYS:C	12	131.69
(1,82)	1:88:A:ALA:N	1:88:A:ALA:CA	1:88:A:ALA:C	1:89:A:PRO:N	12	131.62
(1,271)	1:42:A:PRO:N	1:42:A:PRO:CA	1:42:A:PRO:C	1:43:A:HIS:N	6	131.53
(1,376)	1:101:A:LYS:C	1:102:A:LYS:N	1:102:A:LYS:CA	1:102:A:LYS:C	18	131.12
(1,376)	1:101:A:LYS:C	1:102:A:LYS:N	1:102:A:LYS:CA	1:102:A:LYS:C	20	130.97
(1,296)	1:57:A:LEU:N	1:57:A:LEU:CA	1:57:A:LEU:C	1:58:A:PHE:N	6	130.38
(1,230)	1:23:A:LEU:CA	1:23:A:LEU:CB	1:23:A:LEU:CG	1:23:A:LEU:CD2	12	130.37
(1,211)	1:17:A:ALA:C	1:18:A:PHE:N	1:18:A:PHE:CA	1:18:A:PHE:C	4	130.32
(1,55)	1:72:A:LYS:C	1:73:A:HIS:N	1:73:A:HIS:CA	2:173:A:CU1:CU	19	130.17
(1,230)	1:23:A:LEU:CA	1:23:A:LEU:CB	1:23:A:LEU:CG	1:23:A:LEU:CD2	3	130.13
(1,398)	1:109:A:PRO:N	1:109:A:PRO:CA	1:109:A:PRO:C	1:110:A:LEU:N	10	130.0
(1,230)	1:23:A:LEU:CA	1:23:A:LEU:CB	1:23:A:LEU:CG	1:23:A:LEU:CD2	20	130.0
(1,271)	1:42:A:PRO:N	1:42:A:PRO:CA	1:42:A:PRO:C	1:43:A:HIS:N	19	129.63
(1,271)	1:42:A:PRO:N	1:42:A:PRO:CA	1:42:A:PRO:C	1:43:A:HIS:N	2	129.61
(1,230)	1:23:A:LEU:CA	1:23:A:LEU:CB	1:23:A:LEU:CG	1:23:A:LEU:CD2	1	128.74
(1,323)	1:69:A:ARG:N	1:69:A:ARG:CA	1:69:A:ARG:C	1:70:A:TRP:N	5	128.33
(1,229)	1:23:A:LEU:N	1:23:A:LEU:CA	1:23:A:LEU:CB	1:23:A:LEU:CG	18	128.04
(1,55)	1:72:A:LYS:C	1:73:A:HIS:N	1:73:A:HIS:CA	2:173:A:CU1:CU	6	128.04
(1,230)	1:23:A:LEU:CA	1:23:A:LEU:CB	1:23:A:LEU:CG	1:23:A:LEU:CD2	7	127.77
(1,271)	1:42:A:PRO:N	1:42:A:PRO:CA	1:42:A:PRO:C	1:43:A:HIS:N	17	127.67
(1,230)	1:23:A:LEU:CA	1:23:A:LEU:CB	1:23:A:LEU:CG	1:23:A:LEU:CD2	19	127.13
(1,277)	1:44:A:SER:N	1:44:A:SER:CA	1:44:A:SER:C	1:45:A:GLY:N	13	126.85
(1,323)	1:69:A:ARG:N	1:69:A:ARG:CA	1:69:A:ARG:C	1:70:A:TRP:N	20	126.34
(1,398)	1:109:A:PRO:N	1:109:A:PRO:CA	1:109:A:PRO:C	1:110:A:LEU:N	2	126.33
(1,271)	1:42:A:PRO:N	1:42:A:PRO:CA	1:42:A:PRO:C	1:43:A:HIS:N	3	126.12
(1,271)	1:42:A:PRO:N	1:42:A:PRO:CA	1:42:A:PRO:C	1:43:A:HIS:N	14	126.01
(1,277)	1:44:A:SER:N	1:44:A:SER:CA	1:44:A:SER:C	1:45:A:GLY:N	10	125.7
(1,211)	1:17:A:ALA:C	1:18:A:PHE:N	1:18:A:PHE:CA	1:18:A:PHE:C	9	125.49
(1,323)	1:69:A:ARG:N	1:69:A:ARG:CA	1:69:A:ARG:C	1:70:A:TRP:N	4	125.25
(1,323)	1:69:A:ARG:N	1:69:A:ARG:CA	1:69:A:ARG:C	1:70:A:TRP:N	6	125.05
(1,211)	1:17:A:ALA:C	1:18:A:PHE:N	1:18:A:PHE:CA	1:18:A:PHE:C	6	124.79
(1,271)	1:42:A:PRO:N	1:42:A:PRO:CA	1:42:A:PRO:C	1:43:A:HIS:N	4	124.66
(1,323)	1:69:A:ARG:N	1:69:A:ARG:CA	1:69:A:ARG:C	1:70:A:TRP:N	2	124.39
(1,271)	1:42:A:PRO:N	1:42:A:PRO:CA	1:42:A:PRO:C	1:43:A:HIS:N	1	123.26
(1,328)	1:72:A:LYS:N	1:72:A:LYS:CA	1:72:A:LYS:CB	1:72:A:LYS:CG	9	122.72
(1,511)	1:163:A:GLN:N	1:163:A:GLN:CA	1:163:A:GLN:CB	1:163:A:GLN:CG	7	122.35
(1,398)	1:109:A:PRO:N	1:109:A:PRO:CA	1:109:A:PRO:C	1:110:A:LEU:N	4	122.17
(1,277)	1:44:A:SER:N	1:44:A:SER:CA	1:44:A:SER:C	1:45:A:GLY:N	15	121.77
(1,323)	1:69:A:ARG:N	1:69:A:ARG:CA	1:69:A:ARG:C	1:70:A:TRP:N	18	121.54
(1,323)	1:69:A:ARG:N	1:69:A:ARG:CA	1:69:A:ARG:C	1:70:A:TRP:N	1	121.1
(1,211)	1:17:A:ALA:C	1:18:A:PHE:N	1:18:A:PHE:CA	1:18:A:PHE:C	16	120.91
(1,271)	1:42:A:PRO:N	1:42:A:PRO:CA	1:42:A:PRO:C	1:43:A:HIS:N	10	120.68
(1,438)	1:124:A:ASP:N	1:124:A:ASP:CA	1:124:A:ASP:CB	1:124:A:ASP:CG	9	119.75
(1,277)	1:44:A:SER:N	1:44:A:SER:CA	1:44:A:SER:C	1:45:A:GLY:N	19	119.64
(1,323)	1:69:A:ARG:N	1:69:A:ARG:CA	1:69:A:ARG:C	1:70:A:TRP:N	10	119.63
(1,376)	1:101:A:LYS:C	1:102:A:LYS:N	1:102:A:LYS:CA	1:102:A:LYS:C	19	119.32
(1,323)	1:69:A:ARG:N	1:69:A:ARG:CA	1:69:A:ARG:C	1:70:A:TRP:N	13	119.11

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,438)	1:124:A:ASP:N	1:124:A:ASP:CA	1:124:A:ASP:CB	1:124:A:ASP:CG	7	118.75
(1,337)	1:79:A:GLU:N	1:79:A:GLU:CA	1:79:A:GLU:CB	1:79:A:GLU:CG	18	118.37
(1,102)	1:123:A:HIS:N	1:123:A:HIS:CA	1:123:A:HIS:C	1:124:A:ASP:N	8	118.02
(1,233)	1:24:A:ASN:N	1:24:A:ASN:CA	1:24:A:ASN:CB	1:24:A:ASN:CG	9	117.49
(1,277)	1:44:A:SER:N	1:44:A:SER:CA	1:44:A:SER:C	1:45:A:GLY:N	4	117.27
(1,376)	1:101:A:LYS:C	1:102:A:LYS:N	1:102:A:LYS:CA	1:102:A:LYS:C	13	116.88
(1,211)	1:17:A:ALA:C	1:18:A:PHE:N	1:18:A:PHE:CA	1:18:A:PHE:C	3	116.27
(1,211)	1:17:A:ALA:C	1:18:A:PHE:N	1:18:A:PHE:CA	1:18:A:PHE:C	19	116.26
(1,438)	1:124:A:ASP:N	1:124:A:ASP:CA	1:124:A:ASP:CB	1:124:A:ASP:CG	4	115.93
(1,277)	1:44:A:SER:N	1:44:A:SER:CA	1:44:A:SER:C	1:45:A:GLY:N	14	114.98
(1,434)	1:121:A:VAL:N	1:121:A:VAL:CA	1:121:A:VAL:CB	1:121:A:VAL:CG1	6	114.16
(1,376)	1:101:A:LYS:C	1:102:A:LYS:N	1:102:A:LYS:CA	1:102:A:LYS:C	10	113.9
(1,240)	1:26:A:GLY:N	1:26:A:GLY:CA	1:26:A:GLY:C	1:27:A:SER:N	9	113.82
(1,323)	1:69:A:ARG:N	1:69:A:ARG:CA	1:69:A:ARG:C	1:70:A:TRP:N	14	113.81
(1,271)	1:42:A:PRO:N	1:42:A:PRO:CA	1:42:A:PRO:C	1:43:A:HIS:N	7	113.73
(1,271)	1:42:A:PRO:N	1:42:A:PRO:CA	1:42:A:PRO:C	1:43:A:HIS:N	15	113.7
(1,211)	1:17:A:ALA:C	1:18:A:PHE:N	1:18:A:PHE:CA	1:18:A:PHE:C	20	113.58
(1,282)	1:48:A:ASP:N	1:48:A:ASP:CA	1:48:A:ASP:CB	1:48:A:ASP:CG	18	113.36
(1,377)	1:102:A:LYS:N	1:102:A:LYS:CA	1:102:A:LYS:CB	1:102:A:LYS:CG	12	113.08
(1,337)	1:79:A:GLU:N	1:79:A:GLU:CA	1:79:A:GLU:CB	1:79:A:GLU:CG	15	112.71
(1,211)	1:17:A:ALA:C	1:18:A:PHE:N	1:18:A:PHE:CA	1:18:A:PHE:C	13	112.58
(1,55)	1:72:A:LYS:C	1:73:A:HIS:N	1:73:A:HIS:CA	2:173:A:CU1:CU	1	112.03
(1,376)	1:101:A:LYS:C	1:102:A:LYS:N	1:102:A:LYS:CA	1:102:A:LYS:C	1	112.0
(1,277)	1:44:A:SER:N	1:44:A:SER:CA	1:44:A:SER:C	1:45:A:GLY:N	18	111.38
(1,211)	1:17:A:ALA:C	1:18:A:PHE:N	1:18:A:PHE:CA	1:18:A:PHE:C	17	111.28
(1,233)	1:24:A:ASN:N	1:24:A:ASN:CA	1:24:A:ASN:CB	1:24:A:ASN:CG	6	110.92
(1,340)	1:80:A:HIS:CA	1:80:A:HIS:CB	1:80:A:HIS:CG	1:80:A:HIS:ND1	4	110.84
(1,302)	1:62:A:LEU:CA	1:62:A:LEU:CB	1:62:A:LEU:CG	1:62:A:LEU:CD2	9	110.76
(1,277)	1:44:A:SER:N	1:44:A:SER:CA	1:44:A:SER:C	1:45:A:GLY:N	3	110.52
(1,340)	1:80:A:HIS:CA	1:80:A:HIS:CB	1:80:A:HIS:CG	1:80:A:HIS:ND1	16	110.44
(1,211)	1:17:A:ALA:C	1:18:A:PHE:N	1:18:A:PHE:CA	1:18:A:PHE:C	15	110.13
(1,211)	1:17:A:ALA:C	1:18:A:PHE:N	1:18:A:PHE:CA	1:18:A:PHE:C	14	109.81
(1,211)	1:17:A:ALA:C	1:18:A:PHE:N	1:18:A:PHE:CA	1:18:A:PHE:C	8	109.33
(1,233)	1:24:A:ASN:N	1:24:A:ASN:CA	1:24:A:ASN:CB	1:24:A:ASN:CG	12	109.03
(1,340)	1:80:A:HIS:CA	1:80:A:HIS:CB	1:80:A:HIS:CG	1:80:A:HIS:ND1	5	109.02
(1,377)	1:102:A:LYS:N	1:102:A:LYS:CA	1:102:A:LYS:CB	1:102:A:LYS:CG	16	108.8
(1,216)	1:19:A:GLY:C	1:20:A:PHE:N	1:20:A:PHE:CA	1:20:A:PHE:C	4	108.8
(1,323)	1:69:A:ARG:N	1:69:A:ARG:CA	1:69:A:ARG:C	1:70:A:TRP:N	12	108.25
(1,302)	1:62:A:LEU:CA	1:62:A:LEU:CB	1:62:A:LEU:CG	1:62:A:LEU:CD2	10	108.25
(1,498)	1:157:A:THR:N	1:157:A:THR:CA	1:157:A:THR:CB	1:157:A:THR:OG1	7	108.06
(1,211)	1:17:A:ALA:C	1:18:A:PHE:N	1:18:A:PHE:CA	1:18:A:PHE:C	18	107.78
(1,211)	1:17:A:ALA:C	1:18:A:PHE:N	1:18:A:PHE:CA	1:18:A:PHE:C	7	107.46
(1,498)	1:157:A:THR:N	1:157:A:THR:CA	1:157:A:THR:CB	1:157:A:THR:OG1	4	107.44
(1,284)	1:49:A:GLY:C	1:50:A:GLN:N	1:50:A:GLN:CA	1:50:A:GLN:C	19	107.34
(1,284)	1:49:A:GLY:C	1:50:A:GLN:N	1:50:A:GLN:CA	1:50:A:GLN:C	17	107.08
(1,211)	1:17:A:ALA:C	1:18:A:PHE:N	1:18:A:PHE:CA	1:18:A:PHE:C	1	107.0
(1,275)	1:43:A:HIS:C	1:44:A:SER:N	1:44:A:SER:CA	1:44:A:SER:C	15	106.92
(1,376)	1:101:A:LYS:C	1:102:A:LYS:N	1:102:A:LYS:CA	1:102:A:LYS:C	17	106.76
(1,211)	1:17:A:ALA:C	1:18:A:PHE:N	1:18:A:PHE:CA	1:18:A:PHE:C	2	106.58
(1,211)	1:17:A:ALA:C	1:18:A:PHE:N	1:18:A:PHE:CA	1:18:A:PHE:C	5	106.55
(1,438)	1:124:A:ASP:N	1:124:A:ASP:CA	1:124:A:ASP:CB	1:124:A:ASP:CG	1	106.53

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,337)	1:79:A:GLU:N	1:79:A:GLU:CA	1:79:A:GLU:CB	1:79:A:GLU:CG	13	106.47
(1,450)	1:132:A:LEU:CA	1:132:A:LEU:CB	1:132:A:LEU:CG	1:132:A:LEU:CD2	5	106.08
(1,376)	1:101:A:LYS:C	1:102:A:LYS:N	1:102:A:LYS:CA	1:102:A:LYS:C	5	106.08
(1,240)	1:26:A:GLY:N	1:26:A:GLY:CA	1:26:A:GLY:C	1:27:A:SER:N	18	106.0
(1,216)	1:19:A:GLY:C	1:20:A:PHE:N	1:20:A:PHE:CA	1:20:A:PHE:C	16	105.88
(1,376)	1:101:A:LYS:C	1:102:A:LYS:N	1:102:A:LYS:CA	1:102:A:LYS:C	7	105.84
(1,216)	1:19:A:GLY:C	1:20:A:PHE:N	1:20:A:PHE:CA	1:20:A:PHE:C	9	105.51
(1,398)	1:109:A:PRO:N	1:109:A:PRO:CA	1:109:A:PRO:C	1:110:A:LEU:N	11	105.37
(1,498)	1:157:A:THR:N	1:157:A:THR:CA	1:157:A:THR:CB	1:157:A:THR:OG1	17	104.89
(1,376)	1:101:A:LYS:C	1:102:A:LYS:N	1:102:A:LYS:CA	1:102:A:LYS:C	15	104.65
(1,450)	1:132:A:LEU:CA	1:132:A:LEU:CB	1:132:A:LEU:CG	1:132:A:LEU:CD2	19	104.49
(1,498)	1:157:A:THR:N	1:157:A:THR:CA	1:157:A:THR:CB	1:157:A:THR:OG1	2	104.46
(1,294)	1:57:A:LEU:N	1:57:A:LEU:CA	1:57:A:LEU:CB	1:57:A:LEU:CG	6	104.38
(1,277)	1:44:A:SER:N	1:44:A:SER:CA	1:44:A:SER:C	1:45:A:GLY:N	17	104.35
(1,216)	1:19:A:GLY:C	1:20:A:PHE:N	1:20:A:PHE:CA	1:20:A:PHE:C	17	104.26
(1,277)	1:44:A:SER:N	1:44:A:SER:CA	1:44:A:SER:C	1:45:A:GLY:N	1	103.92
(1,296)	1:57:A:LEU:N	1:57:A:LEU:CA	1:57:A:LEU:C	1:58:A:PHE:N	4	103.87
(1,216)	1:19:A:GLY:C	1:20:A:PHE:N	1:20:A:PHE:CA	1:20:A:PHE:C	13	103.85
(1,302)	1:62:A:LEU:CA	1:62:A:LEU:CB	1:62:A:LEU:CG	1:62:A:LEU:CD2	16	103.72
(1,414)	1:114:A:ASP:N	1:114:A:ASP:CA	1:114:A:ASP:CB	1:114:A:ASP:CG	7	103.65
(1,275)	1:43:A:HIS:C	1:44:A:SER:N	1:44:A:SER:CA	1:44:A:SER:C	4	103.47
(1,337)	1:79:A:GLU:N	1:79:A:GLU:CA	1:79:A:GLU:CB	1:79:A:GLU:CG	2	103.07
(1,376)	1:101:A:LYS:C	1:102:A:LYS:N	1:102:A:LYS:CA	1:102:A:LYS:C	3	102.99
(1,211)	1:17:A:ALA:C	1:18:A:PHE:N	1:18:A:PHE:CA	1:18:A:PHE:C	12	102.89
(1,340)	1:80:A:HIS:CA	1:80:A:HIS:CB	1:80:A:HIS:CG	1:80:A:HIS:ND1	2	102.88
(1,323)	1:69:A:ARG:N	1:69:A:ARG:CA	1:69:A:ARG:C	1:70:A:TRP:N	3	102.79
(1,275)	1:43:A:HIS:C	1:44:A:SER:N	1:44:A:SER:CA	1:44:A:SER:C	13	102.52
(1,240)	1:26:A:GLY:N	1:26:A:GLY:CA	1:26:A:GLY:C	1:27:A:SER:N	11	102.41
(1,216)	1:19:A:GLY:C	1:20:A:PHE:N	1:20:A:PHE:CA	1:20:A:PHE:C	3	102.11
(1,284)	1:49:A:GLY:C	1:50:A:GLN:N	1:50:A:GLN:CA	1:50:A:GLN:C	20	101.95
(1,376)	1:101:A:LYS:C	1:102:A:LYS:N	1:102:A:LYS:CA	1:102:A:LYS:C	6	101.86
(1,302)	1:62:A:LEU:CA	1:62:A:LEU:CB	1:62:A:LEU:CG	1:62:A:LEU:CD2	2	101.82
(1,377)	1:102:A:LYS:N	1:102:A:LYS:CA	1:102:A:LYS:CB	1:102:A:LYS:CG	20	101.8
(1,525)	1:172:A:LYS:N	1:172:A:LYS:CA	1:172:A:LYS:CB	1:172:A:LYS:CG	11	101.72
(1,498)	1:157:A:THR:N	1:157:A:THR:CA	1:157:A:THR:CB	1:157:A:THR:OG1	12	101.45
(1,376)	1:101:A:LYS:C	1:102:A:LYS:N	1:102:A:LYS:CA	1:102:A:LYS:C	16	101.44
(1,376)	1:101:A:LYS:C	1:102:A:LYS:N	1:102:A:LYS:CA	1:102:A:LYS:C	4	101.08
(1,300)	1:61:A:ILE:CA	1:61:A:ILE:CB	1:61:A:ILE:CG1	1:61:A:ILE:CD1	16	100.93
(1,282)	1:48:A:ASP:N	1:48:A:ASP:CA	1:48:A:ASP:CB	1:48:A:ASP:CG	4	100.74
(1,525)	1:172:A:LYS:N	1:172:A:LYS:CA	1:172:A:LYS:CB	1:172:A:LYS:CG	3	100.4
(1,377)	1:102:A:LYS:N	1:102:A:LYS:CA	1:102:A:LYS:CB	1:102:A:LYS:CG	8	100.4
(1,296)	1:57:A:LEU:N	1:57:A:LEU:CA	1:57:A:LEU:C	1:58:A:PHE:N	13	100.34
(1,240)	1:26:A:GLY:N	1:26:A:GLY:CA	1:26:A:GLY:C	1:27:A:SER:N	5	100.15
(1,414)	1:114:A:ASP:N	1:114:A:ASP:CA	1:114:A:ASP:CB	1:114:A:ASP:CG	12	99.99
(1,498)	1:157:A:THR:N	1:157:A:THR:CA	1:157:A:THR:CB	1:157:A:THR:OG1	13	99.83
(1,337)	1:79:A:GLU:N	1:79:A:GLU:CA	1:79:A:GLU:CB	1:79:A:GLU:CG	8	99.79
(1,300)	1:61:A:ILE:CA	1:61:A:ILE:CB	1:61:A:ILE:CG1	1:61:A:ILE:CD1	4	99.66
(1,282)	1:48:A:ASP:N	1:48:A:ASP:CA	1:48:A:ASP:CB	1:48:A:ASP:CG	13	99.59
(1,277)	1:44:A:SER:N	1:44:A:SER:CA	1:44:A:SER:C	1:45:A:GLY:N	12	99.5
(1,511)	1:163:A:GLN:N	1:163:A:GLN:CA	1:163:A:GLN:CB	1:163:A:GLN:CG	5	99.38
(1,216)	1:19:A:GLY:C	1:20:A:PHE:N	1:20:A:PHE:CA	1:20:A:PHE:C	8	99.26

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,282)	1:48:A:ASP:N	1:48:A:ASP:CA	1:48:A:ASP:CB	1:48:A:ASP:CG	5	99.03
(1,498)	1:157:A:THR:N	1:157:A:THR:CA	1:157:A:THR:CB	1:157:A:THR:OG1	3	98.91
(1,498)	1:157:A:THR:N	1:157:A:THR:CA	1:157:A:THR:CB	1:157:A:THR:OG1	11	98.79
(1,282)	1:48:A:ASP:N	1:48:A:ASP:CA	1:48:A:ASP:CB	1:48:A:ASP:CG	11	98.78
(1,282)	1:48:A:ASP:N	1:48:A:ASP:CA	1:48:A:ASP:CB	1:48:A:ASP:CG	15	98.63
(1,525)	1:172:A:LYS:N	1:172:A:LYS:CA	1:172:A:LYS:CB	1:172:A:LYS:CG	18	98.16
(1,328)	1:72:A:LYS:N	1:72:A:LYS:CA	1:72:A:LYS:CB	1:72:A:LYS:CG	15	97.98
(1,525)	1:172:A:LYS:N	1:172:A:LYS:CA	1:172:A:LYS:CB	1:172:A:LYS:CG	15	97.93
(1,216)	1:19:A:GLY:C	1:20:A:PHE:N	1:20:A:PHE:CA	1:20:A:PHE:C	5	97.72
(1,437)	1:123:A:HIS:C	1:124:A:ASP:N	1:124:A:ASP:CA	1:124:A:ASP:C	9	97.7
(1,294)	1:57:A:LEU:N	1:57:A:LEU:CA	1:57:A:LEU:CB	1:57:A:LEU:CG	17	97.64
(1,275)	1:43:A:HIS:C	1:44:A:SER:N	1:44:A:SER:CA	1:44:A:SER:C	9	97.56
(1,282)	1:48:A:ASP:N	1:48:A:ASP:CA	1:48:A:ASP:CB	1:48:A:ASP:CG	10	97.5
(1,337)	1:79:A:GLU:N	1:79:A:GLU:CA	1:79:A:GLU:CB	1:79:A:GLU:CG	10	97.23
(1,337)	1:79:A:GLU:N	1:79:A:GLU:CA	1:79:A:GLU:CB	1:79:A:GLU:CG	12	96.75
(1,240)	1:26:A:GLY:N	1:26:A:GLY:CA	1:26:A:GLY:C	1:27:A:SER:N	16	96.71
(1,337)	1:79:A:GLU:N	1:79:A:GLU:CA	1:79:A:GLU:CB	1:79:A:GLU:CG	1	96.64
(1,240)	1:26:A:GLY:N	1:26:A:GLY:CA	1:26:A:GLY:C	1:27:A:SER:N	8	96.36
(1,282)	1:48:A:ASP:N	1:48:A:ASP:CA	1:48:A:ASP:CB	1:48:A:ASP:CG	16	96.11
(1,525)	1:172:A:LYS:N	1:172:A:LYS:CA	1:172:A:LYS:CB	1:172:A:LYS:CG	16	96.03
(1,444)	1:127:A:PRO:N	1:127:A:PRO:CA	1:127:A:PRO:C	1:128:A:ALA:N	3	95.94
(1,275)	1:43:A:HIS:C	1:44:A:SER:N	1:44:A:SER:CA	1:44:A:SER:C	10	95.86
(1,294)	1:57:A:LEU:N	1:57:A:LEU:CA	1:57:A:LEU:CB	1:57:A:LEU:CG	13	95.84
(1,227)	1:22:A:ASN:N	1:22:A:ASN:CA	1:22:A:ASN:C	1:23:A:LEU:N	5	95.65
(1,414)	1:114:A:ASP:N	1:114:A:ASP:CA	1:114:A:ASP:CB	1:114:A:ASP:CG	9	95.24
(1,328)	1:72:A:LYS:N	1:72:A:LYS:CA	1:72:A:LYS:CB	1:72:A:LYS:CG	2	95.16
(1,216)	1:19:A:GLY:C	1:20:A:PHE:N	1:20:A:PHE:CA	1:20:A:PHE:C	15	95.15
(1,520)	1:169:A:LEU:CA	1:169:A:LEU:CB	1:169:A:LEU:CG	1:169:A:LEU:CD1	4	95.01
(1,377)	1:102:A:LYS:N	1:102:A:LYS:CA	1:102:A:LYS:CB	1:102:A:LYS:CG	17	94.92
(1,216)	1:19:A:GLY:C	1:20:A:PHE:N	1:20:A:PHE:CA	1:20:A:PHE:C	18	94.86
(1,55)	1:72:A:LYS:C	1:73:A:HIS:N	1:73:A:HIS:CA	2:173:A:CU1:CU	13	94.86
(1,376)	1:101:A:LYS:C	1:102:A:LYS:N	1:102:A:LYS:CA	1:102:A:LYS:C	14	94.83
(1,275)	1:43:A:HIS:C	1:44:A:SER:N	1:44:A:SER:CA	1:44:A:SER:C	3	94.81
(1,282)	1:48:A:ASP:N	1:48:A:ASP:CA	1:48:A:ASP:CB	1:48:A:ASP:CG	14	94.79
(1,376)	1:101:A:LYS:C	1:102:A:LYS:N	1:102:A:LYS:CA	1:102:A:LYS:C	2	94.57
(1,240)	1:26:A:GLY:N	1:26:A:GLY:CA	1:26:A:GLY:C	1:27:A:SER:N	2	94.04
(1,282)	1:48:A:ASP:N	1:48:A:ASP:CA	1:48:A:ASP:CB	1:48:A:ASP:CG	12	93.82
(1,294)	1:57:A:LEU:N	1:57:A:LEU:CA	1:57:A:LEU:CB	1:57:A:LEU:CG	11	93.6
(1,498)	1:157:A:THR:N	1:157:A:THR:CA	1:157:A:THR:CB	1:157:A:THR:OG1	18	93.37
(1,277)	1:44:A:SER:N	1:44:A:SER:CA	1:44:A:SER:C	1:45:A:GLY:N	20	93.3
(1,282)	1:48:A:ASP:N	1:48:A:ASP:CA	1:48:A:ASP:CB	1:48:A:ASP:CG	7	93.27
(1,328)	1:72:A:LYS:N	1:72:A:LYS:CA	1:72:A:LYS:CB	1:72:A:LYS:CG	4	93.05
(1,294)	1:57:A:LEU:N	1:57:A:LEU:CA	1:57:A:LEU:CB	1:57:A:LEU:CG	18	92.99
(1,282)	1:48:A:ASP:N	1:48:A:ASP:CA	1:48:A:ASP:CB	1:48:A:ASP:CG	9	92.87
(1,525)	1:172:A:LYS:N	1:172:A:LYS:CA	1:172:A:LYS:CB	1:172:A:LYS:CG	6	92.78
(1,511)	1:163:A:GLN:N	1:163:A:GLN:CA	1:163:A:GLN:CB	1:163:A:GLN:CG	3	92.64
(1,268)	1:39:A:LYS:N	1:39:A:LYS:CA	1:39:A:LYS:CB	1:39:A:LYS:CG	10	92.64
(1,361)	1:96:A:HIS:N	1:96:A:HIS:CA	1:96:A:HIS:CB	1:96:A:HIS:CG	12	92.47
(1,376)	1:101:A:LYS:C	1:102:A:LYS:N	1:102:A:LYS:CA	1:102:A:LYS:C	8	92.24
(1,498)	1:157:A:THR:N	1:157:A:THR:CA	1:157:A:THR:CB	1:157:A:THR:OG1	9	92.0
(1,525)	1:172:A:LYS:N	1:172:A:LYS:CA	1:172:A:LYS:CB	1:172:A:LYS:CG	12	91.89

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,275)	1:43:A:HIS:C	1:44:A:SER:N	1:44:A:SER:CA	1:44:A:SER:C	14	91.65
(1,294)	1:57:A:LEU:N	1:57:A:LEU:CA	1:57:A:LEU:CB	1:57:A:LEU:CG	1	91.41
(1,328)	1:72:A:LYS:N	1:72:A:LYS:CA	1:72:A:LYS:CB	1:72:A:LYS:CG	7	91.37
(1,267)	1:38:A:LYS:N	1:38:A:LYS:CA	1:38:A:LYS:C	1:39:A:LYS:N	19	91.16
(1,414)	1:114:A:ASP:N	1:114:A:ASP:CA	1:114:A:ASP:CB	1:114:A:ASP:CG	5	91.02
(1,498)	1:157:A:THR:N	1:157:A:THR:CA	1:157:A:THR:CB	1:157:A:THR:OG1	16	91.0
(1,482)	1:145:A:TYR:N	1:145:A:TYR:CA	1:145:A:TYR:CB	1:145:A:TYR:CG	19	90.54
(1,414)	1:114:A:ASP:N	1:114:A:ASP:CA	1:114:A:ASP:CB	1:114:A:ASP:CG	11	90.5
(1,498)	1:157:A:THR:N	1:157:A:THR:CA	1:157:A:THR:CB	1:157:A:THR:OG1	8	90.49
(1,216)	1:19:A:GLY:C	1:20:A:PHE:N	1:20:A:PHE:CA	1:20:A:PHE:C	12	90.42
(1,282)	1:48:A:ASP:N	1:48:A:ASP:CA	1:48:A:ASP:CB	1:48:A:ASP:CG	2	90.38
(1,55)	1:72:A:LYS:C	1:73:A:HIS:N	1:73:A:HIS:CA	2:173:A:CU1:CU	8	90.24
(1,224)	1:21:A:LEU:C	1:22:A:ASN:N	1:22:A:ASN:CA	1:22:A:ASN:C	5	90.05
(1,294)	1:57:A:LEU:N	1:57:A:LEU:CA	1:57:A:LEU:CB	1:57:A:LEU:CG	14	89.92
(1,282)	1:48:A:ASP:N	1:48:A:ASP:CA	1:48:A:ASP:CB	1:48:A:ASP:CG	6	89.33
(1,216)	1:19:A:GLY:C	1:20:A:PHE:N	1:20:A:PHE:CA	1:20:A:PHE:C	20	88.71
(1,216)	1:19:A:GLY:C	1:20:A:PHE:N	1:20:A:PHE:CA	1:20:A:PHE:C	2	88.52
(1,511)	1:163:A:GLN:N	1:163:A:GLN:CA	1:163:A:GLN:CB	1:163:A:GLN:CG	2	88.5
(1,282)	1:48:A:ASP:N	1:48:A:ASP:CA	1:48:A:ASP:CB	1:48:A:ASP:CG	19	88.37
(1,444)	1:127:A:PRO:N	1:127:A:PRO:CA	1:127:A:PRO:C	1:128:A:ALA:N	5	88.33
(1,376)	1:101:A:LYS:C	1:102:A:LYS:N	1:102:A:LYS:CA	1:102:A:LYS:C	9	87.86
(1,511)	1:163:A:GLN:N	1:163:A:GLN:CA	1:163:A:GLN:CB	1:163:A:GLN:CG	12	87.81
(1,272)	1:42:A:PRO:C	1:43:A:HIS:N	1:43:A:HIS:CA	1:43:A:HIS:C	9	87.76
(1,294)	1:57:A:LEU:N	1:57:A:LEU:CA	1:57:A:LEU:CB	1:57:A:LEU:CG	20	87.63
(1,282)	1:48:A:ASP:N	1:48:A:ASP:CA	1:48:A:ASP:CB	1:48:A:ASP:CG	17	87.48
(1,415)	1:114:A:ASP:N	1:114:A:ASP:CA	1:114:A:ASP:C	1:115:A:PHE:N	3	87.24
(1,294)	1:57:A:LEU:N	1:57:A:LEU:CA	1:57:A:LEU:CB	1:57:A:LEU:CG	12	87.02
(1,498)	1:157:A:THR:N	1:157:A:THR:CA	1:157:A:THR:CB	1:157:A:THR:OG1	19	87.01
(1,296)	1:57:A:LEU:N	1:57:A:LEU:CA	1:57:A:LEU:C	1:58:A:PHE:N	19	86.86
(1,277)	1:44:A:SER:N	1:44:A:SER:CA	1:44:A:SER:C	1:45:A:GLY:N	5	86.79
(1,277)	1:44:A:SER:N	1:44:A:SER:CA	1:44:A:SER:C	1:45:A:GLY:N	9	86.76
(1,294)	1:57:A:LEU:N	1:57:A:LEU:CA	1:57:A:LEU:CB	1:57:A:LEU:CG	10	86.57
(1,498)	1:157:A:THR:N	1:157:A:THR:CA	1:157:A:THR:CB	1:157:A:THR:OG1	15	86.22
(1,398)	1:109:A:PRO:N	1:109:A:PRO:CA	1:109:A:PRO:C	1:110:A:LEU:N	8	86.16
(1,337)	1:79:A:GLU:N	1:79:A:GLU:CA	1:79:A:GLU:CB	1:79:A:GLU:CG	3	85.78
(1,282)	1:48:A:ASP:N	1:48:A:ASP:CA	1:48:A:ASP:CB	1:48:A:ASP:CG	8	85.71
(1,282)	1:48:A:ASP:N	1:48:A:ASP:CA	1:48:A:ASP:CB	1:48:A:ASP:CG	1	85.47
(1,414)	1:114:A:ASP:N	1:114:A:ASP:CA	1:114:A:ASP:CB	1:114:A:ASP:CG	13	85.24
(1,525)	1:172:A:LYS:N	1:172:A:LYS:CA	1:172:A:LYS:CB	1:172:A:LYS:CG	13	85.21
(1,294)	1:57:A:LEU:N	1:57:A:LEU:CA	1:57:A:LEU:CB	1:57:A:LEU:CG	4	84.84
(1,294)	1:57:A:LEU:N	1:57:A:LEU:CA	1:57:A:LEU:CB	1:57:A:LEU:CG	5	84.47
(1,511)	1:163:A:GLN:N	1:163:A:GLN:CA	1:163:A:GLN:CB	1:163:A:GLN:CG	15	84.16
(1,294)	1:57:A:LEU:N	1:57:A:LEU:CA	1:57:A:LEU:CB	1:57:A:LEU:CG	9	84.05
(1,498)	1:157:A:THR:N	1:157:A:THR:CA	1:157:A:THR:CB	1:157:A:THR:OG1	5	84.03
(1,482)	1:145:A:TYR:N	1:145:A:TYR:CA	1:145:A:TYR:CB	1:145:A:TYR:CG	8	83.77
(1,277)	1:44:A:SER:N	1:44:A:SER:CA	1:44:A:SER:C	1:45:A:GLY:N	6	83.34
(1,414)	1:114:A:ASP:N	1:114:A:ASP:CA	1:114:A:ASP:CB	1:114:A:ASP:CG	3	83.26
(1,282)	1:48:A:ASP:N	1:48:A:ASP:CA	1:48:A:ASP:CB	1:48:A:ASP:CG	3	83.2
(1,282)	1:48:A:ASP:N	1:48:A:ASP:CA	1:48:A:ASP:CB	1:48:A:ASP:CG	20	83.17
(1,444)	1:127:A:PRO:N	1:127:A:PRO:CA	1:127:A:PRO:C	1:128:A:ALA:N	1	83.02
(1,482)	1:145:A:TYR:N	1:145:A:TYR:CA	1:145:A:TYR:CB	1:145:A:TYR:CG	16	82.98

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,294)	1:57:A:LEU:N	1:57:A:LEU:CA	1:57:A:LEU:CB	1:57:A:LEU:CG	15	82.87
(1,293)	1:56:A:GLY:C	1:57:A:LEU:N	1:57:A:LEU:CA	1:57:A:LEU:C	11	82.87
(1,340)	1:80:A:HIS:CA	1:80:A:HIS:CB	1:80:A:HIS:CG	1:80:A:HIS:ND1	10	82.61
(1,216)	1:19:A:GLY:C	1:20:A:PHE:N	1:20:A:PHE:CA	1:20:A:PHE:C	14	82.54
(1,240)	1:26:A:GLY:N	1:26:A:GLY:CA	1:26:A:GLY:C	1:27:A:SER:N	17	82.52
(1,414)	1:114:A:ASP:N	1:114:A:ASP:CA	1:114:A:ASP:CB	1:114:A:ASP:CG	19	82.48
(1,414)	1:114:A:ASP:N	1:114:A:ASP:CA	1:114:A:ASP:CB	1:114:A:ASP:CG	15	82.37
(1,498)	1:157:A:THR:N	1:157:A:THR:CA	1:157:A:THR:CB	1:157:A:THR:OG1	20	82.32
(1,318)	1:68:A:ASN:N	1:68:A:ASN:CA	1:68:A:ASN:CB	1:68:A:ASN:CG	4	82.15
(1,294)	1:57:A:LEU:N	1:57:A:LEU:CA	1:57:A:LEU:CB	1:57:A:LEU:CG	8	81.92
(1,361)	1:96:A:HIS:N	1:96:A:HIS:CA	1:96:A:HIS:CB	1:96:A:HIS:CG	1	81.85
(1,192)	1:8:A:GLY:N	1:8:A:GLY:CA	1:8:A:GLY:C	1:9:A:SER:N	12	81.62
(1,294)	1:57:A:LEU:N	1:57:A:LEU:CA	1:57:A:LEU:CB	1:57:A:LEU:CG	2	80.98
(1,511)	1:163:A:GLN:N	1:163:A:GLN:CA	1:163:A:GLN:CB	1:163:A:GLN:CG	6	80.69
(1,56)	1:73:A:HIS:N	1:73:A:HIS:CA	2:173:A:CU1:CU	1:51:A:ILE:N	17	80.58
(1,294)	1:57:A:LEU:N	1:57:A:LEU:CA	1:57:A:LEU:CB	1:57:A:LEU:CG	16	80.47
(1,56)	1:73:A:HIS:N	1:73:A:HIS:CA	2:173:A:CU1:CU	1:51:A:ILE:N	16	80.43
(1,293)	1:56:A:GLY:C	1:57:A:LEU:N	1:57:A:LEU:CA	1:57:A:LEU:C	15	80.13
(1,293)	1:56:A:GLY:C	1:57:A:LEU:N	1:57:A:LEU:CA	1:57:A:LEU:C	17	79.99
(1,318)	1:68:A:ASN:N	1:68:A:ASN:CA	1:68:A:ASN:CB	1:68:A:ASN:CG	19	79.92
(1,49)	1:69:A:ARG:C	1:70:A:TRP:N	1:70:A:TRP:CA	1:70:A:TRP:C	4	79.75
(1,294)	1:57:A:LEU:N	1:57:A:LEU:CA	1:57:A:LEU:CB	1:57:A:LEU:CG	19	79.59
(1,56)	1:73:A:HIS:N	1:73:A:HIS:CA	2:173:A:CU1:CU	1:51:A:ILE:N	13	79.59
(1,361)	1:96:A:HIS:N	1:96:A:HIS:CA	1:96:A:HIS:CB	1:96:A:HIS:CG	13	79.55
(1,482)	1:145:A:TYR:N	1:145:A:TYR:CA	1:145:A:TYR:CB	1:145:A:TYR:CG	12	79.42
(1,414)	1:114:A:ASP:N	1:114:A:ASP:CA	1:114:A:ASP:CB	1:114:A:ASP:CG	6	79.4
(1,438)	1:124:A:ASP:N	1:124:A:ASP:CA	1:124:A:ASP:CB	1:124:A:ASP:CG	5	79.05
(1,438)	1:124:A:ASP:N	1:124:A:ASP:CA	1:124:A:ASP:CB	1:124:A:ASP:CG	3	78.63
(1,49)	1:69:A:ARG:C	1:70:A:TRP:N	1:70:A:TRP:CA	1:70:A:TRP:C	2	78.51
(1,294)	1:57:A:LEU:N	1:57:A:LEU:CA	1:57:A:LEU:CB	1:57:A:LEU:CG	3	78.0
(1,482)	1:145:A:TYR:N	1:145:A:TYR:CA	1:145:A:TYR:CB	1:145:A:TYR:CG	17	77.95
(1,415)	1:114:A:ASP:N	1:114:A:ASP:CA	1:114:A:ASP:C	1:115:A:PHE:N	15	77.92
(1,293)	1:56:A:GLY:C	1:57:A:LEU:N	1:57:A:LEU:CA	1:57:A:LEU:C	2	77.82
(1,207)	1:16:A:GLU:N	1:16:A:GLU:CA	1:16:A:GLU:CB	1:16:A:GLU:CG	18	77.53
(1,275)	1:43:A:HIS:C	1:44:A:SER:N	1:44:A:SER:CA	1:44:A:SER:C	12	77.12
(1,277)	1:44:A:SER:N	1:44:A:SER:CA	1:44:A:SER:C	1:45:A:GLY:N	11	77.06
(1,56)	1:73:A:HIS:N	1:73:A:HIS:CA	2:173:A:CU1:CU	1:51:A:ILE:N	15	76.95
(1,240)	1:26:A:GLY:N	1:26:A:GLY:CA	1:26:A:GLY:C	1:27:A:SER:N	4	76.82
(1,216)	1:19:A:GLY:C	1:20:A:PHE:N	1:20:A:PHE:CA	1:20:A:PHE:C	11	76.65
(1,340)	1:80:A:HIS:CA	1:80:A:HIS:CB	1:80:A:HIS:CG	1:80:A:HIS:ND1	18	76.5
(1,293)	1:56:A:GLY:C	1:57:A:LEU:N	1:57:A:LEU:CA	1:57:A:LEU:C	13	76.49
(1,415)	1:114:A:ASP:N	1:114:A:ASP:CA	1:114:A:ASP:C	1:115:A:PHE:N	6	76.37
(1,414)	1:114:A:ASP:N	1:114:A:ASP:CA	1:114:A:ASP:CB	1:114:A:ASP:CG	20	75.45
(1,56)	1:73:A:HIS:N	1:73:A:HIS:CA	2:173:A:CU1:CU	1:51:A:ILE:N	18	75.44
(1,414)	1:114:A:ASP:N	1:114:A:ASP:CA	1:114:A:ASP:CB	1:114:A:ASP:CG	8	75.31
(1,438)	1:124:A:ASP:N	1:124:A:ASP:CA	1:124:A:ASP:CB	1:124:A:ASP:CG	15	74.95
(1,56)	1:73:A:HIS:N	1:73:A:HIS:CA	2:173:A:CU1:CU	1:51:A:ILE:N	8	74.95
(1,337)	1:79:A:GLU:N	1:79:A:GLU:CA	1:79:A:GLU:CB	1:79:A:GLU:CG	14	74.84
(1,444)	1:127:A:PRO:N	1:127:A:PRO:CA	1:127:A:PRO:C	1:128:A:ALA:N	11	74.67
(1,414)	1:114:A:ASP:N	1:114:A:ASP:CA	1:114:A:ASP:CB	1:114:A:ASP:CG	17	74.18
(1,56)	1:73:A:HIS:N	1:73:A:HIS:CA	2:173:A:CU1:CU	1:51:A:ILE:N	3	73.84

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,511)	1:163:A:GLN:N	1:163:A:GLN:CA	1:163:A:GLN:CB	1:163:A:GLN:CG	4	73.69
(1,102)	1:123:A:HIS:N	1:123:A:HIS:CA	1:123:A:HIS:C	1:124:A:ASP:N	10	73.26
(1,256)	1:34:A:SER:N	1:34:A:SER:CA	1:34:A:SER:CB	1:34:A:SER:OG	14	73.1
(1,482)	1:145:A:TYR:N	1:145:A:TYR:CA	1:145:A:TYR:CB	1:145:A:TYR:CG	15	73.07
(1,102)	1:123:A:HIS:N	1:123:A:HIS:CA	1:123:A:HIS:C	1:124:A:ASP:N	11	72.83
(1,240)	1:26:A:GLY:N	1:26:A:GLY:CA	1:26:A:GLY:C	1:27:A:SER:N	15	72.61
(1,116)	1:134:A:HIS:N	1:134:A:HIS:CA	2:173:A:CU1:CU	1:135:A:HIS:N	9	72.47
(1,398)	1:109:A:PRO:N	1:109:A:PRO:CA	1:109:A:PRO:C	1:110:A:LEU:N	13	72.18
(1,415)	1:114:A:ASP:N	1:114:A:ASP:CA	1:114:A:ASP:C	1:115:A:PHE:N	1	71.88
(1,415)	1:114:A:ASP:N	1:114:A:ASP:CA	1:114:A:ASP:C	1:115:A:PHE:N	20	71.79
(1,415)	1:114:A:ASP:N	1:114:A:ASP:CA	1:114:A:ASP:C	1:115:A:PHE:N	5	71.51
(1,102)	1:123:A:HIS:N	1:123:A:HIS:CA	1:123:A:HIS:C	1:124:A:ASP:N	5	71.4
(1,415)	1:114:A:ASP:N	1:114:A:ASP:CA	1:114:A:ASP:C	1:115:A:PHE:N	16	71.35
(1,362)	1:96:A:HIS:CA	1:96:A:HIS:CB	1:96:A:HIS:CG	1:96:A:HIS:ND1	12	71.12
(1,256)	1:34:A:SER:N	1:34:A:SER:CA	1:34:A:SER:CB	1:34:A:SER:OG	1	71.0
(1,116)	1:134:A:HIS:N	1:134:A:HIS:CA	2:173:A:CU1:CU	1:135:A:HIS:N	13	70.68
(1,240)	1:26:A:GLY:N	1:26:A:GLY:CA	1:26:A:GLY:C	1:27:A:SER:N	12	70.01
(1,56)	1:73:A:HIS:N	1:73:A:HIS:CA	2:173:A:CU1:CU	1:51:A:ILE:N	9	69.92
(1,277)	1:44:A:SER:N	1:44:A:SER:CA	1:44:A:SER:C	1:45:A:GLY:N	7	69.6
(1,293)	1:56:A:GLY:C	1:57:A:LEU:N	1:57:A:LEU:CA	1:57:A:LEU:C	7	69.28
(1,102)	1:123:A:HIS:N	1:123:A:HIS:CA	1:123:A:HIS:C	1:124:A:ASP:N	20	68.71
(1,438)	1:124:A:ASP:N	1:124:A:ASP:CA	1:124:A:ASP:CB	1:124:A:ASP:CG	17	68.63
(1,415)	1:114:A:ASP:N	1:114:A:ASP:CA	1:114:A:ASP:C	1:115:A:PHE:N	13	68.63
(1,235)	1:24:A:ASN:N	1:24:A:ASN:CA	1:24:A:ASN:C	1:25:A:CYS:N	10	68.12
(1,56)	1:73:A:HIS:N	1:73:A:HIS:CA	2:173:A:CU1:CU	1:51:A:ILE:N	12	67.56
(1,308)	1:64:A:GLN:N	1:64:A:GLN:CA	1:64:A:GLN:C	1:65:A:GLN:N	12	67.52
(1,49)	1:69:A:ARG:C	1:70:A:TRP:N	1:70:A:TRP:CA	1:70:A:TRP:C	11	67.36
(1,56)	1:73:A:HIS:N	1:73:A:HIS:CA	2:173:A:CU1:CU	1:51:A:ILE:N	2	67.06
(1,468)	1:140:A:GLU:N	1:140:A:GLU:CA	1:140:A:GLU:CB	1:140:A:GLU:CG	1	66.99
(1,58)	1:51:A:ILE:N	1:74:A:ILE:CA	1:74:A:ILE:C	1:75:A:MET:N	18	66.81
(1,444)	1:127:A:PRO:N	1:127:A:PRO:CA	1:127:A:PRO:C	1:128:A:ALA:N	12	66.58
(1,398)	1:109:A:PRO:N	1:109:A:PRO:CA	1:109:A:PRO:C	1:110:A:LEU:N	9	66.16
(1,56)	1:73:A:HIS:N	1:73:A:HIS:CA	2:173:A:CU1:CU	1:51:A:ILE:N	4	66.03
(1,415)	1:114:A:ASP:N	1:114:A:ASP:CA	1:114:A:ASP:C	1:115:A:PHE:N	18	65.73
(1,98)	1:115:A:PHE:N	1:115:A:PHE:CA	1:115:A:PHE:C	1:116:A:GLU:N	17	65.44
(1,398)	1:109:A:PRO:N	1:109:A:PRO:CA	1:109:A:PRO:C	1:110:A:LEU:N	5	65.37
(1,340)	1:80:A:HIS:CA	1:80:A:HIS:CB	1:80:A:HIS:CG	1:80:A:HIS:ND1	1	65.21
(1,398)	1:109:A:PRO:N	1:109:A:PRO:CA	1:109:A:PRO:C	1:110:A:LEU:N	7	65.09
(1,318)	1:68:A:ASN:N	1:68:A:ASN:CA	1:68:A:ASN:CB	1:68:A:ASN:CG	20	64.82
(1,102)	1:123:A:HIS:N	1:123:A:HIS:CA	1:123:A:HIS:C	1:124:A:ASP:N	2	64.7
(1,268)	1:39:A:LYS:N	1:39:A:LYS:CA	1:39:A:LYS:CB	1:39:A:LYS:CG	19	64.68
(1,56)	1:73:A:HIS:N	1:73:A:HIS:CA	2:173:A:CU1:CU	1:51:A:ILE:N	1	64.5
(1,49)	1:69:A:ARG:C	1:70:A:TRP:N	1:70:A:TRP:CA	1:70:A:TRP:C	7	64.27
(1,340)	1:80:A:HIS:CA	1:80:A:HIS:CB	1:80:A:HIS:CG	1:80:A:HIS:ND1	11	64.21
(1,393)	1:107:A:ASP:N	1:107:A:ASP:CA	1:107:A:ASP:C	1:108:A:LYS:N	3	64.2
(1,414)	1:114:A:ASP:N	1:114:A:ASP:CA	1:114:A:ASP:CB	1:114:A:ASP:CG	18	64.02
(1,237)	1:25:A:CYS:N	1:25:A:CYS:CA	1:25:A:CYS:CB	1:25:A:CYS:SG	5	63.75
(1,116)	1:134:A:HIS:N	1:134:A:HIS:CA	2:173:A:CU1:CU	1:135:A:HIS:N	10	63.67
(1,56)	1:73:A:HIS:N	1:73:A:HIS:CA	2:173:A:CU1:CU	1:51:A:ILE:N	14	63.63
(1,56)	1:73:A:HIS:N	1:73:A:HIS:CA	2:173:A:CU1:CU	1:51:A:ILE:N	7	63.62
(1,393)	1:107:A:ASP:N	1:107:A:ASP:CA	1:107:A:ASP:C	1:108:A:LYS:N	10	63.44

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,256)	1:34:A:SER:N	1:34:A:SER:CA	1:34:A:SER:CB	1:34:A:SER:OG	17	63.27
(1,56)	1:73:A:HIS:N	1:73:A:HIS:CA	2:173:A:CU1:CU	1:51:A:ILE:N	11	63.22
(1,49)	1:69:A:ARG:C	1:70:A:TRP:N	1:70:A:TRP:CA	1:70:A:TRP:C	9	63.22
(1,398)	1:109:A:PRO:N	1:109:A:PRO:CA	1:109:A:PRO:C	1:110:A:LEU:N	3	63.21
(1,235)	1:24:A:ASN:N	1:24:A:ASN:CA	1:24:A:ASN:C	1:25:A:CYS:N	8	62.8
(1,440)	1:124:A:ASP:N	1:124:A:ASP:CA	1:124:A:ASP:C	1:125:A:GLY:N	4	62.47
(1,116)	1:134:A:HIS:N	1:134:A:HIS:CA	2:173:A:CU1:CU	1:135:A:HIS:N	7	61.84
(1,22)	1:37:A:ALA:N	1:37:A:ALA:CA	1:37:A:ALA:C	1:38:A:LYS:N	19	61.63
(1,49)	1:69:A:ARG:C	1:70:A:TRP:N	1:70:A:TRP:CA	1:70:A:TRP:C	15	61.41
(1,233)	1:24:A:ASN:N	1:24:A:ASN:CA	1:24:A:ASN:CB	1:24:A:ASN:CG	16	61.05
(1,268)	1:39:A:LYS:N	1:39:A:LYS:CA	1:39:A:LYS:CB	1:39:A:LYS:CG	16	60.95
(1,470)	1:140:A:GLU:N	1:140:A:GLU:CA	1:140:A:GLU:C	1:141:A:ASP:N	10	60.92
(1,340)	1:80:A:HIS:CA	1:80:A:HIS:CB	1:80:A:HIS:CG	1:80:A:HIS:ND1	14	60.81
(1,295)	1:57:A:LEU:CA	1:57:A:LEU:CB	1:57:A:LEU:CG	1:57:A:LEU:CD1	7	60.81
(1,268)	1:39:A:LYS:N	1:39:A:LYS:CA	1:39:A:LYS:CB	1:39:A:LYS:CG	12	60.72
(1,293)	1:56:A:GLY:C	1:57:A:LEU:N	1:57:A:LEU:CA	1:57:A:LEU:C	3	60.62
(1,415)	1:114:A:ASP:N	1:114:A:ASP:CA	1:114:A:ASP:C	1:115:A:PHE:N	19	59.92
(1,268)	1:39:A:LYS:N	1:39:A:LYS:CA	1:39:A:LYS:CB	1:39:A:LYS:CG	8	59.88
(1,399)	1:109:A:PRO:C	1:110:A:LEU:N	1:110:A:LEU:CA	1:110:A:LEU:C	16	59.79
(1,268)	1:39:A:LYS:N	1:39:A:LYS:CA	1:39:A:LYS:CB	1:39:A:LYS:CG	4	59.7
(1,444)	1:127:A:PRO:N	1:127:A:PRO:CA	1:127:A:PRO:C	1:128:A:ALA:N	13	59.47
(1,398)	1:109:A:PRO:N	1:109:A:PRO:CA	1:109:A:PRO:C	1:110:A:LEU:N	18	59.43
(1,340)	1:80:A:HIS:CA	1:80:A:HIS:CB	1:80:A:HIS:CG	1:80:A:HIS:ND1	7	59.3
(1,56)	1:73:A:HIS:N	1:73:A:HIS:CA	2:173:A:CU1:CU	1:51:A:ILE:N	20	59.23
(1,102)	1:123:A:HIS:N	1:123:A:HIS:CA	1:123:A:HIS:C	1:124:A:ASP:N	18	59.13
(1,388)	1:105:A:ASP:N	1:105:A:ASP:CA	1:105:A:ASP:C	1:106:A:PRO:N	5	59.02
(1,482)	1:145:A:TYR:N	1:145:A:TYR:CA	1:145:A:TYR:CB	1:145:A:TYR:CG	4	59.01
(1,388)	1:105:A:ASP:N	1:105:A:ASP:CA	1:105:A:ASP:C	1:106:A:PRO:N	3	58.83
(1,500)	1:158:A:GLU:N	1:158:A:GLU:CA	1:158:A:GLU:CB	1:158:A:GLU:CG	13	58.63
(1,398)	1:109:A:PRO:N	1:109:A:PRO:CA	1:109:A:PRO:C	1:110:A:LEU:N	16	58.42
(1,230)	1:23:A:LEU:CA	1:23:A:LEU:CB	1:23:A:LEU:CG	1:23:A:LEU:CD2	2	58.33
(1,214)	1:18:A:PHE:N	1:18:A:PHE:CA	1:18:A:PHE:C	1:19:A:GLY:N	6	58.27
(1,393)	1:107:A:ASP:N	1:107:A:ASP:CA	1:107:A:ASP:C	1:108:A:LYS:N	19	58.13
(1,500)	1:158:A:GLU:N	1:158:A:GLU:CA	1:158:A:GLU:CB	1:158:A:GLU:CG	18	58.05
(1,102)	1:123:A:HIS:N	1:123:A:HIS:CA	1:123:A:HIS:C	1:124:A:ASP:N	16	57.99
(1,340)	1:80:A:HIS:CA	1:80:A:HIS:CB	1:80:A:HIS:CG	1:80:A:HIS:ND1	12	57.98
(1,398)	1:109:A:PRO:N	1:109:A:PRO:CA	1:109:A:PRO:C	1:110:A:LEU:N	12	57.85
(1,340)	1:80:A:HIS:CA	1:80:A:HIS:CB	1:80:A:HIS:CG	1:80:A:HIS:ND1	19	57.84
(1,240)	1:26:A:GLY:N	1:26:A:GLY:CA	1:26:A:GLY:C	1:27:A:SER:N	10	57.62
(1,268)	1:39:A:LYS:N	1:39:A:LYS:CA	1:39:A:LYS:CB	1:39:A:LYS:CG	3	57.46
(1,388)	1:105:A:ASP:N	1:105:A:ASP:CA	1:105:A:ASP:C	1:106:A:PRO:N	14	57.43
(1,295)	1:57:A:LEU:CA	1:57:A:LEU:CB	1:57:A:LEU:CG	1:57:A:LEU:CD1	19	57.15
(1,440)	1:124:A:ASP:N	1:124:A:ASP:CA	1:124:A:ASP:C	1:125:A:GLY:N	9	57.14
(1,49)	1:69:A:ARG:C	1:70:A:TRP:N	1:70:A:TRP:CA	1:70:A:TRP:C	10	56.94
(1,49)	1:69:A:ARG:C	1:70:A:TRP:N	1:70:A:TRP:CA	1:70:A:TRP:C	18	56.91
(1,398)	1:109:A:PRO:N	1:109:A:PRO:CA	1:109:A:PRO:C	1:110:A:LEU:N	19	56.88
(1,116)	1:134:A:HIS:N	1:134:A:HIS:CA	2:173:A:CU1:CU	1:135:A:HIS:N	4	56.75
(1,388)	1:105:A:ASP:N	1:105:A:ASP:CA	1:105:A:ASP:C	1:106:A:PRO:N	20	56.54
(1,58)	1:51:A:ILE:N	1:74:A:ILE:CA	1:74:A:ILE:C	1:75:A:MET:N	6	56.45
(1,268)	1:39:A:LYS:N	1:39:A:LYS:CA	1:39:A:LYS:CB	1:39:A:LYS:CG	18	56.41
(1,393)	1:107:A:ASP:N	1:107:A:ASP:CA	1:107:A:ASP:C	1:108:A:LYS:N	7	56.23

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,265)	1:38:A:LYS:N	1:38:A:LYS:CA	1:38:A:LYS:CB	1:38:A:LYS:CG	10	56.06
(1,393)	1:107:A:ASP:N	1:107:A:ASP:CA	1:107:A:ASP:C	1:108:A:LYS:N	1	56.02
(1,102)	1:123:A:HIS:N	1:123:A:HIS:CA	1:123:A:HIS:C	1:124:A:ASP:N	7	55.8
(1,398)	1:109:A:PRO:N	1:109:A:PRO:CA	1:109:A:PRO:C	1:110:A:LEU:N	1	55.34
(1,362)	1:96:A:HIS:CA	1:96:A:HIS:CB	1:96:A:HIS:CG	1:96:A:HIS:ND1	1	54.97
(1,56)	1:73:A:HIS:N	1:73:A:HIS:CA	2:173:A:CU1:CU	1:51:A:ILE:N	5	54.94
(1,500)	1:158:A:GLU:N	1:158:A:GLU:CA	1:158:A:GLU:CB	1:158:A:GLU:CG	3	54.87
(1,450)	1:132:A:LEU:CA	1:132:A:LEU:CB	1:132:A:LEU:CG	1:132:A:LEU:CD2	14	54.81
(1,293)	1:56:A:GLY:C	1:57:A:LEU:N	1:57:A:LEU:CA	1:57:A:LEU:C	18	54.77
(1,333)	1:75:A:MET:N	1:75:A:MET:CA	1:75:A:MET:CB	1:75:A:MET:CG	13	54.52
(1,214)	1:18:A:PHE:N	1:18:A:PHE:CA	1:18:A:PHE:C	1:19:A:GLY:N	17	54.08
(1,293)	1:56:A:GLY:C	1:57:A:LEU:N	1:57:A:LEU:CA	1:57:A:LEU:C	20	54.04
(1,49)	1:69:A:ARG:C	1:70:A:TRP:N	1:70:A:TRP:CA	1:70:A:TRP:C	19	53.85
(1,116)	1:134:A:HIS:N	1:134:A:HIS:CA	2:173:A:CU1:CU	1:135:A:HIS:N	16	53.79
(1,268)	1:39:A:LYS:N	1:39:A:LYS:CA	1:39:A:LYS:CB	1:39:A:LYS:CG	2	53.75
(1,293)	1:56:A:GLY:C	1:57:A:LEU:N	1:57:A:LEU:CA	1:57:A:LEU:C	12	53.58
(1,54)	1:72:A:LYS:N	1:72:A:LYS:CA	1:72:A:LYS:C	1:73:A:HIS:N	8	53.34
(1,362)	1:96:A:HIS:CA	1:96:A:HIS:CB	1:96:A:HIS:CG	1:96:A:HIS:ND1	13	53.29
(1,393)	1:107:A:ASP:N	1:107:A:ASP:CA	1:107:A:ASP:C	1:108:A:LYS:N	6	53.26
(1,393)	1:107:A:ASP:N	1:107:A:ASP:CA	1:107:A:ASP:C	1:108:A:LYS:N	18	53.21
(1,388)	1:105:A:ASP:N	1:105:A:ASP:CA	1:105:A:ASP:C	1:106:A:PRO:N	19	53.04
(1,293)	1:56:A:GLY:C	1:57:A:LEU:N	1:57:A:LEU:CA	1:57:A:LEU:C	5	52.98
(1,214)	1:18:A:PHE:N	1:18:A:PHE:CA	1:18:A:PHE:C	1:19:A:GLY:N	19	52.88
(1,293)	1:56:A:GLY:C	1:57:A:LEU:N	1:57:A:LEU:CA	1:57:A:LEU:C	8	52.85
(1,415)	1:114:A:ASP:N	1:114:A:ASP:CA	1:114:A:ASP:C	1:115:A:PHE:N	17	52.78
(1,22)	1:37:A:ALA:N	1:37:A:ALA:CA	1:37:A:ALA:C	1:38:A:LYS:N	20	52.4
(1,393)	1:107:A:ASP:N	1:107:A:ASP:CA	1:107:A:ASP:C	1:108:A:LYS:N	2	52.39
(1,58)	1:51:A:ILE:N	1:74:A:ILE:CA	1:74:A:ILE:C	1:75:A:MET:N	10	52.33
(1,49)	1:69:A:ARG:C	1:70:A:TRP:N	1:70:A:TRP:CA	1:70:A:TRP:C	16	52.29
(1,293)	1:56:A:GLY:C	1:57:A:LEU:N	1:57:A:LEU:CA	1:57:A:LEU:C	10	52.27
(1,398)	1:109:A:PRO:N	1:109:A:PRO:CA	1:109:A:PRO:C	1:110:A:LEU:N	20	52.25
(1,268)	1:39:A:LYS:N	1:39:A:LYS:CA	1:39:A:LYS:CB	1:39:A:LYS:CG	17	52.21
(1,268)	1:39:A:LYS:N	1:39:A:LYS:CA	1:39:A:LYS:CB	1:39:A:LYS:CG	14	52.2
(1,240)	1:26:A:GLY:N	1:26:A:GLY:CA	1:26:A:GLY:C	1:27:A:SER:N	19	51.93
(1,398)	1:109:A:PRO:N	1:109:A:PRO:CA	1:109:A:PRO:C	1:110:A:LEU:N	6	51.91
(1,517)	1:167:A:VAL:N	1:167:A:VAL:CA	1:167:A:VAL:CB	1:167:A:VAL:CG1	12	51.71
(1,49)	1:69:A:ARG:C	1:70:A:TRP:N	1:70:A:TRP:CA	1:70:A:TRP:C	5	51.71
(1,102)	1:123:A:HIS:N	1:123:A:HIS:CA	1:123:A:HIS:C	1:124:A:ASP:N	3	51.69
(1,293)	1:56:A:GLY:C	1:57:A:LEU:N	1:57:A:LEU:CA	1:57:A:LEU:C	19	51.56
(1,116)	1:134:A:HIS:N	1:134:A:HIS:CA	2:173:A:CU1:CU	1:135:A:HIS:N	5	51.54
(1,440)	1:124:A:ASP:N	1:124:A:ASP:CA	1:124:A:ASP:C	1:125:A:GLY:N	7	51.47
(1,56)	1:73:A:HIS:N	1:73:A:HIS:CA	2:173:A:CU1:CU	1:51:A:ILE:N	6	51.34
(1,308)	1:64:A:GLN:N	1:64:A:GLN:CA	1:64:A:GLN:C	1:65:A:GLN:N	5	51.3
(1,277)	1:44:A:SER:N	1:44:A:SER:CA	1:44:A:SER:C	1:45:A:GLY:N	2	51.25
(1,58)	1:51:A:ILE:N	1:74:A:ILE:CA	1:74:A:ILE:C	1:75:A:MET:N	7	51.23
(1,202)	1:14:A:CYS:N	1:14:A:CYS:CA	1:14:A:CYS:CB	1:14:A:CYS:SG	9	51.11
(1,398)	1:109:A:PRO:N	1:109:A:PRO:CA	1:109:A:PRO:C	1:110:A:LEU:N	14	51.02
(1,268)	1:39:A:LYS:N	1:39:A:LYS:CA	1:39:A:LYS:CB	1:39:A:LYS:CG	20	51.02
(1,500)	1:158:A:GLU:N	1:158:A:GLU:CA	1:158:A:GLU:CB	1:158:A:GLU:CG	16	50.94
(1,388)	1:105:A:ASP:N	1:105:A:ASP:CA	1:105:A:ASP:C	1:106:A:PRO:N	18	50.93
(1,500)	1:158:A:GLU:N	1:158:A:GLU:CA	1:158:A:GLU:CB	1:158:A:GLU:CG	8	50.88

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,333)	1:75:A:MET:N	1:75:A:MET:CA	1:75:A:MET:CB	1:75:A:MET:CG	5	50.72
(1,295)	1:57:A:LEU:CA	1:57:A:LEU:CB	1:57:A:LEU:CG	1:57:A:LEU:CD1	18	50.35
(1,49)	1:69:A:ARG:C	1:70:A:TRP:N	1:70:A:TRP:CA	1:70:A:TRP:C	8	50.28
(1,482)	1:145:A:TYR:N	1:145:A:TYR:CA	1:145:A:TYR:CB	1:145:A:TYR:CG	6	50.27
(1,333)	1:75:A:MET:N	1:75:A:MET:CA	1:75:A:MET:CB	1:75:A:MET:CG	4	50.08
(1,468)	1:140:A:GLU:N	1:140:A:GLU:CA	1:140:A:GLU:CB	1:140:A:GLU:CG	7	50.06
(1,48)	1:68:A:ASN:N	1:68:A:ASN:CA	1:68:A:ASN:C	1:69:A:ARG:N	12	49.91
(1,230)	1:23:A:LEU:CA	1:23:A:LEU:CB	1:23:A:LEU:CG	1:23:A:LEU:CD2	13	49.9
(1,414)	1:114:A:ASP:N	1:114:A:ASP:CA	1:114:A:ASP:CB	1:114:A:ASP:CG	16	49.88
(1,308)	1:64:A:GLN:N	1:64:A:GLN:CA	1:64:A:GLN:C	1:65:A:GLN:N	19	49.85
(1,398)	1:109:A:PRO:N	1:109:A:PRO:CA	1:109:A:PRO:C	1:110:A:LEU:N	17	49.83
(1,214)	1:18:A:PHE:N	1:18:A:PHE:CA	1:18:A:PHE:C	1:19:A:GLY:N	12	49.83
(1,333)	1:75:A:MET:N	1:75:A:MET:CA	1:75:A:MET:CB	1:75:A:MET:CG	1	49.82
(1,293)	1:56:A:GLY:C	1:57:A:LEU:N	1:57:A:LEU:CA	1:57:A:LEU:C	6	49.71
(1,415)	1:114:A:ASP:N	1:114:A:ASP:CA	1:114:A:ASP:C	1:115:A:PHE:N	9	49.69
(1,116)	1:134:A:HIS:N	1:134:A:HIS:CA	2:173:A:CU1:CU	1:135:A:HIS:N	14	49.52
(1,388)	1:105:A:ASP:N	1:105:A:ASP:CA	1:105:A:ASP:C	1:106:A:PRO:N	8	49.34
(1,340)	1:80:A:HIS:CA	1:80:A:HIS:CB	1:80:A:HIS:CG	1:80:A:HIS:ND1	20	49.0
(1,268)	1:39:A:LYS:N	1:39:A:LYS:CA	1:39:A:LYS:CB	1:39:A:LYS:CG	11	48.98
(1,467)	1:139:A:PRO:C	1:140:A:GLU:N	1:140:A:GLU:CA	1:140:A:GLU:C	10	48.95
(1,293)	1:56:A:GLY:C	1:57:A:LEU:N	1:57:A:LEU:CA	1:57:A:LEU:C	16	48.95
(1,393)	1:107:A:ASP:N	1:107:A:ASP:CA	1:107:A:ASP:C	1:108:A:LYS:N	11	48.94
(1,235)	1:24:A:ASN:N	1:24:A:ASN:CA	1:24:A:ASN:C	1:25:A:CYS:N	11	48.85
(1,393)	1:107:A:ASP:N	1:107:A:ASP:CA	1:107:A:ASP:C	1:108:A:LYS:N	4	48.81
(1,388)	1:105:A:ASP:N	1:105:A:ASP:CA	1:105:A:ASP:C	1:106:A:PRO:N	16	48.81
(1,56)	1:73:A:HIS:N	1:73:A:HIS:CA	2:173:A:CU1:CU	1:51:A:ILE:N	19	48.78
(1,393)	1:107:A:ASP:N	1:107:A:ASP:CA	1:107:A:ASP:C	1:108:A:LYS:N	8	48.5
(1,393)	1:107:A:ASP:N	1:107:A:ASP:CA	1:107:A:ASP:C	1:108:A:LYS:N	15	48.41
(1,56)	1:73:A:HIS:N	1:73:A:HIS:CA	2:173:A:CU1:CU	1:51:A:ILE:N	10	48.28
(1,452)	1:134:A:HIS:N	1:134:A:HIS:CA	1:134:A:HIS:CB	1:134:A:HIS:CG	2	48.12
(1,116)	1:134:A:HIS:N	1:134:A:HIS:CA	2:173:A:CU1:CU	1:135:A:HIS:N	17	48.09
(1,102)	1:123:A:HIS:N	1:123:A:HIS:CA	1:123:A:HIS:C	1:124:A:ASP:N	6	48.05
(1,308)	1:64:A:GLN:N	1:64:A:GLN:CA	1:64:A:GLN:C	1:65:A:GLN:N	16	48.03
(1,340)	1:80:A:HIS:CA	1:80:A:HIS:CB	1:80:A:HIS:CG	1:80:A:HIS:ND1	9	47.85
(1,240)	1:26:A:GLY:N	1:26:A:GLY:CA	1:26:A:GLY:C	1:27:A:SER:N	13	47.73
(1,293)	1:56:A:GLY:C	1:57:A:LEU:N	1:57:A:LEU:CA	1:57:A:LEU:C	9	47.49
(1,340)	1:80:A:HIS:CA	1:80:A:HIS:CB	1:80:A:HIS:CG	1:80:A:HIS:ND1	3	47.44
(1,308)	1:64:A:GLN:N	1:64:A:GLN:CA	1:64:A:GLN:C	1:65:A:GLN:N	8	47.3
(1,465)	1:138:A:ILE:N	1:138:A:ILE:CA	1:138:A:ILE:C	1:139:A:PRO:N	19	47.02
(1,452)	1:134:A:HIS:N	1:134:A:HIS:CA	1:134:A:HIS:CB	1:134:A:HIS:CG	16	46.95
(1,470)	1:140:A:GLU:N	1:140:A:GLU:CA	1:140:A:GLU:C	1:141:A:ASP:N	14	46.82
(1,24)	1:47:A:ALA:N	1:47:A:ALA:CA	1:47:A:ALA:C	1:48:A:ASP:N	16	46.77
(1,187)	1:5:A:GLU:N	1:5:A:GLU:CA	1:5:A:GLU:CB	1:5:A:GLU:CG	6	46.72
(1,308)	1:64:A:GLN:N	1:64:A:GLN:CA	1:64:A:GLN:C	1:65:A:GLN:N	7	46.43
(1,214)	1:18:A:PHE:N	1:18:A:PHE:CA	1:18:A:PHE:C	1:19:A:GLY:N	14	46.38
(1,24)	1:47:A:ALA:N	1:47:A:ALA:CA	1:47:A:ALA:C	1:48:A:ASP:N	7	46.29
(1,145)	1:159:A:ASN:C	1:160:A:ALA:N	1:160:A:ALA:CA	1:160:A:ALA:C	19	46.18
(1,482)	1:145:A:TYR:N	1:145:A:TYR:CA	1:145:A:TYR:CB	1:145:A:TYR:CG	3	46.12
(1,58)	1:51:A:ILE:N	1:74:A:ILE:CA	1:74:A:ILE:C	1:75:A:MET:N	5	45.93
(1,214)	1:18:A:PHE:N	1:18:A:PHE:CA	1:18:A:PHE:C	1:19:A:GLY:N	7	45.87
(1,467)	1:139:A:PRO:C	1:140:A:GLU:N	1:140:A:GLU:CA	1:140:A:GLU:C	14	45.86

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,500)	1:158:A:GLU:N	1:158:A:GLU:CA	1:158:A:GLU:CB	1:158:A:GLU:CG	6	45.85
(1,192)	1:8:A:GLY:N	1:8:A:GLY:CA	1:8:A:GLY:C	1:9:A:SER:N	8	45.85
(1,386)	1:104:A:TRP:C	1:105:A:ASP:N	1:105:A:ASP:CA	1:105:A:ASP:C	16	45.78
(1,295)	1:57:A:LEU:CA	1:57:A:LEU:CB	1:57:A:LEU:CG	1:57:A:LEU:CD1	17	45.75
(1,504)	1:159:A:ASN:N	1:159:A:ASN:CA	1:159:A:ASN:CB	1:159:A:ASN:CG	20	45.69
(1,388)	1:105:A:ASP:N	1:105:A:ASP:CA	1:105:A:ASP:C	1:106:A:PRO:N	6	45.62
(1,112)	1:132:A:LEU:N	1:132:A:LEU:CA	1:132:A:LEU:C	1:133:A:SER:N	14	45.61
(1,100)	1:121:A:VAL:N	1:121:A:VAL:CA	1:121:A:VAL:C	1:122:A:PRO:N	2	45.44
(1,320)	1:68:A:ASN:C	1:69:A:ARG:N	1:69:A:ARG:CA	1:69:A:ARG:C	12	45.42
(1,482)	1:145:A:TYR:N	1:145:A:TYR:CA	1:145:A:TYR:CB	1:145:A:TYR:CG	2	45.39
(1,230)	1:23:A:LEU:CA	1:23:A:LEU:CB	1:23:A:LEU:CG	1:23:A:LEU:CD2	16	45.35
(1,100)	1:121:A:VAL:N	1:121:A:VAL:CA	1:121:A:VAL:C	1:122:A:PRO:N	9	45.32
(1,414)	1:114:A:ASP:N	1:114:A:ASP:CA	1:114:A:ASP:CB	1:114:A:ASP:CG	1	45.3
(1,214)	1:18:A:PHE:N	1:18:A:PHE:CA	1:18:A:PHE:C	1:19:A:GLY:N	1	45.09
(1,295)	1:57:A:LEU:CA	1:57:A:LEU:CB	1:57:A:LEU:CG	1:57:A:LEU:CD1	5	45.04
(1,43)	1:62:A:LEU:C	1:63:A:ASP:N	1:63:A:ASP:CA	1:63:A:ASP:C	13	44.89
(1,452)	1:134:A:HIS:N	1:134:A:HIS:CA	1:134:A:HIS:CB	1:134:A:HIS:CG	12	44.84
(1,58)	1:51:A:ILE:N	1:74:A:ILE:CA	1:74:A:ILE:C	1:75:A:MET:N	4	44.83
(1,465)	1:138:A:ILE:N	1:138:A:ILE:CA	1:138:A:ILE:C	1:139:A:PRO:N	16	44.78
(1,22)	1:37:A:ALA:N	1:37:A:ALA:CA	1:37:A:ALA:C	1:38:A:LYS:N	17	44.7
(1,268)	1:39:A:LYS:N	1:39:A:LYS:CA	1:39:A:LYS:CB	1:39:A:LYS:CG	5	44.61
(1,265)	1:38:A:LYS:N	1:38:A:LYS:CA	1:38:A:LYS:CB	1:38:A:LYS:CG	14	44.55
(1,393)	1:107:A:ASP:N	1:107:A:ASP:CA	1:107:A:ASP:C	1:108:A:LYS:N	13	44.54
(1,49)	1:69:A:ARG:C	1:70:A:TRP:N	1:70:A:TRP:CA	1:70:A:TRP:C	6	44.52
(1,333)	1:75:A:MET:N	1:75:A:MET:CA	1:75:A:MET:CB	1:75:A:MET:CG	3	44.4
(1,308)	1:64:A:GLN:N	1:64:A:GLN:CA	1:64:A:GLN:C	1:65:A:GLN:N	3	44.37
(1,465)	1:138:A:ILE:N	1:138:A:ILE:CA	1:138:A:ILE:C	1:139:A:PRO:N	7	44.08
(1,393)	1:107:A:ASP:N	1:107:A:ASP:CA	1:107:A:ASP:C	1:108:A:LYS:N	14	44.08
(1,340)	1:80:A:HIS:CA	1:80:A:HIS:CB	1:80:A:HIS:CG	1:80:A:HIS:ND1	8	43.96
(1,388)	1:105:A:ASP:N	1:105:A:ASP:CA	1:105:A:ASP:C	1:106:A:PRO:N	7	43.8
(1,308)	1:64:A:GLN:N	1:64:A:GLN:CA	1:64:A:GLN:C	1:65:A:GLN:N	20	43.73
(1,465)	1:138:A:ILE:N	1:138:A:ILE:CA	1:138:A:ILE:C	1:139:A:PRO:N	12	43.66
(1,340)	1:80:A:HIS:CA	1:80:A:HIS:CB	1:80:A:HIS:CG	1:80:A:HIS:ND1	6	43.58
(1,58)	1:51:A:ILE:N	1:74:A:ILE:CA	1:74:A:ILE:C	1:75:A:MET:N	14	43.55
(1,214)	1:18:A:PHE:N	1:18:A:PHE:CA	1:18:A:PHE:C	1:19:A:GLY:N	10	43.47
(1,235)	1:24:A:ASN:N	1:24:A:ASN:CA	1:24:A:ASN:C	1:25:A:CYS:N	14	43.44
(1,308)	1:64:A:GLN:N	1:64:A:GLN:CA	1:64:A:GLN:C	1:65:A:GLN:N	1	43.22
(1,295)	1:57:A:LEU:CA	1:57:A:LEU:CB	1:57:A:LEU:CG	1:57:A:LEU:CD1	11	42.86
(1,214)	1:18:A:PHE:N	1:18:A:PHE:CA	1:18:A:PHE:C	1:19:A:GLY:N	20	42.79
(1,102)	1:123:A:HIS:N	1:123:A:HIS:CA	1:123:A:HIS:C	1:124:A:ASP:N	4	42.73
(1,398)	1:109:A:PRO:N	1:109:A:PRO:CA	1:109:A:PRO:C	1:110:A:LEU:N	15	42.7
(1,399)	1:109:A:PRO:C	1:110:A:LEU:N	1:110:A:LEU:CA	1:110:A:LEU:C	8	42.55
(1,187)	1:5:A:GLU:N	1:5:A:GLU:CA	1:5:A:GLU:CB	1:5:A:GLU:CG	11	42.35
(1,500)	1:158:A:GLU:N	1:158:A:GLU:CA	1:158:A:GLU:CB	1:158:A:GLU:CG	19	42.31
(1,296)	1:57:A:LEU:N	1:57:A:LEU:CA	1:57:A:LEU:C	1:58:A:PHE:N	9	42.16
(1,470)	1:140:A:GLU:N	1:140:A:GLU:CA	1:140:A:GLU:C	1:141:A:ASP:N	2	42.06
(1,58)	1:51:A:ILE:N	1:74:A:ILE:CA	1:74:A:ILE:C	1:75:A:MET:N	3	42.06
(1,482)	1:145:A:TYR:N	1:145:A:TYR:CA	1:145:A:TYR:CB	1:145:A:TYR:CG	11	41.88
(1,452)	1:134:A:HIS:N	1:134:A:HIS:CA	1:134:A:HIS:CB	1:134:A:HIS:CG	15	41.84
(1,32)	1:54:A:ALA:N	1:54:A:ALA:CA	1:54:A:ALA:C	1:55:A:GLY:N	17	41.62
(1,295)	1:57:A:LEU:CA	1:57:A:LEU:CB	1:57:A:LEU:CG	1:57:A:LEU:CD1	8	41.37

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,293)	1:56:A:GLY:C	1:57:A:LEU:N	1:57:A:LEU:CA	1:57:A:LEU:C	4	41.36
(1,116)	1:134:A:HIS:N	1:134:A:HIS:CA	2:173:A:CU1:CU	1:135:A:HIS:N	1	41.28
(1,465)	1:138:A:ILE:N	1:138:A:ILE:CA	1:138:A:ILE:C	1:139:A:PRO:N	20	41.18
(1,393)	1:107:A:ASP:N	1:107:A:ASP:CA	1:107:A:ASP:C	1:108:A:LYS:N	17	41.16
(1,295)	1:57:A:LEU:CA	1:57:A:LEU:CB	1:57:A:LEU:CG	1:57:A:LEU:CD1	9	41.06
(1,24)	1:47:A:ALA:N	1:47:A:ALA:CA	1:47:A:ALA:C	1:48:A:ASP:N	6	40.99
(1,377)	1:102:A:LYS:N	1:102:A:LYS:CA	1:102:A:LYS:CB	1:102:A:LYS:CG	5	40.77
(1,202)	1:14:A:CYS:N	1:14:A:CYS:CA	1:14:A:CYS:CB	1:14:A:CYS:SG	12	40.58
(1,181)	1:155:A:ALA:N	1:155:A:ALA:CA	1:155:A:ALA:C	1:156:A:ASP:N	15	40.49
(1,49)	1:69:A:ARG:C	1:70:A:TRP:N	1:70:A:TRP:CA	1:70:A:TRP:C	14	40.33
(1,295)	1:57:A:LEU:CA	1:57:A:LEU:CB	1:57:A:LEU:CG	1:57:A:LEU:CD1	10	40.27
(1,340)	1:80:A:HIS:CA	1:80:A:HIS:CB	1:80:A:HIS:CG	1:80:A:HIS:ND1	15	40.24
(1,415)	1:114:A:ASP:N	1:114:A:ASP:CA	1:114:A:ASP:C	1:115:A:PHE:N	4	40.02
(1,511)	1:163:A:GLN:N	1:163:A:GLN:CA	1:163:A:GLN:CB	1:163:A:GLN:CG	9	39.92
(1,333)	1:75:A:MET:N	1:75:A:MET:CA	1:75:A:MET:CB	1:75:A:MET:CG	15	39.89
(1,58)	1:51:A:ILE:N	1:74:A:ILE:CA	1:74:A:ILE:C	1:75:A:MET:N	12	39.78
(1,49)	1:69:A:ARG:C	1:70:A:TRP:N	1:70:A:TRP:CA	1:70:A:TRP:C	20	39.76
(1,465)	1:138:A:ILE:N	1:138:A:ILE:CA	1:138:A:ILE:C	1:139:A:PRO:N	6	39.75
(1,451)	1:133:A:SER:N	1:133:A:SER:CA	1:133:A:SER:CB	1:133:A:SER:OG	19	39.65
(1,268)	1:39:A:LYS:N	1:39:A:LYS:CA	1:39:A:LYS:CB	1:39:A:LYS:CG	13	39.65
(1,333)	1:75:A:MET:N	1:75:A:MET:CA	1:75:A:MET:CB	1:75:A:MET:CG	6	39.42
(1,465)	1:138:A:ILE:N	1:138:A:ILE:CA	1:138:A:ILE:C	1:139:A:PRO:N	17	39.4
(1,295)	1:57:A:LEU:CA	1:57:A:LEU:CB	1:57:A:LEU:CG	1:57:A:LEU:CD1	3	39.4
(1,268)	1:39:A:LYS:N	1:39:A:LYS:CA	1:39:A:LYS:CB	1:39:A:LYS:CG	1	39.39
(1,388)	1:105:A:ASP:N	1:105:A:ASP:CA	1:105:A:ASP:C	1:106:A:PRO:N	1	39.29
(1,281)	1:47:A:ALA:C	1:48:A:ASP:N	1:48:A:ASP:CA	1:48:A:ASP:C	3	39.28
(1,181)	1:155:A:ALA:N	1:155:A:ALA:CA	1:155:A:ALA:C	1:156:A:ASP:N	9	39.14
(1,233)	1:24:A:ASN:N	1:24:A:ASN:CA	1:24:A:ASN:CB	1:24:A:ASN:CG	7	39.13
(1,293)	1:56:A:GLY:C	1:57:A:LEU:N	1:57:A:LEU:CA	1:57:A:LEU:C	1	39.12
(1,393)	1:107:A:ASP:N	1:107:A:ASP:CA	1:107:A:ASP:C	1:108:A:LYS:N	9	39.01
(1,116)	1:134:A:HIS:N	1:134:A:HIS:CA	2:173:A:CU1:CU	1:135:A:HIS:N	2	38.97
(1,388)	1:105:A:ASP:N	1:105:A:ASP:CA	1:105:A:ASP:C	1:106:A:PRO:N	10	38.89
(1,308)	1:64:A:GLN:N	1:64:A:GLN:CA	1:64:A:GLN:C	1:65:A:GLN:N	17	38.65
(1,308)	1:64:A:GLN:N	1:64:A:GLN:CA	1:64:A:GLN:C	1:65:A:GLN:N	11	38.58
(1,465)	1:138:A:ILE:N	1:138:A:ILE:CA	1:138:A:ILE:C	1:139:A:PRO:N	5	38.56
(1,388)	1:105:A:ASP:N	1:105:A:ASP:CA	1:105:A:ASP:C	1:106:A:PRO:N	15	38.45
(1,333)	1:75:A:MET:N	1:75:A:MET:CA	1:75:A:MET:CB	1:75:A:MET:CG	9	38.43
(1,58)	1:51:A:ILE:N	1:74:A:ILE:CA	1:74:A:ILE:C	1:75:A:MET:N	11	38.31
(1,452)	1:134:A:HIS:N	1:134:A:HIS:CA	1:134:A:HIS:CB	1:134:A:HIS:CG	6	38.23
(1,312)	1:65:A:GLN:N	1:65:A:GLN:CA	1:65:A:GLN:C	1:66:A:SER:N	20	38.23
(1,296)	1:57:A:LEU:N	1:57:A:LEU:CA	1:57:A:LEU:C	1:58:A:PHE:N	14	38.06
(1,388)	1:105:A:ASP:N	1:105:A:ASP:CA	1:105:A:ASP:C	1:106:A:PRO:N	11	38.05
(1,58)	1:51:A:ILE:N	1:74:A:ILE:CA	1:74:A:ILE:C	1:75:A:MET:N	1	38.01
(1,58)	1:51:A:ILE:N	1:74:A:ILE:CA	1:74:A:ILE:C	1:75:A:MET:N	2	37.92
(1,102)	1:123:A:HIS:N	1:123:A:HIS:CA	1:123:A:HIS:C	1:124:A:ASP:N	19	37.82
(1,465)	1:138:A:ILE:N	1:138:A:ILE:CA	1:138:A:ILE:C	1:139:A:PRO:N	3	37.81
(1,216)	1:19:A:GLY:C	1:20:A:PHE:N	1:20:A:PHE:CA	1:20:A:PHE:C	19	37.81
(1,260)	1:35:A:LEU:C	1:36:A:GLU:N	1:36:A:GLU:CA	1:36:A:GLU:C	6	37.68
(1,316)	1:67:A:GLU:N	1:67:A:GLU:CA	1:67:A:GLU:CB	1:67:A:GLU:CG	5	37.56
(1,386)	1:104:A:TRP:C	1:105:A:ASP:N	1:105:A:ASP:CA	1:105:A:ASP:C	10	37.54
(1,482)	1:145:A:TYR:N	1:145:A:TYR:CA	1:145:A:TYR:CB	1:145:A:TYR:CG	13	37.28

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,308)	1:64:A:GLN:N	1:64:A:GLN:CA	1:64:A:GLN:C	1:65:A:GLN:N	14	37.24
(1,230)	1:23:A:LEU:CA	1:23:A:LEU:CB	1:23:A:LEU:CG	1:23:A:LEU:CD2	15	37.21
(1,415)	1:114:A:ASP:N	1:114:A:ASP:CA	1:114:A:ASP:C	1:115:A:PHE:N	2	37.2
(1,393)	1:107:A:ASP:N	1:107:A:ASP:CA	1:107:A:ASP:C	1:108:A:LYS:N	12	37.17
(1,177)	1:91:A:ASN:N	1:91:A:ASN:CA	1:91:A:ASN:C	1:92:A:THR:N	17	37.07
(1,333)	1:75:A:MET:N	1:75:A:MET:CA	1:75:A:MET:CB	1:75:A:MET:CG	11	37.06
(1,340)	1:80:A:HIS:CA	1:80:A:HIS:CB	1:80:A:HIS:CG	1:80:A:HIS:ND1	13	37.03
(1,100)	1:121:A:VAL:N	1:121:A:VAL:CA	1:121:A:VAL:C	1:122:A:PRO:N	6	37.01
(1,44)	1:63:A:ASP:N	1:63:A:ASP:CA	1:63:A:ASP:C	1:64:A:GLN:N	13	36.98
(1,116)	1:134:A:HIS:N	1:134:A:HIS:CA	2:173:A:CU1:CU	1:135:A:HIS:N	3	36.82
(1,49)	1:69:A:ARG:C	1:70:A:TRP:N	1:70:A:TRP:CA	1:70:A:TRP:C	13	36.8
(1,11)	1:26:A:GLY:C	1:27:A:SER:N	1:27:A:SER:CA	1:27:A:SER:C	19	36.78
(1,264)	1:37:A:ALA:C	1:38:A:LYS:N	1:38:A:LYS:CA	1:38:A:LYS:C	17	36.71
(1,295)	1:57:A:LEU:CA	1:57:A:LEU:CB	1:57:A:LEU:CG	1:57:A:LEU:CD1	20	36.69
(1,217)	1:20:A:PHE:N	1:20:A:PHE:CA	1:20:A:PHE:CB	1:20:A:PHE:CG	18	36.69
(1,465)	1:138:A:ILE:N	1:138:A:ILE:CA	1:138:A:ILE:C	1:139:A:PRO:N	1	36.67
(1,295)	1:57:A:LEU:CA	1:57:A:LEU:CB	1:57:A:LEU:CG	1:57:A:LEU:CD1	4	36.57
(1,415)	1:114:A:ASP:N	1:114:A:ASP:CA	1:114:A:ASP:C	1:115:A:PHE:N	8	36.55
(1,465)	1:138:A:ILE:N	1:138:A:ILE:CA	1:138:A:ILE:C	1:139:A:PRO:N	15	36.46
(1,449)	1:132:A:LEU:N	1:132:A:LEU:CA	1:132:A:LEU:CB	1:132:A:LEU:CG	12	36.36
(1,16)	1:29:A:MET:N	1:29:A:MET:CA	1:29:A:MET:C	1:30:A:TYR:N	1	36.24
(1,113)	1:132:A:LEU:C	1:133:A:SER:N	1:133:A:SER:CA	1:133:A:SER:C	18	36.2
(1,281)	1:47:A:ALA:C	1:48:A:ASP:N	1:48:A:ASP:CA	1:48:A:ASP:C	7	36.17
(1,507)	1:161:A:PHE:N	1:161:A:PHE:CA	1:161:A:PHE:CB	1:161:A:PHE:CG	16	36.14
(1,399)	1:109:A:PRO:C	1:110:A:LEU:N	1:110:A:LEU:CA	1:110:A:LEU:C	9	36.1
(1,452)	1:134:A:HIS:N	1:134:A:HIS:CA	1:134:A:HIS:CB	1:134:A:HIS:CG	19	35.96
(1,295)	1:57:A:LEU:CA	1:57:A:LEU:CB	1:57:A:LEU:CG	1:57:A:LEU:CD1	2	35.87
(1,24)	1:47:A:ALA:N	1:47:A:ALA:CA	1:47:A:ALA:C	1:48:A:ASP:N	8	35.71
(1,72)	1:82:A:PHE:N	1:82:A:PHE:CA	1:82:A:PHE:C	1:83:A:THR:N	10	35.62
(1,467)	1:139:A:PRO:C	1:140:A:GLU:N	1:140:A:GLU:CA	1:140:A:GLU:C	2	35.43
(1,100)	1:121:A:VAL:N	1:121:A:VAL:CA	1:121:A:VAL:C	1:122:A:PRO:N	20	35.43
(1,316)	1:67:A:GLU:N	1:67:A:GLU:CA	1:67:A:GLU:CB	1:67:A:GLU:CG	13	35.37
(1,296)	1:57:A:LEU:N	1:57:A:LEU:CA	1:57:A:LEU:C	1:58:A:PHE:N	2	35.33
(1,187)	1:5:A:GLU:N	1:5:A:GLU:CA	1:5:A:GLU:CB	1:5:A:GLU:CG	12	35.23
(1,453)	1:134:A:HIS:CA	1:134:A:HIS:CB	1:134:A:HIS:CG	1:134:A:HIS:ND1	15	35.21
(1,393)	1:107:A:ASP:N	1:107:A:ASP:CA	1:107:A:ASP:C	1:108:A:LYS:N	16	35.2
(1,49)	1:69:A:ARG:C	1:70:A:TRP:N	1:70:A:TRP:CA	1:70:A:TRP:C	3	35.16
(1,507)	1:161:A:PHE:N	1:161:A:PHE:CA	1:161:A:PHE:CB	1:161:A:PHE:CG	15	35.02
(1,500)	1:158:A:GLU:N	1:158:A:GLU:CA	1:158:A:GLU:CB	1:158:A:GLU:CG	17	35.02
(1,502)	1:158:A:GLU:N	1:158:A:GLU:CA	1:158:A:GLU:C	1:159:A:ASN:N	9	34.98
(1,274)	1:43:A:HIS:N	1:43:A:HIS:CA	1:43:A:HIS:C	1:44:A:SER:N	16	34.94
(1,281)	1:47:A:ALA:C	1:48:A:ASP:N	1:48:A:ASP:CA	1:48:A:ASP:C	9	34.83
(1,465)	1:138:A:ILE:N	1:138:A:ILE:CA	1:138:A:ILE:C	1:139:A:PRO:N	4	34.76
(1,465)	1:138:A:ILE:N	1:138:A:ILE:CA	1:138:A:ILE:C	1:139:A:PRO:N	10	34.67
(1,181)	1:155:A:ALA:N	1:155:A:ALA:CA	1:155:A:ALA:C	1:156:A:ASP:N	1	34.63
(1,308)	1:64:A:GLN:N	1:64:A:GLN:CA	1:64:A:GLN:C	1:65:A:GLN:N	6	34.59
(1,20)	1:35:A:LEU:N	1:35:A:LEU:CA	1:35:A:LEU:C	1:36:A:GLU:N	17	34.53
(1,100)	1:121:A:VAL:N	1:121:A:VAL:CA	1:121:A:VAL:C	1:122:A:PRO:N	18	34.43
(1,316)	1:67:A:GLU:N	1:67:A:GLU:CA	1:67:A:GLU:CB	1:67:A:GLU:CG	7	34.42
(1,452)	1:134:A:HIS:N	1:134:A:HIS:CA	1:134:A:HIS:CB	1:134:A:HIS:CG	18	34.39
(1,53)	1:71:A:PHE:C	1:72:A:LYS:N	1:72:A:LYS:CA	1:72:A:LYS:C	17	34.33

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,465)	1:138:A:ILE:N	1:138:A:ILE:CA	1:138:A:ILE:C	1:139:A:PRO:N	11	34.3
(1,295)	1:57:A:LEU:CA	1:57:A:LEU:CB	1:57:A:LEU:CG	1:57:A:LEU:CD1	16	34.26
(1,500)	1:158:A:GLU:N	1:158:A:GLU:CA	1:158:A:GLU:CB	1:158:A:GLU:CG	1	34.14
(1,240)	1:26:A:GLY:N	1:26:A:GLY:CA	1:26:A:GLY:C	1:27:A:SER:N	14	34.06
(1,281)	1:47:A:ALA:C	1:48:A:ASP:N	1:48:A:ASP:CA	1:48:A:ASP:C	12	33.89
(1,231)	1:23:A:LEU:N	1:23:A:LEU:CA	1:23:A:LEU:C	1:24:A:ASN:N	15	33.84
(1,49)	1:69:A:ARG:C	1:70:A:TRP:N	1:70:A:TRP:CA	1:70:A:TRP:C	12	33.84
(1,393)	1:107:A:ASP:N	1:107:A:ASP:CA	1:107:A:ASP:C	1:108:A:LYS:N	5	33.81
(1,295)	1:57:A:LEU:CA	1:57:A:LEU:CB	1:57:A:LEU:CG	1:57:A:LEU:CD1	12	33.71
(1,386)	1:104:A:TRP:C	1:105:A:ASP:N	1:105:A:ASP:CA	1:105:A:ASP:C	17	33.69
(1,54)	1:72:A:LYS:N	1:72:A:LYS:CA	1:72:A:LYS:C	1:73:A:HIS:N	13	33.66
(1,58)	1:51:A:ILE:N	1:74:A:ILE:CA	1:74:A:ILE:C	1:75:A:MET:N	17	33.54
(1,116)	1:134:A:HIS:N	1:134:A:HIS:CA	2:173:A:CU1:CU	1:135:A:HIS:N	20	33.53
(1,295)	1:57:A:LEU:CA	1:57:A:LEU:CB	1:57:A:LEU:CG	1:57:A:LEU:CD1	14	33.46
(1,465)	1:138:A:ILE:N	1:138:A:ILE:CA	1:138:A:ILE:C	1:139:A:PRO:N	13	33.4
(1,377)	1:102:A:LYS:N	1:102:A:LYS:CA	1:102:A:LYS:CB	1:102:A:LYS:CG	11	33.39
(1,214)	1:18:A:PHE:N	1:18:A:PHE:CA	1:18:A:PHE:C	1:19:A:GLY:N	15	33.34
(1,295)	1:57:A:LEU:CA	1:57:A:LEU:CB	1:57:A:LEU:CG	1:57:A:LEU:CD1	1	33.17
(1,231)	1:23:A:LEU:N	1:23:A:LEU:CA	1:23:A:LEU:C	1:24:A:ASN:N	10	33.04
(1,181)	1:155:A:ALA:N	1:155:A:ALA:CA	1:155:A:ALA:C	1:156:A:ASP:N	3	32.94
(1,214)	1:18:A:PHE:N	1:18:A:PHE:CA	1:18:A:PHE:C	1:19:A:GLY:N	13	32.65
(1,47)	1:67:A:GLU:C	1:68:A:ASN:N	1:68:A:ASN:CA	1:68:A:ASN:C	12	32.47
(1,500)	1:158:A:GLU:N	1:158:A:GLU:CA	1:158:A:GLU:CB	1:158:A:GLU:CG	7	32.37
(1,47)	1:67:A:GLU:C	1:68:A:ASN:N	1:68:A:ASN:CA	1:68:A:ASN:C	5	32.35
(1,293)	1:56:A:GLY:C	1:57:A:LEU:N	1:57:A:LEU:CA	1:57:A:LEU:C	14	32.29
(1,388)	1:105:A:ASP:N	1:105:A:ASP:CA	1:105:A:ASP:C	1:106:A:PRO:N	4	32.12
(1,58)	1:51:A:ILE:N	1:74:A:ILE:CA	1:74:A:ILE:C	1:75:A:MET:N	16	32.11
(1,388)	1:105:A:ASP:N	1:105:A:ASP:CA	1:105:A:ASP:C	1:106:A:PRO:N	17	32.1
(1,27)	1:51:A:ILE:C	1:52:A:ALA:N	1:52:A:ALA:CA	1:52:A:ALA:C	2	32.09
(1,386)	1:104:A:TRP:C	1:105:A:ASP:N	1:105:A:ASP:CA	1:105:A:ASP:C	11	32.03
(1,281)	1:47:A:ALA:C	1:48:A:ASP:N	1:48:A:ASP:CA	1:48:A:ASP:C	8	32.03
(1,386)	1:104:A:TRP:C	1:105:A:ASP:N	1:105:A:ASP:CA	1:105:A:ASP:C	7	31.68
(1,312)	1:65:A:GLN:N	1:65:A:GLN:CA	1:65:A:GLN:C	1:66:A:SER:N	1	31.55
(1,238)	1:25:A:CYS:N	1:25:A:CYS:CA	1:25:A:CYS:C	1:26:A:GLY:N	10	31.53
(1,295)	1:57:A:LEU:CA	1:57:A:LEU:CB	1:57:A:LEU:CG	1:57:A:LEU:CD1	6	31.47
(1,49)	1:69:A:ARG:C	1:70:A:TRP:N	1:70:A:TRP:CA	1:70:A:TRP:C	17	31.4
(1,465)	1:138:A:ILE:N	1:138:A:ILE:CA	1:138:A:ILE:C	1:139:A:PRO:N	9	31.27
(1,113)	1:132:A:LEU:C	1:133:A:SER:N	1:133:A:SER:CA	1:133:A:SER:C	8	31.1
(1,58)	1:51:A:ILE:N	1:74:A:ILE:CA	1:74:A:ILE:C	1:75:A:MET:N	20	30.9
(1,214)	1:18:A:PHE:N	1:18:A:PHE:CA	1:18:A:PHE:C	1:19:A:GLY:N	3	30.81
(1,230)	1:23:A:LEU:CA	1:23:A:LEU:CB	1:23:A:LEU:CG	1:23:A:LEU:CD2	11	30.73
(1,268)	1:39:A:LYS:N	1:39:A:LYS:CA	1:39:A:LYS:CB	1:39:A:LYS:CG	15	30.56
(1,308)	1:64:A:GLN:N	1:64:A:GLN:CA	1:64:A:GLN:C	1:65:A:GLN:N	10	30.48
(1,500)	1:158:A:GLU:N	1:158:A:GLU:CA	1:158:A:GLU:CB	1:158:A:GLU:CG	11	30.35
(1,181)	1:155:A:ALA:N	1:155:A:ALA:CA	1:155:A:ALA:C	1:156:A:ASP:N	20	30.25
(1,263)	1:36:A:GLU:N	1:36:A:GLU:CA	1:36:A:GLU:C	1:37:A:ALA:N	7	30.22
(1,449)	1:132:A:LEU:N	1:132:A:LEU:CA	1:132:A:LEU:CB	1:132:A:LEU:CG	5	30.21
(1,386)	1:104:A:TRP:C	1:105:A:ASP:N	1:105:A:ASP:CA	1:105:A:ASP:C	8	30.18
(1,316)	1:67:A:GLU:N	1:67:A:GLU:CA	1:67:A:GLU:CB	1:67:A:GLU:CG	9	30.16
(1,181)	1:155:A:ALA:N	1:155:A:ALA:CA	1:155:A:ALA:C	1:156:A:ASP:N	16	29.86
(1,316)	1:67:A:GLU:N	1:67:A:GLU:CA	1:67:A:GLU:CB	1:67:A:GLU:CG	3	29.69

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,58)	1:51:A:ILE:N	1:74:A:ILE:CA	1:74:A:ILE:C	1:75:A:MET:N	15	29.44
(1,16)	1:29:A:MET:N	1:29:A:MET:CA	1:29:A:MET:C	1:30:A:TYR:N	12	29.39
(1,181)	1:155:A:ALA:N	1:155:A:ALA:CA	1:155:A:ALA:C	1:156:A:ASP:N	14	29.36
(1,263)	1:36:A:GLU:N	1:36:A:GLU:CA	1:36:A:GLU:C	1:37:A:ALA:N	9	29.3
(1,507)	1:161:A:PHE:N	1:161:A:PHE:CA	1:161:A:PHE:CB	1:161:A:PHE:CG	8	29.21
(1,231)	1:23:A:LEU:N	1:23:A:LEU:CA	1:23:A:LEU:C	1:24:A:ASN:N	19	29.14
(1,181)	1:155:A:ALA:N	1:155:A:ALA:CA	1:155:A:ALA:C	1:156:A:ASP:N	12	29.13
(1,333)	1:75:A:MET:N	1:75:A:MET:CA	1:75:A:MET:CB	1:75:A:MET:CG	12	29.08
(1,172)	1:39:A:LYS:N	1:39:A:LYS:CA	1:39:A:LYS:C	1:40:A:GLY:N	16	29.06
(1,303)	1:63:A:ASP:N	1:63:A:ASP:CA	1:63:A:ASP:CB	1:63:A:ASP:CG	16	28.92
(1,271)	1:42:A:PRO:N	1:42:A:PRO:CA	1:42:A:PRO:C	1:43:A:HIS:N	13	28.89
(1,231)	1:23:A:LEU:N	1:23:A:LEU:CA	1:23:A:LEU:C	1:24:A:ASN:N	16	28.87
(1,295)	1:57:A:LEU:CA	1:57:A:LEU:CB	1:57:A:LEU:CG	1:57:A:LEU:CD1	13	28.85
(1,230)	1:23:A:LEU:CA	1:23:A:LEU:CB	1:23:A:LEU:CG	1:23:A:LEU:CD2	18	28.78
(1,101)	1:122:A:PRO:C	1:123:A:HIS:N	1:123:A:HIS:CA	1:123:A:HIS:C	14	28.78
(1,126)	1:146:A:HIS:N	1:146:A:HIS:CA	2:173:A:CU1:CU	1:147:A:VAL:N	17	28.71
(1,17)	1:32:A:PRO:C	1:33:A:GLN:N	1:33:A:GLN:CA	1:33:A:GLN:C	5	28.5
(1,399)	1:109:A:PRO:C	1:110:A:LEU:N	1:110:A:LEU:CA	1:110:A:LEU:C	1	28.29
(1,29)	1:52:A:ALA:C	1:53:A:SER:N	1:53:A:SER:CA	1:53:A:SER:C	19	28.15
(1,47)	1:67:A:GLU:C	1:68:A:ASN:N	1:68:A:ASN:CA	1:68:A:ASN:C	13	27.99
(1,415)	1:114:A:ASP:N	1:114:A:ASP:CA	1:114:A:ASP:C	1:115:A:PHE:N	10	27.98
(1,264)	1:37:A:ALA:C	1:38:A:LYS:N	1:38:A:LYS:CA	1:38:A:LYS:C	19	27.87
(1,231)	1:23:A:LEU:N	1:23:A:LEU:CA	1:23:A:LEU:C	1:24:A:ASN:N	13	27.66
(1,507)	1:161:A:PHE:N	1:161:A:PHE:CA	1:161:A:PHE:CB	1:161:A:PHE:CG	18	27.49
(1,340)	1:80:A:HIS:CA	1:80:A:HIS:CB	1:80:A:HIS:CG	1:80:A:HIS:ND1	17	27.43
(1,231)	1:23:A:LEU:N	1:23:A:LEU:CA	1:23:A:LEU:C	1:24:A:ASN:N	20	27.36
(1,281)	1:47:A:ALA:C	1:48:A:ASP:N	1:48:A:ASP:CA	1:48:A:ASP:C	4	27.32
(1,113)	1:132:A:LEU:C	1:133:A:SER:N	1:133:A:SER:CA	1:133:A:SER:C	6	27.32
(1,231)	1:23:A:LEU:N	1:23:A:LEU:CA	1:23:A:LEU:C	1:24:A:ASN:N	9	27.31
(1,181)	1:155:A:ALA:N	1:155:A:ALA:CA	1:155:A:ALA:C	1:156:A:ASP:N	7	27.31
(1,214)	1:18:A:PHE:N	1:18:A:PHE:CA	1:18:A:PHE:C	1:19:A:GLY:N	9	27.29
(1,500)	1:158:A:GLU:N	1:158:A:GLU:CA	1:158:A:GLU:CB	1:158:A:GLU:CG	10	27.23
(1,111)	1:131:A:ASN:C	1:132:A:LEU:N	1:132:A:LEU:CA	1:132:A:LEU:C	1	27.21
(1,471)	1:140:A:GLU:C	1:141:A:ASP:N	1:141:A:ASP:CA	1:141:A:ASP:C	1	27.19
(1,386)	1:104:A:TRP:C	1:105:A:ASP:N	1:105:A:ASP:CA	1:105:A:ASP:C	9	26.98
(1,61)	1:75:A:MET:C	1:76:A:THR:N	1:76:A:THR:CA	1:76:A:THR:C	16	26.98
(1,452)	1:134:A:HIS:N	1:134:A:HIS:CA	1:134:A:HIS:CB	1:134:A:HIS:CG	20	26.92
(1,214)	1:18:A:PHE:N	1:18:A:PHE:CA	1:18:A:PHE:C	1:19:A:GLY:N	8	26.87
(1,388)	1:105:A:ASP:N	1:105:A:ASP:CA	1:105:A:ASP:C	1:106:A:PRO:N	9	26.75
(1,172)	1:39:A:LYS:N	1:39:A:LYS:CA	1:39:A:LYS:C	1:40:A:GLY:N	10	26.75
(1,100)	1:121:A:VAL:N	1:121:A:VAL:CA	1:121:A:VAL:C	1:122:A:PRO:N	5	26.68
(1,406)	1:111:A:LYS:N	1:111:A:LYS:CA	1:111:A:LYS:C	1:112:A:ARG:N	16	26.54
(1,54)	1:72:A:LYS:N	1:72:A:LYS:CA	1:72:A:LYS:C	1:73:A:HIS:N	1	26.52
(1,449)	1:132:A:LEU:N	1:132:A:LEU:CA	1:132:A:LEU:CB	1:132:A:LEU:CG	9	26.51
(1,181)	1:155:A:ALA:N	1:155:A:ALA:CA	1:155:A:ALA:C	1:156:A:ASP:N	2	26.34
(1,181)	1:155:A:ALA:N	1:155:A:ALA:CA	1:155:A:ALA:C	1:156:A:ASP:N	19	26.3
(1,100)	1:121:A:VAL:N	1:121:A:VAL:CA	1:121:A:VAL:C	1:122:A:PRO:N	7	26.24
(1,260)	1:35:A:LEU:C	1:36:A:GLU:N	1:36:A:GLU:CA	1:36:A:GLU:C	9	26.2
(1,230)	1:23:A:LEU:CA	1:23:A:LEU:CB	1:23:A:LEU:CG	1:23:A:LEU:CD2	8	26.12
(1,502)	1:158:A:GLU:N	1:158:A:GLU:CA	1:158:A:GLU:C	1:159:A:ASN:N	5	26.1
(1,316)	1:67:A:GLU:N	1:67:A:GLU:CA	1:67:A:GLU:CB	1:67:A:GLU:CG	18	26.07

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,42)	1:62:A:LEU:N	1:62:A:LEU:CA	1:62:A:LEU:C	1:63:A:ASP:N	19	26.02
(1,328)	1:72:A:LYS:N	1:72:A:LYS:CA	1:72:A:LYS:CB	1:72:A:LYS:CG	19	26.01
(1,192)	1:8:A:GLY:N	1:8:A:GLY:CA	1:8:A:GLY:C	1:9:A:SER:N	13	26.01
(1,449)	1:132:A:LEU:N	1:132:A:LEU:CA	1:132:A:LEU:CB	1:132:A:LEU:CG	18	25.99
(1,393)	1:107:A:ASP:N	1:107:A:ASP:CA	1:107:A:ASP:C	1:108:A:LYS:N	20	25.95
(1,504)	1:159:A:ASN:N	1:159:A:ASN:CA	1:159:A:ASN:CB	1:159:A:ASN:CG	17	25.94
(1,388)	1:105:A:ASP:N	1:105:A:ASP:CA	1:105:A:ASP:C	1:106:A:PRO:N	12	25.92
(1,274)	1:43:A:HIS:N	1:43:A:HIS:CA	1:43:A:HIS:C	1:44:A:SER:N	8	25.81
(1,386)	1:104:A:TRP:C	1:105:A:ASP:N	1:105:A:ASP:CA	1:105:A:ASP:C	5	25.77
(1,53)	1:71:A:PHE:C	1:72:A:LYS:N	1:72:A:LYS:CA	1:72:A:LYS:C	12	25.69
(1,82)	1:88:A:ALA:N	1:88:A:ALA:CA	1:88:A:ALA:C	1:89:A:PRO:N	9	25.61
(1,474)	1:141:A:ASP:N	1:141:A:ASP:CA	1:141:A:ASP:C	1:142:A:ARG:N	14	25.55
(1,47)	1:67:A:GLU:C	1:68:A:ASN:N	1:68:A:ASN:CA	1:68:A:ASN:C	1	25.55
(1,465)	1:138:A:ILE:N	1:138:A:ILE:CA	1:138:A:ILE:C	1:139:A:PRO:N	18	25.54
(1,181)	1:155:A:ALA:N	1:155:A:ALA:CA	1:155:A:ALA:C	1:156:A:ASP:N	5	25.44
(1,465)	1:138:A:ILE:N	1:138:A:ILE:CA	1:138:A:ILE:C	1:139:A:PRO:N	8	25.38
(1,58)	1:51:A:ILE:N	1:74:A:ILE:CA	1:74:A:ILE:C	1:75:A:MET:N	19	25.36
(1,449)	1:132:A:LEU:N	1:132:A:LEU:CA	1:132:A:LEU:CB	1:132:A:LEU:CG	6	25.35
(1,281)	1:47:A:ALA:C	1:48:A:ASP:N	1:48:A:ASP:CA	1:48:A:ASP:C	5	25.34
(1,231)	1:23:A:LEU:N	1:23:A:LEU:CA	1:23:A:LEU:C	1:24:A:ASN:N	18	25.32
(1,100)	1:121:A:VAL:N	1:121:A:VAL:CA	1:121:A:VAL:C	1:122:A:PRO:N	15	25.28
(1,113)	1:132:A:LEU:C	1:133:A:SER:N	1:133:A:SER:CA	1:133:A:SER:C	11	25.27
(1,507)	1:161:A:PHE:N	1:161:A:PHE:CA	1:161:A:PHE:CB	1:161:A:PHE:CG	17	25.2
(1,260)	1:35:A:LEU:C	1:36:A:GLU:N	1:36:A:GLU:CA	1:36:A:GLU:C	13	25.01
(1,449)	1:132:A:LEU:N	1:132:A:LEU:CA	1:132:A:LEU:CB	1:132:A:LEU:CG	13	24.99
(1,452)	1:134:A:HIS:N	1:134:A:HIS:CA	1:134:A:HIS:CB	1:134:A:HIS:CG	8	24.97
(1,303)	1:63:A:ASP:N	1:63:A:ASP:CA	1:63:A:ASP:CB	1:63:A:ASP:CG	8	24.91
(1,440)	1:124:A:ASP:N	1:124:A:ASP:CA	1:124:A:ASP:C	1:125:A:GLY:N	2	24.9
(1,212)	1:18:A:PHE:N	1:18:A:PHE:CA	1:18:A:PHE:CB	1:18:A:PHE:CG	2	24.9
(1,212)	1:18:A:PHE:N	1:18:A:PHE:CA	1:18:A:PHE:CB	1:18:A:PHE:CG	7	24.87
(1,58)	1:51:A:ILE:N	1:74:A:ILE:CA	1:74:A:ILE:C	1:75:A:MET:N	9	24.77
(1,231)	1:23:A:LEU:N	1:23:A:LEU:CA	1:23:A:LEU:C	1:24:A:ASN:N	2	24.74
(1,101)	1:122:A:PRO:C	1:123:A:HIS:N	1:123:A:HIS:CA	1:123:A:HIS:C	15	24.74
(1,102)	1:123:A:HIS:N	1:123:A:HIS:CA	1:123:A:HIS:C	1:124:A:ASP:N	17	24.56
(1,449)	1:132:A:LEU:N	1:132:A:LEU:CA	1:132:A:LEU:CB	1:132:A:LEU:CG	19	24.55
(1,116)	1:134:A:HIS:N	1:134:A:HIS:CA	2:173:A:CU1:CU	1:135:A:HIS:N	19	24.51
(1,67)	1:79:A:GLU:C	1:80:A:HIS:N	1:80:A:HIS:CA	2:173:A:CU1:CU	11	24.42
(1,58)	1:51:A:ILE:N	1:74:A:ILE:CA	1:74:A:ILE:C	1:75:A:MET:N	13	24.38
(1,386)	1:104:A:TRP:C	1:105:A:ASP:N	1:105:A:ASP:CA	1:105:A:ASP:C	4	24.29
(1,415)	1:114:A:ASP:N	1:114:A:ASP:CA	1:114:A:ASP:C	1:115:A:PHE:N	12	24.2
(1,217)	1:20:A:PHE:N	1:20:A:PHE:CA	1:20:A:PHE:CB	1:20:A:PHE:CG	20	24.12
(1,449)	1:132:A:LEU:N	1:132:A:LEU:CA	1:132:A:LEU:CB	1:132:A:LEU:CG	11	24.1
(1,283)	1:48:A:ASP:N	1:48:A:ASP:CA	1:48:A:ASP:C	1:49:A:GLY:N	19	24.09
(1,58)	1:51:A:ILE:N	1:74:A:ILE:CA	1:74:A:ILE:C	1:75:A:MET:N	8	24.07
(1,214)	1:18:A:PHE:N	1:18:A:PHE:CA	1:18:A:PHE:C	1:19:A:GLY:N	2	23.97
(1,214)	1:18:A:PHE:N	1:18:A:PHE:CA	1:18:A:PHE:C	1:19:A:GLY:N	18	23.91
(1,101)	1:122:A:PRO:C	1:123:A:HIS:N	1:123:A:HIS:CA	1:123:A:HIS:C	3	23.91
(1,283)	1:48:A:ASP:N	1:48:A:ASP:CA	1:48:A:ASP:C	1:49:A:GLY:N	20	23.89
(1,181)	1:155:A:ALA:N	1:155:A:ALA:CA	1:155:A:ALA:C	1:156:A:ASP:N	13	23.89
(1,500)	1:158:A:GLU:N	1:158:A:GLU:CA	1:158:A:GLU:CB	1:158:A:GLU:CG	2	23.81
(1,121)	1:142:A:ARG:C	1:143:A:LEU:N	1:143:A:LEU:CA	1:143:A:LEU:C	16	23.78

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,465)	1:138:A:ILE:N	1:138:A:ILE:CA	1:138:A:ILE:C	1:139:A:PRO:N	14	23.74
(1,399)	1:109:A:PRO:C	1:110:A:LEU:N	1:110:A:LEU:CA	1:110:A:LEU:C	10	23.66
(1,502)	1:158:A:GLU:N	1:158:A:GLU:CA	1:158:A:GLU:C	1:159:A:ASN:N	1	23.64
(1,260)	1:35:A:LEU:C	1:36:A:GLU:N	1:36:A:GLU:CA	1:36:A:GLU:C	8	23.6
(1,57)	1:73:A:HIS:C	1:74:A:ILE:N	1:74:A:ILE:CA	1:74:A:ILE:C	19	23.58
(1,449)	1:132:A:LEU:N	1:132:A:LEU:CA	1:132:A:LEU:CB	1:132:A:LEU:CG	3	23.51
(1,192)	1:8:A:GLY:N	1:8:A:GLY:CA	1:8:A:GLY:C	1:9:A:SER:N	18	23.47
(1,61)	1:75:A:MET:C	1:76:A:THR:N	1:76:A:THR:CA	1:76:A:THR:C	17	23.47
(1,181)	1:155:A:ALA:N	1:155:A:ALA:CA	1:155:A:ALA:C	1:156:A:ASP:N	6	23.45
(1,89)	1:95:A:TRP:C	1:96:A:HIS:N	1:96:A:HIS:CA	1:96:A:HIS:C	1	23.4
(1,67)	1:79:A:GLU:C	1:80:A:HIS:N	1:80:A:HIS:CA	2:173:A:CU1:CU	8	23.4
(1,207)	1:16:A:GLU:N	1:16:A:GLU:CA	1:16:A:GLU:CB	1:16:A:GLU:CG	16	23.37
(1,390)	1:106:A:PRO:C	1:107:A:ASP:N	1:107:A:ASP:CA	1:107:A:ASP:C	16	23.34
(1,101)	1:122:A:PRO:C	1:123:A:HIS:N	1:123:A:HIS:CA	1:123:A:HIS:C	12	23.2
(1,231)	1:23:A:LEU:N	1:23:A:LEU:CA	1:23:A:LEU:C	1:24:A:ASN:N	5	23.15
(1,123)	1:144:A:GLY:C	1:145:A:TYR:N	1:145:A:TYR:CA	1:145:A:TYR:C	1	23.12
(1,29)	1:52:A:ALA:C	1:53:A:SER:N	1:53:A:SER:CA	1:53:A:SER:C	10	23.12
(1,47)	1:67:A:GLU:C	1:68:A:ASN:N	1:68:A:ASN:CA	1:68:A:ASN:C	4	23.11
(1,333)	1:75:A:MET:N	1:75:A:MET:CA	1:75:A:MET:CB	1:75:A:MET:CG	17	23.1
(1,24)	1:47:A:ALA:N	1:47:A:ALA:CA	1:47:A:ALA:C	1:48:A:ASP:N	11	23.1
(1,295)	1:57:A:LEU:CA	1:57:A:LEU:CB	1:57:A:LEU:CG	1:57:A:LEU:CD1	15	23.06
(1,47)	1:67:A:GLU:C	1:68:A:ASN:N	1:68:A:ASN:CA	1:68:A:ASN:C	11	22.96
(1,386)	1:104:A:TRP:C	1:105:A:ASP:N	1:105:A:ASP:CA	1:105:A:ASP:C	14	22.93
(1,53)	1:71:A:PHE:C	1:72:A:LYS:N	1:72:A:LYS:CA	1:72:A:LYS:C	2	22.78
(1,390)	1:106:A:PRO:C	1:107:A:ASP:N	1:107:A:ASP:CA	1:107:A:ASP:C	9	22.77
(1,121)	1:142:A:ARG:C	1:143:A:LEU:N	1:143:A:LEU:CA	1:143:A:LEU:C	4	22.75
(1,67)	1:79:A:GLU:C	1:80:A:HIS:N	1:80:A:HIS:CA	2:173:A:CU1:CU	14	22.68
(1,219)	1:20:A:PHE:N	1:20:A:PHE:CA	1:20:A:PHE:C	1:21:A:LEU:N	11	22.66
(1,235)	1:24:A:ASN:N	1:24:A:ASN:CA	1:24:A:ASN:C	1:25:A:CYS:N	18	22.62
(1,202)	1:14:A:CYS:N	1:14:A:CYS:CA	1:14:A:CYS:CB	1:14:A:CYS:SG	18	22.5
(1,388)	1:105:A:ASP:N	1:105:A:ASP:CA	1:105:A:ASP:C	1:106:A:PRO:N	2	22.49
(1,180)	1:154:A:VAL:C	1:155:A:ALA:N	1:155:A:ALA:CA	1:155:A:ALA:C	17	22.29
(1,100)	1:121:A:VAL:N	1:121:A:VAL:CA	1:121:A:VAL:C	1:122:A:PRO:N	8	22.21
(1,214)	1:18:A:PHE:N	1:18:A:PHE:CA	1:18:A:PHE:C	1:19:A:GLY:N	5	22.16
(1,100)	1:121:A:VAL:N	1:121:A:VAL:CA	1:121:A:VAL:C	1:122:A:PRO:N	16	22.12
(1,121)	1:142:A:ARG:C	1:143:A:LEU:N	1:143:A:LEU:CA	1:143:A:LEU:C	5	22.05
(1,181)	1:155:A:ALA:N	1:155:A:ALA:CA	1:155:A:ALA:C	1:156:A:ASP:N	11	21.97
(1,281)	1:47:A:ALA:C	1:48:A:ASP:N	1:48:A:ASP:CA	1:48:A:ASP:C	15	21.93
(1,16)	1:29:A:MET:N	1:29:A:MET:CA	1:29:A:MET:C	1:30:A:TYR:N	3	21.83
(1,264)	1:37:A:ALA:C	1:38:A:LYS:N	1:38:A:LYS:CA	1:38:A:LYS:C	16	21.76
(1,238)	1:25:A:CYS:N	1:25:A:CYS:CA	1:25:A:CYS:C	1:26:A:GLY:N	7	21.72
(1,113)	1:132:A:LEU:C	1:133:A:SER:N	1:133:A:SER:CA	1:133:A:SER:C	5	21.64
(1,10)	1:16:A:GLU:N	1:16:A:GLU:CA	1:16:A:GLU:C	1:17:A:ALA:N	2	21.47
(1,181)	1:155:A:ALA:N	1:155:A:ALA:CA	1:155:A:ALA:C	1:156:A:ASP:N	10	21.45
(1,333)	1:75:A:MET:N	1:75:A:MET:CA	1:75:A:MET:CB	1:75:A:MET:CG	7	21.36
(1,453)	1:134:A:HIS:CA	1:134:A:HIS:CB	1:134:A:HIS:CG	1:134:A:HIS:ND1	1	21.31
(1,500)	1:158:A:GLU:N	1:158:A:GLU:CA	1:158:A:GLU:CB	1:158:A:GLU:CG	4	21.28
(1,23)	1:46:A:PRO:C	1:47:A:ALA:N	1:47:A:ALA:CA	1:47:A:ALA:C	12	21.26
(1,260)	1:35:A:LEU:C	1:36:A:GLU:N	1:36:A:GLU:CA	1:36:A:GLU:C	4	21.2
(1,237)	1:25:A:CYS:N	1:25:A:CYS:CA	1:25:A:CYS:CB	1:25:A:CYS:SG	4	21.15
(1,19)	1:34:A:SER:C	1:35:A:LEU:N	1:35:A:LEU:CA	1:35:A:LEU:C	7	21.14

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,235)	1:24:A:ASN:N	1:24:A:ASN:CA	1:24:A:ASN:C	1:25:A:CYS:N	4	21.07
(1,231)	1:23:A:LEU:N	1:23:A:LEU:CA	1:23:A:LEU:C	1:24:A:ASN:N	11	20.98
(1,123)	1:144:A:GLY:C	1:145:A:TYR:N	1:145:A:TYR:CA	1:145:A:TYR:C	6	20.96
(1,471)	1:140:A:GLU:C	1:141:A:ASP:N	1:141:A:ASP:CA	1:141:A:ASP:C	10	20.95
(1,223)	1:21:A:LEU:N	1:21:A:LEU:CA	1:21:A:LEU:C	1:22:A:ASN:N	14	20.91
(1,231)	1:23:A:LEU:N	1:23:A:LEU:CA	1:23:A:LEU:C	1:24:A:ASN:N	6	20.86
(1,172)	1:39:A:LYS:N	1:39:A:LYS:CA	1:39:A:LYS:C	1:40:A:GLY:N	14	20.85
(1,100)	1:121:A:VAL:N	1:121:A:VAL:CA	1:121:A:VAL:C	1:122:A:PRO:N	14	20.79
(1,260)	1:35:A:LEU:C	1:36:A:GLU:N	1:36:A:GLU:CA	1:36:A:GLU:C	5	20.76
(1,264)	1:37:A:ALA:C	1:38:A:LYS:N	1:38:A:LYS:CA	1:38:A:LYS:C	1	20.69
(1,312)	1:65:A:GLN:N	1:65:A:GLN:CA	1:65:A:GLN:C	1:66:A:SER:N	8	20.65
(1,76)	1:84:A:TRP:N	1:84:A:TRP:CA	1:84:A:TRP:C	1:85:A:THR:N	11	20.58
(1,471)	1:140:A:GLU:C	1:141:A:ASP:N	1:141:A:ASP:CA	1:141:A:ASP:C	14	20.56
(1,24)	1:47:A:ALA:N	1:47:A:ALA:CA	1:47:A:ALA:C	1:48:A:ASP:N	13	20.56
(1,438)	1:124:A:ASP:N	1:124:A:ASP:CA	1:124:A:ASP:CB	1:124:A:ASP:CG	13	20.54
(1,47)	1:67:A:GLU:C	1:68:A:ASN:N	1:68:A:ASN:CA	1:68:A:ASN:C	18	20.54
(1,49)	1:69:A:ARG:C	1:70:A:TRP:N	1:70:A:TRP:CA	1:70:A:TRP:C	1	20.48
(1,101)	1:122:A:PRO:C	1:123:A:HIS:N	1:123:A:HIS:CA	1:123:A:HIS:C	1	20.45
(1,172)	1:39:A:LYS:N	1:39:A:LYS:CA	1:39:A:LYS:C	1:40:A:GLY:N	15	20.37
(1,212)	1:18:A:PHE:N	1:18:A:PHE:CA	1:18:A:PHE:CB	1:18:A:PHE:CG	9	20.34
(1,110)	1:131:A:ASN:N	1:131:A:ASN:CA	1:131:A:ASN:C	1:132:A:LEU:N	12	20.34
(1,202)	1:14:A:CYS:N	1:14:A:CYS:CA	1:14:A:CYS:CB	1:14:A:CYS:SG	11	20.31
(1,147)	1:160:A:ALA:C	1:161:A:PHE:N	1:161:A:PHE:CA	1:161:A:PHE:C	20	20.3
(1,388)	1:105:A:ASP:N	1:105:A:ASP:CA	1:105:A:ASP:C	1:106:A:PRO:N	13	20.29
(1,507)	1:161:A:PHE:N	1:161:A:PHE:CA	1:161:A:PHE:CB	1:161:A:PHE:CG	19	20.27
(1,180)	1:154:A:VAL:C	1:155:A:ALA:N	1:155:A:ALA:CA	1:155:A:ALA:C	2	20.27
(1,61)	1:75:A:MET:C	1:76:A:THR:N	1:76:A:THR:CA	1:76:A:THR:C	18	20.21
(1,101)	1:122:A:PRO:C	1:123:A:HIS:N	1:123:A:HIS:CA	1:123:A:HIS:C	9	20.13
(1,100)	1:121:A:VAL:N	1:121:A:VAL:CA	1:121:A:VAL:C	1:122:A:PRO:N	19	20.11
(1,54)	1:72:A:LYS:N	1:72:A:LYS:CA	1:72:A:LYS:C	1:73:A:HIS:N	20	20.08
(1,89)	1:95:A:TRP:C	1:96:A:HIS:N	1:96:A:HIS:CA	1:96:A:HIS:C	16	20.01
(1,123)	1:144:A:GLY:C	1:145:A:TYR:N	1:145:A:TYR:CA	1:145:A:TYR:C	5	19.84
(1,48)	1:68:A:ASN:N	1:68:A:ASN:CA	1:68:A:ASN:C	1:69:A:ARG:N	17	19.77
(1,264)	1:37:A:ALA:C	1:38:A:LYS:N	1:38:A:LYS:CA	1:38:A:LYS:C	20	19.76
(1,82)	1:88:A:ALA:N	1:88:A:ALA:CA	1:88:A:ALA:C	1:89:A:PRO:N	1	19.71
(1,362)	1:96:A:HIS:CA	1:96:A:HIS:CB	1:96:A:HIS:CG	1:96:A:HIS:ND1	10	19.68
(1,126)	1:146:A:HIS:N	1:146:A:HIS:CA	2:173:A:CU1:CU	1:147:A:VAL:N	1	19.66
(1,386)	1:104:A:TRP:C	1:105:A:ASP:N	1:105:A:ASP:CA	1:105:A:ASP:C	12	19.61
(1,61)	1:75:A:MET:C	1:76:A:THR:N	1:76:A:THR:CA	1:76:A:THR:C	7	19.56
(1,308)	1:64:A:GLN:N	1:64:A:GLN:CA	1:64:A:GLN:C	1:65:A:GLN:N	4	19.52
(1,235)	1:24:A:ASN:N	1:24:A:ASN:CA	1:24:A:ASN:C	1:25:A:CYS:N	2	19.5
(1,89)	1:95:A:TRP:C	1:96:A:HIS:N	1:96:A:HIS:CA	1:96:A:HIS:C	2	19.48
(1,437)	1:123:A:HIS:C	1:124:A:ASP:N	1:124:A:ASP:CA	1:124:A:ASP:C	4	19.47
(1,172)	1:39:A:LYS:N	1:39:A:LYS:CA	1:39:A:LYS:C	1:40:A:GLY:N	1	19.45
(1,22)	1:37:A:ALA:N	1:37:A:ALA:CA	1:37:A:ALA:C	1:38:A:LYS:N	14	19.4
(1,48)	1:68:A:ASN:N	1:68:A:ASN:CA	1:68:A:ASN:C	1:69:A:ARG:N	1	19.39
(1,238)	1:25:A:CYS:N	1:25:A:CYS:CA	1:25:A:CYS:C	1:26:A:GLY:N	20	19.37
(1,181)	1:155:A:ALA:N	1:155:A:ALA:CA	1:155:A:ALA:C	1:156:A:ASP:N	8	19.29
(1,240)	1:26:A:GLY:N	1:26:A:GLY:CA	1:26:A:GLY:C	1:27:A:SER:N	6	19.25
(1,80)	1:86:A:TYR:N	1:86:A:TYR:CA	1:86:A:TYR:C	1:87:A:THR:N	12	19.24
(1,108)	1:130:A:ARG:N	1:130:A:ARG:CA	1:130:A:ARG:C	1:131:A:ASN:N	20	19.21

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,104)	1:128:A:ALA:N	1:128:A:ALA:CA	1:128:A:ALA:C	1:129:A:SER:N	4	19.2
(1,212)	1:18:A:PHE:N	1:18:A:PHE:CA	1:18:A:PHE:CB	1:18:A:PHE:CG	1	19.13
(1,112)	1:132:A:LEU:N	1:132:A:LEU:CA	1:132:A:LEU:C	1:133:A:SER:N	1	19.12
(1,507)	1:161:A:PHE:N	1:161:A:PHE:CA	1:161:A:PHE:CB	1:161:A:PHE:CG	20	19.09
(1,76)	1:84:A:TRP:N	1:84:A:TRP:CA	1:84:A:TRP:C	1:85:A:THR:N	13	19.06
(1,264)	1:37:A:ALA:C	1:38:A:LYS:N	1:38:A:LYS:CA	1:38:A:LYS:C	8	19.0
(1,124)	1:145:A:TYR:N	1:145:A:TYR:CA	1:145:A:TYR:C	1:146:A:HIS:N	12	18.98
(1,112)	1:132:A:LEU:N	1:132:A:LEU:CA	1:132:A:LEU:C	1:133:A:SER:N	12	18.94
(1,47)	1:67:A:GLU:C	1:68:A:ASN:N	1:68:A:ASN:CA	1:68:A:ASN:C	16	18.94
(1,238)	1:25:A:CYS:N	1:25:A:CYS:CA	1:25:A:CYS:C	1:26:A:GLY:N	11	18.89
(1,356)	1:93:A:SER:N	1:93:A:SER:CA	1:93:A:SER:CB	1:93:A:SER:OG	4	18.83
(1,172)	1:39:A:LYS:N	1:39:A:LYS:CA	1:39:A:LYS:C	1:40:A:GLY:N	5	18.8
(1,452)	1:134:A:HIS:N	1:134:A:HIS:CA	1:134:A:HIS:CB	1:134:A:HIS:CG	1	18.75
(1,263)	1:36:A:GLU:N	1:36:A:GLU:CA	1:36:A:GLU:C	1:37:A:ALA:N	19	18.73
(1,76)	1:84:A:TRP:N	1:84:A:TRP:CA	1:84:A:TRP:C	1:85:A:THR:N	2	18.72
(1,113)	1:132:A:LEU:C	1:133:A:SER:N	1:133:A:SER:CA	1:133:A:SER:C	3	18.64
(1,100)	1:121:A:VAL:N	1:121:A:VAL:CA	1:121:A:VAL:C	1:122:A:PRO:N	1	18.64
(1,126)	1:146:A:HIS:N	1:146:A:HIS:CA	2:173:A:CU1:CU	1:147:A:VAL:N	10	18.6
(1,71)	1:81:A:THR:C	1:82:A:PHE:N	1:82:A:PHE:CA	1:82:A:PHE:C	16	18.6
(1,277)	1:44:A:SER:N	1:44:A:SER:CA	1:44:A:SER:C	1:45:A:GLY:N	8	18.57
(1,126)	1:146:A:HIS:N	1:146:A:HIS:CA	2:173:A:CU1:CU	1:147:A:VAL:N	20	18.56
(1,89)	1:95:A:TRP:C	1:96:A:HIS:N	1:96:A:HIS:CA	1:96:A:HIS:C	13	18.56
(1,181)	1:155:A:ALA:N	1:155:A:ALA:CA	1:155:A:ALA:C	1:156:A:ASP:N	18	18.48
(1,175)	1:55:A:GLY:C	1:56:A:GLY:N	1:56:A:GLY:CA	1:56:A:GLY:C	7	18.41
(1,181)	1:155:A:ALA:N	1:155:A:ALA:CA	1:155:A:ALA:C	1:156:A:ASP:N	17	18.36
(1,212)	1:18:A:PHE:N	1:18:A:PHE:CA	1:18:A:PHE:CB	1:18:A:PHE:CG	11	18.33
(1,303)	1:63:A:ASP:N	1:63:A:ASP:CA	1:63:A:ASP:CB	1:63:A:ASP:CG	9	18.27
(1,230)	1:23:A:LEU:CA	1:23:A:LEU:CB	1:23:A:LEU:CG	1:23:A:LEU:CD2	14	18.27
(1,60)	1:75:A:MET:N	1:75:A:MET:CA	1:75:A:MET:C	1:76:A:THR:N	5	18.24
(1,449)	1:132:A:LEU:N	1:132:A:LEU:CA	1:132:A:LEU:CB	1:132:A:LEU:CG	8	18.15
(1,217)	1:20:A:PHE:N	1:20:A:PHE:CA	1:20:A:PHE:CB	1:20:A:PHE:CG	15	18.11
(1,236)	1:24:A:ASN:C	1:25:A:CYS:N	1:25:A:CYS:CA	1:25:A:CYS:C	19	18.1
(1,482)	1:145:A:TYR:N	1:145:A:TYR:CA	1:145:A:TYR:CB	1:145:A:TYR:CG	9	18.04
(1,17)	1:32:A:PRO:C	1:33:A:GLN:N	1:33:A:GLN:CA	1:33:A:GLN:C	2	17.98
(1,116)	1:134:A:HIS:N	1:134:A:HIS:CA	2:173:A:CU1:CU	1:135:A:HIS:N	6	17.91
(1,263)	1:36:A:GLU:N	1:36:A:GLU:CA	1:36:A:GLU:C	1:37:A:ALA:N	20	17.9
(1,106)	1:129:A:SER:N	1:129:A:SER:CA	1:129:A:SER:C	1:130:A:ARG:N	6	17.88
(1,97)	1:114:A:ASP:C	1:115:A:PHE:N	1:115:A:PHE:CA	1:115:A:PHE:C	10	17.85
(1,502)	1:158:A:GLU:N	1:158:A:GLU:CA	1:158:A:GLU:C	1:159:A:ASN:N	20	17.77
(1,53)	1:71:A:PHE:C	1:72:A:LYS:N	1:72:A:LYS:CA	1:72:A:LYS:C	4	17.76
(1,440)	1:124:A:ASP:N	1:124:A:ASP:CA	1:124:A:ASP:C	1:125:A:GLY:N	17	17.75
(1,89)	1:95:A:TRP:C	1:96:A:HIS:N	1:96:A:HIS:CA	1:96:A:HIS:C	12	17.72
(1,172)	1:39:A:LYS:N	1:39:A:LYS:CA	1:39:A:LYS:C	1:40:A:GLY:N	9	17.7
(1,113)	1:132:A:LEU:C	1:133:A:SER:N	1:133:A:SER:CA	1:133:A:SER:C	20	17.69
(1,47)	1:67:A:GLU:C	1:68:A:ASN:N	1:68:A:ASN:CA	1:68:A:ASN:C	2	17.65
(1,391)	1:107:A:ASP:N	1:107:A:ASP:CA	1:107:A:ASP:CB	1:107:A:ASP:CG	10	17.6
(1,113)	1:132:A:LEU:C	1:133:A:SER:N	1:133:A:SER:CA	1:133:A:SER:C	13	17.59
(1,502)	1:158:A:GLU:N	1:158:A:GLU:CA	1:158:A:GLU:C	1:159:A:ASN:N	6	17.56
(1,386)	1:104:A:TRP:C	1:105:A:ASP:N	1:105:A:ASP:CA	1:105:A:ASP:C	19	17.56
(1,89)	1:95:A:TRP:C	1:96:A:HIS:N	1:96:A:HIS:CA	1:96:A:HIS:C	14	17.53
(1,44)	1:63:A:ASP:N	1:63:A:ASP:CA	1:63:A:ASP:C	1:64:A:GLN:N	9	17.53

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,231)	1:23:A:LEU:N	1:23:A:LEU:CA	1:23:A:LEU:C	1:24:A:ASN:N	12	17.36
(1,66)	1:79:A:GLU:N	1:79:A:GLU:CA	1:79:A:GLU:C	1:80:A:HIS:N	12	17.36
(1,151)	1:162:A:TYR:C	1:163:A:GLN:N	1:163:A:GLN:CA	1:163:A:GLN:C	16	17.34
(1,180)	1:154:A:VAL:C	1:155:A:ALA:N	1:155:A:ALA:CA	1:155:A:ALA:C	10	17.32
(1,260)	1:35:A:LEU:C	1:36:A:GLU:N	1:36:A:GLU:CA	1:36:A:GLU:C	20	17.28
(1,11)	1:26:A:GLY:C	1:27:A:SER:N	1:27:A:SER:CA	1:27:A:SER:C	17	17.27
(1,390)	1:106:A:PRO:C	1:107:A:ASP:N	1:107:A:ASP:CA	1:107:A:ASP:C	5	17.16
(1,390)	1:106:A:PRO:C	1:107:A:ASP:N	1:107:A:ASP:CA	1:107:A:ASP:C	13	17.15
(1,104)	1:128:A:ALA:N	1:128:A:ALA:CA	1:128:A:ALA:C	1:129:A:SER:N	16	17.15
(1,260)	1:35:A:LEU:C	1:36:A:GLU:N	1:36:A:GLU:CA	1:36:A:GLU:C	14	17.14
(1,38)	1:60:A:GLY:N	1:60:A:GLY:CA	1:60:A:GLY:C	1:61:A:ILE:N	1	17.11
(1,22)	1:37:A:ALA:N	1:37:A:ALA:CA	1:37:A:ALA:C	1:38:A:LYS:N	15	17.11
(1,23)	1:46:A:PRO:C	1:47:A:ALA:N	1:47:A:ALA:CA	1:47:A:ALA:C	5	17.1
(1,296)	1:57:A:LEU:N	1:57:A:LEU:CA	1:57:A:LEU:C	1:58:A:PHE:N	15	16.99
(1,212)	1:18:A:PHE:N	1:18:A:PHE:CA	1:18:A:PHE:CB	1:18:A:PHE:CG	19	16.99
(1,301)	1:62:A:LEU:N	1:62:A:LEU:CA	1:62:A:LEU:CB	1:62:A:LEU:CG	16	16.98
(1,116)	1:134:A:HIS:N	1:134:A:HIS:CA	2:173:A:CU1:CU	1:135:A:HIS:N	12	16.93
(1,76)	1:84:A:TRP:N	1:84:A:TRP:CA	1:84:A:TRP:C	1:85:A:THR:N	6	16.92
(1,440)	1:124:A:ASP:N	1:124:A:ASP:CA	1:124:A:ASP:C	1:125:A:GLY:N	12	16.89
(1,180)	1:154:A:VAL:C	1:155:A:ALA:N	1:155:A:ALA:CA	1:155:A:ALA:C	13	16.88
(1,438)	1:124:A:ASP:N	1:124:A:ASP:CA	1:124:A:ASP:CB	1:124:A:ASP:CG	2	16.85
(1,47)	1:67:A:GLU:C	1:68:A:ASN:N	1:68:A:ASN:CA	1:68:A:ASN:C	9	16.81
(1,18)	1:33:A:GLN:N	1:33:A:GLN:CA	1:33:A:GLN:C	1:34:A:SER:N	19	16.78
(1,181)	1:155:A:ALA:N	1:155:A:ALA:CA	1:155:A:ALA:C	1:156:A:ASP:N	4	16.73
(1,67)	1:79:A:GLU:C	1:80:A:HIS:N	1:80:A:HIS:CA	2:173:A:CU1:CU	3	16.71
(1,21)	1:36:A:GLU:C	1:37:A:ALA:N	1:37:A:ALA:CA	1:37:A:ALA:C	15	16.68
(1,212)	1:18:A:PHE:N	1:18:A:PHE:CA	1:18:A:PHE:CB	1:18:A:PHE:CG	14	16.65
(1,316)	1:67:A:GLU:N	1:67:A:GLU:CA	1:67:A:GLU:CB	1:67:A:GLU:CG	15	16.64
(1,212)	1:18:A:PHE:N	1:18:A:PHE:CA	1:18:A:PHE:CB	1:18:A:PHE:CG	10	16.63
(1,8)	1:13:A:LEU:N	1:13:A:LEU:CA	1:13:A:LEU:C	1:14:A:CYS:N	3	16.58
(1,129)	1:147:A:VAL:C	1:148:A:ILE:N	1:148:A:ILE:CA	1:148:A:ILE:C	1	16.52
(1,217)	1:20:A:PHE:N	1:20:A:PHE:CA	1:20:A:PHE:CB	1:20:A:PHE:CG	2	16.51
(1,283)	1:48:A:ASP:N	1:48:A:ASP:CA	1:48:A:ASP:C	1:49:A:GLY:N	9	16.4
(1,303)	1:63:A:ASP:N	1:63:A:ASP:CA	1:63:A:ASP:CB	1:63:A:ASP:CG	10	16.37
(1,301)	1:62:A:LEU:N	1:62:A:LEU:CA	1:62:A:LEU:CB	1:62:A:LEU:CG	10	16.37
(1,71)	1:81:A:THR:C	1:82:A:PHE:N	1:82:A:PHE:CA	1:82:A:PHE:C	9	16.36
(1,415)	1:114:A:ASP:N	1:114:A:ASP:CA	1:114:A:ASP:C	1:115:A:PHE:N	7	16.35
(1,117)	1:134:A:HIS:C	1:135:A:HIS:N	1:135:A:HIS:CA	1:135:A:HIS:C	19	16.3
(1,212)	1:18:A:PHE:N	1:18:A:PHE:CA	1:18:A:PHE:CB	1:18:A:PHE:CG	13	16.26
(1,437)	1:123:A:HIS:C	1:124:A:ASP:N	1:124:A:ASP:CA	1:124:A:ASP:C	16	16.15
(1,8)	1:13:A:LEU:N	1:13:A:LEU:CA	1:13:A:LEU:C	1:14:A:CYS:N	16	16.14
(1,224)	1:21:A:LEU:C	1:22:A:ASN:N	1:22:A:ASN:CA	1:22:A:ASN:C	15	16.13
(1,110)	1:131:A:ASN:N	1:131:A:ASN:CA	1:131:A:ASN:C	1:132:A:LEU:N	13	16.11
(1,67)	1:79:A:GLU:C	1:80:A:HIS:N	1:80:A:HIS:CA	2:173:A:CU1:CU	9	16.09
(1,302)	1:62:A:LEU:CA	1:62:A:LEU:CB	1:62:A:LEU:CG	1:62:A:LEU:CD2	6	16.08
(1,231)	1:23:A:LEU:N	1:23:A:LEU:CA	1:23:A:LEU:C	1:24:A:ASN:N	4	16.03
(1,100)	1:121:A:VAL:N	1:121:A:VAL:CA	1:121:A:VAL:C	1:122:A:PRO:N	4	16.02
(1,453)	1:134:A:HIS:CA	1:134:A:HIS:CB	1:134:A:HIS:CG	1:134:A:HIS:ND1	14	15.99
(1,176)	1:56:A:GLY:N	1:56:A:GLY:CA	1:56:A:GLY:C	1:57:A:LEU:N	7	15.94
(1,449)	1:132:A:LEU:N	1:132:A:LEU:CA	1:132:A:LEU:CB	1:132:A:LEU:CG	17	15.92
(1,235)	1:24:A:ASN:N	1:24:A:ASN:CA	1:24:A:ASN:C	1:25:A:CYS:N	17	15.9

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,117)	1:134:A:HIS:C	1:135:A:HIS:N	1:135:A:HIS:CA	1:135:A:HIS:C	4	15.9
(1,126)	1:146:A:HIS:N	1:146:A:HIS:CA	2:173:A:CU1:CU	1:147:A:VAL:N	9	15.86
(1,126)	1:146:A:HIS:N	1:146:A:HIS:CA	2:173:A:CU1:CU	1:147:A:VAL:N	11	15.84
(1,361)	1:96:A:HIS:N	1:96:A:HIS:CA	1:96:A:HIS:CB	1:96:A:HIS:CG	4	15.83
(1,113)	1:132:A:LEU:C	1:133:A:SER:N	1:133:A:SER:CA	1:133:A:SER:C	7	15.76
(1,500)	1:158:A:GLU:N	1:158:A:GLU:CA	1:158:A:GLU:CB	1:158:A:GLU:CG	20	15.71
(1,308)	1:64:A:GLN:N	1:64:A:GLN:CA	1:64:A:GLN:C	1:65:A:GLN:N	18	15.7
(1,493)	1:153:A:ASP:N	1:153:A:ASP:CA	1:153:A:ASP:CB	1:153:A:ASP:CG	16	15.69
(1,223)	1:21:A:LEU:N	1:21:A:LEU:CA	1:21:A:LEU:C	1:22:A:ASN:N	3	15.68
(1,61)	1:75:A:MET:C	1:76:A:THR:N	1:76:A:THR:CA	1:76:A:THR:C	10	15.65
(1,100)	1:121:A:VAL:N	1:121:A:VAL:CA	1:121:A:VAL:C	1:122:A:PRO:N	11	15.63
(1,135)	1:150:A:ALA:C	1:151:A:VAL:N	1:151:A:VAL:CA	1:151:A:VAL:C	12	15.61
(1,493)	1:153:A:ASP:N	1:153:A:ASP:CA	1:153:A:ASP:CB	1:153:A:ASP:CG	14	15.59
(1,61)	1:75:A:MET:C	1:76:A:THR:N	1:76:A:THR:CA	1:76:A:THR:C	14	15.57
(1,150)	1:162:A:TYR:N	1:162:A:TYR:CA	1:162:A:TYR:C	1:163:A:GLN:N	16	15.54
(1,43)	1:62:A:LEU:C	1:63:A:ASP:N	1:63:A:ASP:CA	1:63:A:ASP:C	15	15.54
(1,10)	1:16:A:GLU:N	1:16:A:GLU:CA	1:16:A:GLU:C	1:17:A:ALA:N	6	15.52
(1,53)	1:71:A:PHE:C	1:72:A:LYS:N	1:72:A:LYS:CA	1:72:A:LYS:C	10	15.51
(1,107)	1:129:A:SER:C	1:130:A:ARG:N	1:130:A:ARG:CA	1:130:A:ARG:C	20	15.47
(1,493)	1:153:A:ASP:N	1:153:A:ASP:CA	1:153:A:ASP:CB	1:153:A:ASP:CG	10	15.46
(1,121)	1:142:A:ARG:C	1:143:A:LEU:N	1:143:A:LEU:CA	1:143:A:LEU:C	6	15.44
(1,203)	1:14:A:CYS:N	1:14:A:CYS:CA	1:14:A:CYS:C	1:15:A:SER:N	4	15.43
(1,70)	1:81:A:THR:N	1:81:A:THR:CA	1:81:A:THR:C	1:82:A:PHE:N	16	15.38
(1,312)	1:65:A:GLN:N	1:65:A:GLN:CA	1:65:A:GLN:C	1:66:A:SER:N	16	15.36
(1,47)	1:67:A:GLU:C	1:68:A:ASN:N	1:68:A:ASN:CA	1:68:A:ASN:C	10	15.31
(1,135)	1:150:A:ALA:C	1:151:A:VAL:N	1:151:A:VAL:CA	1:151:A:VAL:C	6	15.3
(1,61)	1:75:A:MET:C	1:76:A:THR:N	1:76:A:THR:CA	1:76:A:THR:C	8	15.28
(1,147)	1:160:A:ALA:C	1:161:A:PHE:N	1:161:A:PHE:CA	1:161:A:PHE:C	11	15.22
(1,502)	1:158:A:GLU:N	1:158:A:GLU:CA	1:158:A:GLU:C	1:159:A:ASN:N	8	15.21
(1,32)	1:54:A:ALA:N	1:54:A:ALA:CA	1:54:A:ALA:C	1:55:A:GLY:N	20	15.2
(1,231)	1:23:A:LEU:N	1:23:A:LEU:CA	1:23:A:LEU:C	1:24:A:ASN:N	3	15.19
(1,10)	1:16:A:GLU:N	1:16:A:GLU:CA	1:16:A:GLU:C	1:17:A:ALA:N	13	15.19
(1,493)	1:153:A:ASP:N	1:153:A:ASP:CA	1:153:A:ASP:CB	1:153:A:ASP:CG	5	15.17
(1,121)	1:142:A:ARG:C	1:143:A:LEU:N	1:143:A:LEU:CA	1:143:A:LEU:C	15	15.17
(1,263)	1:36:A:GLU:N	1:36:A:GLU:CA	1:36:A:GLU:C	1:37:A:ALA:N	15	15.14
(1,437)	1:123:A:HIS:C	1:124:A:ASP:N	1:124:A:ASP:CA	1:124:A:ASP:C	1	15.12
(1,264)	1:37:A:ALA:C	1:38:A:LYS:N	1:38:A:LYS:CA	1:38:A:LYS:C	18	15.12
(1,12)	1:27:A:SER:N	1:27:A:SER:CA	1:27:A:SER:C	1:28:A:VAL:N	3	15.06
(1,406)	1:111:A:LYS:N	1:111:A:LYS:CA	1:111:A:LYS:C	1:112:A:ARG:N	6	15.02
(1,231)	1:23:A:LEU:N	1:23:A:LEU:CA	1:23:A:LEU:C	1:24:A:ASN:N	1	15.02
(1,57)	1:73:A:HIS:C	1:74:A:ILE:N	1:74:A:ILE:CA	1:74:A:ILE:C	12	15.01
(1,32)	1:54:A:ALA:N	1:54:A:ALA:CA	1:54:A:ALA:C	1:55:A:GLY:N	8	15.0
(1,89)	1:95:A:TRP:C	1:96:A:HIS:N	1:96:A:HIS:CA	1:96:A:HIS:C	18	14.96
(1,140)	1:153:A:ASP:N	1:153:A:ASP:CA	1:153:A:ASP:C	1:154:A:VAL:N	10	14.92
(1,116)	1:134:A:HIS:N	1:134:A:HIS:CA	2:173:A:CU1:CU	1:135:A:HIS:N	11	14.89
(1,89)	1:95:A:TRP:C	1:96:A:HIS:N	1:96:A:HIS:CA	1:96:A:HIS:C	11	14.89
(1,283)	1:48:A:ASP:N	1:48:A:ASP:CA	1:48:A:ASP:C	1:49:A:GLY:N	17	14.86
(1,21)	1:36:A:GLU:C	1:37:A:ALA:N	1:37:A:ALA:CA	1:37:A:ALA:C	19	14.82
(1,438)	1:124:A:ASP:N	1:124:A:ASP:CA	1:124:A:ASP:CB	1:124:A:ASP:CG	10	14.78
(1,172)	1:39:A:LYS:N	1:39:A:LYS:CA	1:39:A:LYS:C	1:40:A:GLY:N	11	14.78
(1,148)	1:161:A:PHE:N	1:161:A:PHE:CA	1:161:A:PHE:C	1:162:A:TYR:N	9	14.78

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,390)	1:106:A:PRO:C	1:107:A:ASP:N	1:107:A:ASP:CA	1:107:A:ASP:C	1	14.77
(1,44)	1:63:A:ASP:N	1:63:A:ASP:CA	1:63:A:ASP:C	1:64:A:GLN:N	3	14.77
(1,230)	1:23:A:LEU:CA	1:23:A:LEU:CB	1:23:A:LEU:CG	1:23:A:LEU:CD2	10	14.75
(1,151)	1:162:A:TYR:C	1:163:A:GLN:N	1:163:A:GLN:CA	1:163:A:GLN:C	7	14.75
(1,361)	1:96:A:HIS:N	1:96:A:HIS:CA	1:96:A:HIS:CB	1:96:A:HIS:CG	3	14.74
(1,123)	1:144:A:GLY:C	1:145:A:TYR:N	1:145:A:TYR:CA	1:145:A:TYR:C	4	14.74
(1,97)	1:114:A:ASP:C	1:115:A:PHE:N	1:115:A:PHE:CA	1:115:A:PHE:C	2	14.69
(1,38)	1:60:A:GLY:N	1:60:A:GLY:CA	1:60:A:GLY:C	1:61:A:ILE:N	13	14.69
(1,240)	1:26:A:GLY:N	1:26:A:GLY:CA	1:26:A:GLY:C	1:27:A:SER:N	1	14.65
(1,97)	1:114:A:ASP:C	1:115:A:PHE:N	1:115:A:PHE:CA	1:115:A:PHE:C	17	14.64
(1,32)	1:54:A:ALA:N	1:54:A:ALA:CA	1:54:A:ALA:C	1:55:A:GLY:N	2	14.63
(1,126)	1:146:A:HIS:N	1:146:A:HIS:CA	2:173:A:CU1:CU	1:147:A:VAL:N	4	14.62
(1,48)	1:68:A:ASN:N	1:68:A:ASN:CA	1:68:A:ASN:C	1:69:A:ARG:N	5	14.61
(1,21)	1:36:A:GLU:C	1:37:A:ALA:N	1:37:A:ALA:CA	1:37:A:ALA:C	14	14.61
(1,180)	1:154:A:VAL:C	1:155:A:ALA:N	1:155:A:ALA:CA	1:155:A:ALA:C	11	14.58
(1,238)	1:25:A:CYS:N	1:25:A:CYS:CA	1:25:A:CYS:C	1:26:A:GLY:N	5	14.57
(1,102)	1:123:A:HIS:N	1:123:A:HIS:CA	1:123:A:HIS:C	1:124:A:ASP:N	1	14.52
(1,97)	1:114:A:ASP:C	1:115:A:PHE:N	1:115:A:PHE:CA	1:115:A:PHE:C	11	14.52
(1,240)	1:26:A:GLY:N	1:26:A:GLY:CA	1:26:A:GLY:C	1:27:A:SER:N	7	14.51
(1,61)	1:75:A:MET:C	1:76:A:THR:N	1:76:A:THR:CA	1:76:A:THR:C	1	14.43
(1,123)	1:144:A:GLY:C	1:145:A:TYR:N	1:145:A:TYR:CA	1:145:A:TYR:C	11	14.41
(1,482)	1:145:A:TYR:N	1:145:A:TYR:CA	1:145:A:TYR:CB	1:145:A:TYR:CG	10	14.4
(1,124)	1:145:A:TYR:N	1:145:A:TYR:CA	1:145:A:TYR:C	1:146:A:HIS:N	15	14.35
(1,390)	1:106:A:PRO:C	1:107:A:ASP:N	1:107:A:ASP:CA	1:107:A:ASP:C	20	14.33
(1,28)	1:52:A:ALA:N	1:52:A:ALA:CA	1:52:A:ALA:C	1:53:A:SER:N	2	14.33
(1,180)	1:154:A:VAL:C	1:155:A:ALA:N	1:155:A:ALA:CA	1:155:A:ALA:C	12	14.31
(1,264)	1:37:A:ALA:C	1:38:A:LYS:N	1:38:A:LYS:CA	1:38:A:LYS:C	6	14.3
(1,73)	1:82:A:PHE:C	1:83:A:THR:N	1:83:A:THR:CA	1:83:A:THR:C	11	14.3
(1,8)	1:13:A:LEU:N	1:13:A:LEU:CA	1:13:A:LEU:C	1:14:A:CYS:N	4	14.29
(1,97)	1:114:A:ASP:C	1:115:A:PHE:N	1:115:A:PHE:CA	1:115:A:PHE:C	8	14.27
(1,140)	1:153:A:ASP:N	1:153:A:ASP:CA	1:153:A:ASP:C	1:154:A:VAL:N	7	14.26
(1,231)	1:23:A:LEU:N	1:23:A:LEU:CA	1:23:A:LEU:C	1:24:A:ASN:N	17	14.23
(1,123)	1:144:A:GLY:C	1:145:A:TYR:N	1:145:A:TYR:CA	1:145:A:TYR:C	7	14.21
(1,121)	1:142:A:ARG:C	1:143:A:LEU:N	1:143:A:LEU:CA	1:143:A:LEU:C	12	14.17
(1,252)	1:32:A:PRO:N	1:32:A:PRO:CA	1:32:A:PRO:C	1:33:A:GLN:N	16	14.11
(1,121)	1:142:A:ARG:C	1:143:A:LEU:N	1:143:A:LEU:CA	1:143:A:LEU:C	11	14.07
(1,97)	1:114:A:ASP:C	1:115:A:PHE:N	1:115:A:PHE:CA	1:115:A:PHE:C	5	14.07
(1,308)	1:64:A:GLN:N	1:64:A:GLN:CA	1:64:A:GLN:C	1:65:A:GLN:N	9	14.02
(1,281)	1:47:A:ALA:C	1:48:A:ASP:N	1:48:A:ASP:CA	1:48:A:ASP:C	1	14.02
(1,263)	1:36:A:GLU:N	1:36:A:GLU:CA	1:36:A:GLU:C	1:37:A:ALA:N	5	14.02
(1,312)	1:65:A:GLN:N	1:65:A:GLN:CA	1:65:A:GLN:C	1:66:A:SER:N	6	14.01
(1,180)	1:154:A:VAL:C	1:155:A:ALA:N	1:155:A:ALA:CA	1:155:A:ALA:C	8	14.0
(1,122)	1:143:A:LEU:N	1:143:A:LEU:CA	1:143:A:LEU:C	1:144:A:GLY:N	12	14.0
(1,63)	1:77:A:GLY:C	1:78:A:GLY:N	1:78:A:GLY:CA	1:78:A:GLY:C	10	13.99
(1,438)	1:124:A:ASP:N	1:124:A:ASP:CA	1:124:A:ASP:CB	1:124:A:ASP:CG	6	13.97
(1,202)	1:14:A:CYS:N	1:14:A:CYS:CA	1:14:A:CYS:CB	1:14:A:CYS:SG	16	13.97
(1,203)	1:14:A:CYS:N	1:14:A:CYS:CA	1:14:A:CYS:C	1:15:A:SER:N	18	13.91
(1,123)	1:144:A:GLY:C	1:145:A:TYR:N	1:145:A:TYR:CA	1:145:A:TYR:C	8	13.91
(1,47)	1:67:A:GLU:C	1:68:A:ASN:N	1:68:A:ASN:CA	1:68:A:ASN:C	8	13.91
(1,263)	1:36:A:GLU:N	1:36:A:GLU:CA	1:36:A:GLU:C	1:37:A:ALA:N	16	13.86
(1,8)	1:13:A:LEU:N	1:13:A:LEU:CA	1:13:A:LEU:C	1:14:A:CYS:N	2	13.85

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,124)	1:145:A:TYR:N	1:145:A:TYR:CA	1:145:A:TYR:C	1:146:A:HIS:N	2	13.84
(1,174)	1:49:A:GLY:N	1:49:A:GLY:CA	1:49:A:GLY:C	1:50:A:GLN:N	9	13.83
(1,113)	1:132:A:LEU:C	1:133:A:SER:N	1:133:A:SER:CA	1:133:A:SER:C	2	13.77
(1,500)	1:158:A:GLU:N	1:158:A:GLU:CA	1:158:A:GLU:CB	1:158:A:GLU:CG	5	13.73
(1,21)	1:36:A:GLU:C	1:37:A:ALA:N	1:37:A:ALA:CA	1:37:A:ALA:C	17	13.72
(1,274)	1:43:A:HIS:N	1:43:A:HIS:CA	1:43:A:HIS:C	1:44:A:SER:N	5	13.7
(1,53)	1:71:A:PHE:C	1:72:A:LYS:N	1:72:A:LYS:CA	1:72:A:LYS:C	14	13.7
(1,361)	1:96:A:HIS:N	1:96:A:HIS:CA	1:96:A:HIS:CB	1:96:A:HIS:CG	17	13.69
(1,67)	1:79:A:GLU:C	1:80:A:HIS:N	1:80:A:HIS:CA	2:173:A:CU1:CU	15	13.69
(1,81)	1:87:A:THR:C	1:88:A:ALA:N	1:88:A:ALA:CA	1:88:A:ALA:C	13	13.68
(1,21)	1:36:A:GLU:C	1:37:A:ALA:N	1:37:A:ALA:CA	1:37:A:ALA:C	9	13.68
(1,252)	1:32:A:PRO:N	1:32:A:PRO:CA	1:32:A:PRO:C	1:33:A:GLN:N	2	13.63
(1,154)	1:164:A:VAL:N	1:164:A:VAL:CA	1:164:A:VAL:C	1:165:A:ILE:N	10	13.63
(1,452)	1:134:A:HIS:N	1:134:A:HIS:CA	1:134:A:HIS:CB	1:134:A:HIS:CG	10	13.6
(1,113)	1:132:A:LEU:C	1:133:A:SER:N	1:133:A:SER:CA	1:133:A:SER:C	10	13.59
(1,151)	1:162:A:TYR:C	1:163:A:GLN:N	1:163:A:GLN:CA	1:163:A:GLN:C	10	13.58
(1,390)	1:106:A:PRO:C	1:107:A:ASP:N	1:107:A:ASP:CA	1:107:A:ASP:C	12	13.55
(1,493)	1:153:A:ASP:N	1:153:A:ASP:CA	1:153:A:ASP:CB	1:153:A:ASP:CG	9	13.54
(1,203)	1:14:A:CYS:N	1:14:A:CYS:CA	1:14:A:CYS:C	1:15:A:SER:N	8	13.54
(1,202)	1:14:A:CYS:N	1:14:A:CYS:CA	1:14:A:CYS:CB	1:14:A:CYS:SG	19	13.54
(1,231)	1:23:A:LEU:N	1:23:A:LEU:CA	1:23:A:LEU:C	1:24:A:ASN:N	14	13.52
(1,135)	1:150:A:ALA:C	1:151:A:VAL:N	1:151:A:VAL:CA	1:151:A:VAL:C	11	13.52
(1,252)	1:32:A:PRO:N	1:32:A:PRO:CA	1:32:A:PRO:C	1:33:A:GLN:N	11	13.51
(1,172)	1:39:A:LYS:N	1:39:A:LYS:CA	1:39:A:LYS:C	1:40:A:GLY:N	7	13.45
(1,507)	1:161:A:PHE:N	1:161:A:PHE:CA	1:161:A:PHE:CB	1:161:A:PHE:CG	12	13.44
(1,235)	1:24:A:ASN:N	1:24:A:ASN:CA	1:24:A:ASN:C	1:25:A:CYS:N	3	13.43
(1,507)	1:161:A:PHE:N	1:161:A:PHE:CA	1:161:A:PHE:CB	1:161:A:PHE:CG	14	13.42
(1,140)	1:153:A:ASP:N	1:153:A:ASP:CA	1:153:A:ASP:C	1:154:A:VAL:N	1	13.33
(1,474)	1:141:A:ASP:N	1:141:A:ASP:CA	1:141:A:ASP:C	1:142:A:ARG:N	20	13.3
(1,308)	1:64:A:GLN:N	1:64:A:GLN:CA	1:64:A:GLN:C	1:65:A:GLN:N	13	13.28
(1,440)	1:124:A:ASP:N	1:124:A:ASP:CA	1:124:A:ASP:C	1:125:A:GLY:N	13	13.27
(1,203)	1:14:A:CYS:N	1:14:A:CYS:CA	1:14:A:CYS:C	1:15:A:SER:N	6	13.26
(1,440)	1:124:A:ASP:N	1:124:A:ASP:CA	1:124:A:ASP:C	1:125:A:GLY:N	11	13.23
(1,19)	1:34:A:SER:C	1:35:A:LEU:N	1:35:A:LEU:CA	1:35:A:LEU:C	8	13.23
(1,125)	1:145:A:TYR:C	1:146:A:HIS:N	1:146:A:HIS:CA	1:146:A:HIS:C	12	13.16
(1,452)	1:134:A:HIS:N	1:134:A:HIS:CA	1:134:A:HIS:CB	1:134:A:HIS:CG	3	13.15
(1,217)	1:20:A:PHE:N	1:20:A:PHE:CA	1:20:A:PHE:CB	1:20:A:PHE:CG	13	13.12
(1,149)	1:161:A:PHE:C	1:162:A:TYR:N	1:162:A:TYR:CA	1:162:A:TYR:C	11	13.12
(1,146)	1:160:A:ALA:N	1:160:A:ALA:CA	1:160:A:ALA:C	1:161:A:PHE:N	1	13.11
(1,75)	1:83:A:THR:C	1:84:A:TRP:N	1:84:A:TRP:CA	1:84:A:TRP:C	11	13.07
(1,338)	1:79:A:GLU:CA	1:79:A:GLU:CB	1:79:A:GLU:CG	1:79:A:GLU:CD	18	13.03
(1,470)	1:140:A:GLU:N	1:140:A:GLU:CA	1:140:A:GLU:C	1:141:A:ASP:N	5	12.97
(1,190)	1:7:A:PRO:N	1:7:A:PRO:CA	1:7:A:PRO:C	1:8:A:GLY:N	3	12.95
(1,236)	1:24:A:ASN:C	1:25:A:CYS:N	1:25:A:CYS:CA	1:25:A:CYS:C	18	12.93
(1,268)	1:39:A:LYS:N	1:39:A:LYS:CA	1:39:A:LYS:CB	1:39:A:LYS:CG	6	12.85
(1,70)	1:81:A:THR:N	1:81:A:THR:CA	1:81:A:THR:C	1:82:A:PHE:N	6	12.84
(1,500)	1:158:A:GLU:N	1:158:A:GLU:CA	1:158:A:GLU:CB	1:158:A:GLU:CG	15	12.81
(1,126)	1:146:A:HIS:N	1:146:A:HIS:CA	2:173:A:CU1:CU	1:147:A:VAL:N	6	12.8
(1,231)	1:23:A:LEU:N	1:23:A:LEU:CA	1:23:A:LEU:C	1:24:A:ASN:N	8	12.78
(1,53)	1:71:A:PHE:C	1:72:A:LYS:N	1:72:A:LYS:CA	1:72:A:LYS:C	3	12.76
(1,26)	1:51:A:ILE:N	1:51:A:ILE:CA	1:51:A:ILE:C	1:52:A:ALA:N	15	12.76

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,90)	1:96:A:HIS:N	1:96:A:HIS:CA	1:96:A:HIS:C	1:97:A:TYR:N	8	12.75
(1,61)	1:75:A:MET:C	1:76:A:THR:N	1:76:A:THR:CA	1:76:A:THR:C	20	12.69
(1,81)	1:87:A:THR:C	1:88:A:ALA:N	1:88:A:ALA:CA	1:88:A:ALA:C	11	12.67
(1,124)	1:145:A:TYR:N	1:145:A:TYR:CA	1:145:A:TYR:C	1:146:A:HIS:N	8	12.65
(1,16)	1:29:A:MET:N	1:29:A:MET:CA	1:29:A:MET:C	1:30:A:TYR:N	9	12.65
(1,438)	1:124:A:ASP:N	1:124:A:ASP:CA	1:124:A:ASP:CB	1:124:A:ASP:CG	12	12.64
(1,386)	1:104:A:TRP:C	1:105:A:ASP:N	1:105:A:ASP:CA	1:105:A:ASP:C	18	12.64
(1,100)	1:121:A:VAL:N	1:121:A:VAL:CA	1:121:A:VAL:C	1:122:A:PRO:N	3	12.61
(1,74)	1:83:A:THR:N	1:83:A:THR:CA	1:83:A:THR:C	1:84:A:TRP:N	11	12.61
(1,108)	1:130:A:ARG:N	1:130:A:ARG:CA	1:130:A:ARG:C	1:131:A:ASN:N	17	12.59
(1,47)	1:67:A:GLU:C	1:68:A:ASN:N	1:68:A:ASN:CA	1:68:A:ASN:C	14	12.59
(1,274)	1:43:A:HIS:N	1:43:A:HIS:CA	1:43:A:HIS:C	1:44:A:SER:N	12	12.54
(1,135)	1:150:A:ALA:C	1:151:A:VAL:N	1:151:A:VAL:CA	1:151:A:VAL:C	13	12.52
(1,113)	1:132:A:LEU:C	1:133:A:SER:N	1:133:A:SER:CA	1:133:A:SER:C	16	12.49
(1,240)	1:26:A:GLY:N	1:26:A:GLY:CA	1:26:A:GLY:C	1:27:A:SER:N	3	12.47
(1,361)	1:96:A:HIS:N	1:96:A:HIS:CA	1:96:A:HIS:CB	1:96:A:HIS:CG	19	12.44
(1,260)	1:35:A:LEU:C	1:36:A:GLU:N	1:36:A:GLU:CA	1:36:A:GLU:C	3	12.41
(1,90)	1:96:A:HIS:N	1:96:A:HIS:CA	1:96:A:HIS:C	1:97:A:TYR:N	9	12.41
(1,11)	1:26:A:GLY:C	1:27:A:SER:N	1:27:A:SER:CA	1:27:A:SER:C	7	12.4
(1,435)	1:122:A:PRO:N	1:122:A:PRO:CA	1:122:A:PRO:C	1:123:A:HIS:N	20	12.33
(1,261)	1:36:A:GLU:N	1:36:A:GLU:CA	1:36:A:GLU:CB	1:36:A:GLU:CG	20	12.33
(1,482)	1:145:A:TYR:N	1:145:A:TYR:CA	1:145:A:TYR:CB	1:145:A:TYR:CG	5	12.32
(1,303)	1:63:A:ASP:N	1:63:A:ASP:CA	1:63:A:ASP:CB	1:63:A:ASP:CG	3	12.29
(1,435)	1:122:A:PRO:N	1:122:A:PRO:CA	1:122:A:PRO:C	1:123:A:HIS:N	3	12.27
(1,465)	1:138:A:ILE:N	1:138:A:ILE:CA	1:138:A:ILE:C	1:139:A:PRO:N	2	12.25
(1,361)	1:96:A:HIS:N	1:96:A:HIS:CA	1:96:A:HIS:CB	1:96:A:HIS:CG	14	12.22
(1,48)	1:68:A:ASN:N	1:68:A:ASN:CA	1:68:A:ASN:C	1:69:A:ARG:N	13	12.18
(1,303)	1:63:A:ASP:N	1:63:A:ASP:CA	1:63:A:ASP:CB	1:63:A:ASP:CG	18	12.17
(1,43)	1:62:A:LEU:C	1:63:A:ASP:N	1:63:A:ASP:CA	1:63:A:ASP:C	1	12.17
(1,507)	1:161:A:PHE:N	1:161:A:PHE:CA	1:161:A:PHE:CB	1:161:A:PHE:CG	6	12.16
(1,149)	1:161:A:PHE:C	1:162:A:TYR:N	1:162:A:TYR:CA	1:162:A:TYR:C	2	12.16
(1,452)	1:134:A:HIS:N	1:134:A:HIS:CA	1:134:A:HIS:CB	1:134:A:HIS:CG	14	12.14
(1,125)	1:145:A:TYR:C	1:146:A:HIS:N	1:146:A:HIS:CA	1:146:A:HIS:C	16	12.04
(1,160)	1:167:A:VAL:N	1:167:A:VAL:CA	1:167:A:VAL:C	1:168:A:ASP:N	17	12.01
(1,47)	1:67:A:GLU:C	1:68:A:ASN:N	1:68:A:ASN:CA	1:68:A:ASN:C	6	11.97
(1,76)	1:84:A:TRP:N	1:84:A:TRP:CA	1:84:A:TRP:C	1:85:A:THR:N	4	11.95
(1,22)	1:37:A:ALA:N	1:37:A:ALA:CA	1:37:A:ALA:C	1:38:A:LYS:N	12	11.94
(1,449)	1:132:A:LEU:N	1:132:A:LEU:CA	1:132:A:LEU:CB	1:132:A:LEU:CG	2	11.91
(1,123)	1:144:A:GLY:C	1:145:A:TYR:N	1:145:A:TYR:CA	1:145:A:TYR:C	14	11.88
(1,22)	1:37:A:ALA:N	1:37:A:ALA:CA	1:37:A:ALA:C	1:38:A:LYS:N	10	11.87
(1,66)	1:79:A:GLU:N	1:79:A:GLU:CA	1:79:A:GLU:C	1:80:A:HIS:N	16	11.85
(1,407)	1:111:A:LYS:C	1:112:A:ARG:N	1:112:A:ARG:CA	1:112:A:ARG:C	4	11.84
(1,406)	1:111:A:LYS:N	1:111:A:LYS:CA	1:111:A:LYS:C	1:112:A:ARG:N	9	11.83
(1,140)	1:153:A:ASP:N	1:153:A:ASP:CA	1:153:A:ASP:C	1:154:A:VAL:N	8	11.82
(1,43)	1:62:A:LEU:C	1:63:A:ASP:N	1:63:A:ASP:CA	1:63:A:ASP:C	3	11.81
(1,160)	1:167:A:VAL:N	1:167:A:VAL:CA	1:167:A:VAL:C	1:168:A:ASP:N	9	11.8
(1,127)	1:146:A:HIS:C	1:147:A:VAL:N	1:147:A:VAL:CA	1:147:A:VAL:C	13	11.8
(1,467)	1:139:A:PRO:C	1:140:A:GLU:N	1:140:A:GLU:CA	1:140:A:GLU:C	6	11.73
(1,32)	1:54:A:ALA:N	1:54:A:ALA:CA	1:54:A:ALA:C	1:55:A:GLY:N	16	11.73
(1,154)	1:164:A:VAL:N	1:164:A:VAL:CA	1:164:A:VAL:C	1:165:A:ILE:N	19	11.72
(1,140)	1:153:A:ASP:N	1:153:A:ASP:CA	1:153:A:ASP:C	1:154:A:VAL:N	15	11.65

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,10)	1:16:A:GLU:N	1:16:A:GLU:CA	1:16:A:GLU:C	1:17:A:ALA:N	4	11.65
(1,507)	1:161:A:PHE:N	1:161:A:PHE:CA	1:161:A:PHE:CB	1:161:A:PHE:CG	1	11.64
(1,407)	1:111:A:LYS:C	1:112:A:ARG:N	1:112:A:ARG:CA	1:112:A:ARG:C	2	11.62
(1,151)	1:162:A:TYR:C	1:163:A:GLN:N	1:163:A:GLN:CA	1:163:A:GLN:C	19	11.62
(1,125)	1:145:A:TYR:C	1:146:A:HIS:N	1:146:A:HIS:CA	1:146:A:HIS:C	15	11.62
(1,97)	1:114:A:ASP:C	1:115:A:PHE:N	1:115:A:PHE:CA	1:115:A:PHE:C	4	11.62
(1,22)	1:37:A:ALA:N	1:37:A:ALA:CA	1:37:A:ALA:C	1:38:A:LYS:N	16	11.62
(1,362)	1:96:A:HIS:CA	1:96:A:HIS:CB	1:96:A:HIS:CG	1:96:A:HIS:ND1	14	11.58
(1,76)	1:84:A:TRP:N	1:84:A:TRP:CA	1:84:A:TRP:C	1:85:A:THR:N	8	11.58
(1,32)	1:54:A:ALA:N	1:54:A:ALA:CA	1:54:A:ALA:C	1:55:A:GLY:N	5	11.58
(1,328)	1:72:A:LYS:N	1:72:A:LYS:CA	1:72:A:LYS:CB	1:72:A:LYS:CG	18	11.57
(1,415)	1:114:A:ASP:N	1:114:A:ASP:CA	1:114:A:ASP:C	1:115:A:PHE:N	11	11.55
(1,100)	1:121:A:VAL:N	1:121:A:VAL:CA	1:121:A:VAL:C	1:122:A:PRO:N	10	11.53
(1,135)	1:150:A:ALA:C	1:151:A:VAL:N	1:151:A:VAL:CA	1:151:A:VAL:C	4	11.5
(1,47)	1:67:A:GLU:C	1:68:A:ASN:N	1:68:A:ASN:CA	1:68:A:ASN:C	7	11.49
(1,236)	1:24:A:ASN:C	1:25:A:CYS:N	1:25:A:CYS:CA	1:25:A:CYS:C	10	11.45
(1,180)	1:154:A:VAL:C	1:155:A:ALA:N	1:155:A:ALA:CA	1:155:A:ALA:C	1	11.44
(1,437)	1:123:A:HIS:C	1:124:A:ASP:N	1:124:A:ASP:CA	1:124:A:ASP:C	18	11.43
(1,67)	1:79:A:GLU:C	1:80:A:HIS:N	1:80:A:HIS:CA	2:173:A:CU1:CU	6	11.42
(1,54)	1:72:A:LYS:N	1:72:A:LYS:CA	1:72:A:LYS:C	1:73:A:HIS:N	6	11.42
(1,261)	1:36:A:GLU:N	1:36:A:GLU:CA	1:36:A:GLU:CB	1:36:A:GLU:CG	3	11.41
(1,236)	1:24:A:ASN:C	1:25:A:CYS:N	1:25:A:CYS:CA	1:25:A:CYS:C	8	11.36
(1,44)	1:63:A:ASP:N	1:63:A:ASP:CA	1:63:A:ASP:C	1:64:A:GLN:N	6	11.35
(1,203)	1:14:A:CYS:N	1:14:A:CYS:CA	1:14:A:CYS:C	1:15:A:SER:N	19	11.33
(1,21)	1:36:A:GLU:C	1:37:A:ALA:N	1:37:A:ALA:CA	1:37:A:ALA:C	20	11.29
(1,275)	1:43:A:HIS:C	1:44:A:SER:N	1:44:A:SER:CA	1:44:A:SER:C	20	11.28
(1,89)	1:95:A:TRP:C	1:96:A:HIS:N	1:96:A:HIS:CA	1:96:A:HIS:C	3	11.17
(1,312)	1:65:A:GLN:N	1:65:A:GLN:CA	1:65:A:GLN:C	1:66:A:SER:N	5	11.15
(1,98)	1:115:A:PHE:N	1:115:A:PHE:CA	1:115:A:PHE:C	1:116:A:GLU:N	1	11.14
(1,104)	1:128:A:ALA:N	1:128:A:ALA:CA	1:128:A:ALA:C	1:129:A:SER:N	18	11.12
(1,362)	1:96:A:HIS:CA	1:96:A:HIS:CB	1:96:A:HIS:CG	1:96:A:HIS:ND1	2	11.09
(1,493)	1:153:A:ASP:N	1:153:A:ASP:CA	1:153:A:ASP:CB	1:153:A:ASP:CG	11	11.01
(1,386)	1:104:A:TRP:C	1:105:A:ASP:N	1:105:A:ASP:CA	1:105:A:ASP:C	15	11.01
(1,107)	1:129:A:SER:C	1:130:A:ARG:N	1:130:A:ARG:CA	1:130:A:ARG:C	17	10.97
(1,474)	1:141:A:ASP:N	1:141:A:ASP:CA	1:141:A:ASP:C	1:142:A:ARG:N	10	10.96
(1,66)	1:79:A:GLU:N	1:79:A:GLU:CA	1:79:A:GLU:C	1:80:A:HIS:N	19	10.96
(1,449)	1:132:A:LEU:N	1:132:A:LEU:CA	1:132:A:LEU:CB	1:132:A:LEU:CG	4	10.9
(1,452)	1:134:A:HIS:N	1:134:A:HIS:CA	1:134:A:HIS:CB	1:134:A:HIS:CG	5	10.89
(1,467)	1:139:A:PRO:C	1:140:A:GLU:N	1:140:A:GLU:CA	1:140:A:GLU:C	9	10.86
(1,97)	1:114:A:ASP:C	1:115:A:PHE:N	1:115:A:PHE:CA	1:115:A:PHE:C	7	10.85
(1,316)	1:67:A:GLU:N	1:67:A:GLU:CA	1:67:A:GLU:CB	1:67:A:GLU:CG	8	10.82
(1,146)	1:160:A:ALA:N	1:160:A:ALA:CA	1:160:A:ALA:C	1:161:A:PHE:N	14	10.81
(1,12)	1:27:A:SER:N	1:27:A:SER:CA	1:27:A:SER:C	1:28:A:VAL:N	14	10.81
(1,81)	1:87:A:THR:C	1:88:A:ALA:N	1:88:A:ALA:CA	1:88:A:ALA:C	18	10.79
(1,128)	1:147:A:VAL:N	1:147:A:VAL:CA	1:147:A:VAL:C	1:148:A:ILE:N	18	10.77
(1,235)	1:24:A:ASN:N	1:24:A:ASN:CA	1:24:A:ASN:C	1:25:A:CYS:N	13	10.76
(1,138)	1:152:A:TRP:N	1:152:A:TRP:CA	1:152:A:TRP:C	1:153:A:ASP:N	3	10.75
(1,240)	1:26:A:GLY:N	1:26:A:GLY:CA	1:26:A:GLY:C	1:27:A:SER:N	20	10.74
(1,312)	1:65:A:GLN:N	1:65:A:GLN:CA	1:65:A:GLN:C	1:66:A:SER:N	15	10.72
(1,435)	1:122:A:PRO:N	1:122:A:PRO:CA	1:122:A:PRO:C	1:123:A:HIS:N	17	10.67
(1,48)	1:68:A:ASN:N	1:68:A:ASN:CA	1:68:A:ASN:C	1:69:A:ARG:N	20	10.64

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,90)	1:96:A:HIS:N	1:96:A:HIS:CA	1:96:A:HIS:C	1:97:A:TYR:N	18	10.63
(1,236)	1:24:A:ASN:C	1:25:A:CYS:N	1:25:A:CYS:CA	1:25:A:CYS:C	4	10.6
(1,140)	1:153:A:ASP:N	1:153:A:ASP:CA	1:153:A:ASP:C	1:154:A:VAL:N	9	10.58
(1,438)	1:124:A:ASP:N	1:124:A:ASP:CA	1:124:A:ASP:CB	1:124:A:ASP:CG	19	10.57
(1,202)	1:14:A:CYS:N	1:14:A:CYS:CA	1:14:A:CYS:CB	1:14:A:CYS:SG	8	10.55
(1,75)	1:83:A:THR:C	1:84:A:TRP:N	1:84:A:TRP:CA	1:84:A:TRP:C	6	10.52
(1,316)	1:67:A:GLU:N	1:67:A:GLU:CA	1:67:A:GLU:CB	1:67:A:GLU:CG	19	10.49
(1,76)	1:84:A:TRP:N	1:84:A:TRP:CA	1:84:A:TRP:C	1:85:A:THR:N	7	10.49
(1,42)	1:62:A:LEU:N	1:62:A:LEU:CA	1:62:A:LEU:C	1:63:A:ASP:N	20	10.49
(1,61)	1:75:A:MET:C	1:76:A:THR:N	1:76:A:THR:CA	1:76:A:THR:C	19	10.45
(1,303)	1:63:A:ASP:N	1:63:A:ASP:CA	1:63:A:ASP:CB	1:63:A:ASP:CG	20	10.44
(1,54)	1:72:A:LYS:N	1:72:A:LYS:CA	1:72:A:LYS:C	1:73:A:HIS:N	14	10.43
(1,100)	1:121:A:VAL:N	1:121:A:VAL:CA	1:121:A:VAL:C	1:122:A:PRO:N	13	10.4
(1,440)	1:124:A:ASP:N	1:124:A:ASP:CA	1:124:A:ASP:C	1:125:A:GLY:N	15	10.39
(1,46)	1:67:A:GLU:N	1:67:A:GLU:CA	1:67:A:GLU:C	1:68:A:ASN:N	16	10.37
(1,47)	1:67:A:GLU:C	1:68:A:ASN:N	1:68:A:ASN:CA	1:68:A:ASN:C	17	10.32
(1,97)	1:114:A:ASP:C	1:115:A:PHE:N	1:115:A:PHE:CA	1:115:A:PHE:C	1	10.31
(1,180)	1:154:A:VAL:C	1:155:A:ALA:N	1:155:A:ALA:CA	1:155:A:ALA:C	15	10.28
(1,163)	1:168:A:ASP:C	1:169:A:LEU:N	1:169:A:LEU:CA	1:169:A:LEU:C	15	10.27
(1,212)	1:18:A:PHE:N	1:18:A:PHE:CA	1:18:A:PHE:CB	1:18:A:PHE:CG	20	10.2
(1,453)	1:134:A:HIS:CA	1:134:A:HIS:CB	1:134:A:HIS:CG	1:134:A:HIS:ND1	17	10.18
(1,177)	1:91:A:ASN:N	1:91:A:ASN:CA	1:91:A:ASN:C	1:92:A:THR:N	19	10.16
(1,97)	1:114:A:ASP:C	1:115:A:PHE:N	1:115:A:PHE:CA	1:115:A:PHE:C	18	10.16
(1,17)	1:32:A:PRO:C	1:33:A:GLN:N	1:33:A:GLN:CA	1:33:A:GLN:C	17	10.15
(1,14)	1:28:A:VAL:N	1:28:A:VAL:CA	1:28:A:VAL:C	1:29:A:MET:N	18	10.15
(1,386)	1:104:A:TRP:C	1:105:A:ASP:N	1:105:A:ASP:CA	1:105:A:ASP:C	6	10.08
(1,160)	1:167:A:VAL:N	1:167:A:VAL:CA	1:167:A:VAL:C	1:168:A:ASP:N	11	10.04
(1,76)	1:84:A:TRP:N	1:84:A:TRP:CA	1:84:A:TRP:C	1:85:A:THR:N	12	10.04
(1,524)	1:171:A:ASN:C	1:172:A:LYS:N	1:172:A:LYS:CA	1:172:A:LYS:C	3	10.03
(1,12)	1:27:A:SER:N	1:27:A:SER:CA	1:27:A:SER:C	1:28:A:VAL:N	19	10.03
(1,32)	1:54:A:ALA:N	1:54:A:ALA:CA	1:54:A:ALA:C	1:55:A:GLY:N	18	10.01
(1,212)	1:18:A:PHE:N	1:18:A:PHE:CA	1:18:A:PHE:CB	1:18:A:PHE:CG	12	10.0
(1,145)	1:159:A:ASN:C	1:160:A:ALA:N	1:160:A:ALA:CA	1:160:A:ALA:C	2	10.0
(1,125)	1:145:A:TYR:C	1:146:A:HIS:N	1:146:A:HIS:CA	1:146:A:HIS:C	2	9.99
(1,112)	1:132:A:LEU:N	1:132:A:LEU:CA	1:132:A:LEU:C	1:133:A:SER:N	16	9.99
(1,89)	1:95:A:TRP:C	1:96:A:HIS:N	1:96:A:HIS:CA	1:96:A:HIS:C	10	9.96
(1,90)	1:96:A:HIS:N	1:96:A:HIS:CA	1:96:A:HIS:C	1:97:A:TYR:N	17	9.94
(1,390)	1:106:A:PRO:C	1:107:A:ASP:N	1:107:A:ASP:CA	1:107:A:ASP:C	17	9.92
(1,129)	1:147:A:VAL:C	1:148:A:ILE:N	1:148:A:ILE:CA	1:148:A:ILE:C	2	9.92
(1,44)	1:63:A:ASP:N	1:63:A:ASP:CA	1:63:A:ASP:C	1:64:A:GLN:N	11	9.82
(1,413)	1:113:A:ALA:C	1:114:A:ASP:N	1:114:A:ASP:CA	1:114:A:ASP:C	12	9.8
(1,153)	1:163:A:GLN:C	1:164:A:VAL:N	1:164:A:VAL:CA	1:164:A:VAL:C	17	9.8
(1,126)	1:146:A:HIS:N	1:146:A:HIS:CA	2:173:A:CU1:CU	1:147:A:VAL:N	7	9.76
(1,212)	1:18:A:PHE:N	1:18:A:PHE:CA	1:18:A:PHE:CB	1:18:A:PHE:CG	17	9.72
(1,150)	1:162:A:TYR:N	1:162:A:TYR:CA	1:162:A:TYR:C	1:163:A:GLN:N	3	9.71
(1,212)	1:18:A:PHE:N	1:18:A:PHE:CA	1:18:A:PHE:CB	1:18:A:PHE:CG	15	9.7
(1,15)	1:28:A:VAL:C	1:29:A:MET:N	1:29:A:MET:CA	1:29:A:MET:C	16	9.7
(1,235)	1:24:A:ASN:N	1:24:A:ASN:CA	1:24:A:ASN:C	1:25:A:CYS:N	19	9.69
(1,429)	1:118:A:ILE:N	1:118:A:ILE:CA	1:118:A:ILE:C	1:119:A:GLY:N	11	9.68
(1,172)	1:39:A:LYS:N	1:39:A:LYS:CA	1:39:A:LYS:C	1:40:A:GLY:N	2	9.67
(1,437)	1:123:A:HIS:C	1:124:A:ASP:N	1:124:A:ASP:CA	1:124:A:ASP:C	14	9.66

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,43)	1:62:A:LEU:C	1:63:A:ASP:N	1:63:A:ASP:CA	1:63:A:ASP:C	6	9.66
(1,261)	1:36:A:GLU:N	1:36:A:GLU:CA	1:36:A:GLU:CB	1:36:A:GLU:CG	13	9.64
(1,203)	1:14:A:CYS:N	1:14:A:CYS:CA	1:14:A:CYS:C	1:15:A:SER:N	3	9.61
(1,188)	1:5:A:GLU:CA	1:5:A:GLU:CB	1:5:A:GLU:CG	1:5:A:GLU:CD	12	9.6
(1,122)	1:143:A:LEU:N	1:143:A:LEU:CA	1:143:A:LEU:C	1:144:A:GLY:N	16	9.56
(1,287)	1:50:A:GLN:N	1:50:A:GLN:CA	1:50:A:GLN:C	1:51:A:ILE:N	5	9.55
(1,474)	1:141:A:ASP:N	1:141:A:ASP:CA	1:141:A:ASP:C	1:142:A:ARG:N	19	9.54
(1,23)	1:46:A:PRO:C	1:47:A:ALA:N	1:47:A:ALA:CA	1:47:A:ALA:C	7	9.54
(1,321)	1:69:A:ARG:N	1:69:A:ARG:CA	1:69:A:ARG:CB	1:69:A:ARG:CG	19	9.5
(1,406)	1:111:A:LYS:N	1:111:A:LYS:CA	1:111:A:LYS:C	1:112:A:ARG:N	7	9.48
(1,261)	1:36:A:GLU:N	1:36:A:GLU:CA	1:36:A:GLU:CB	1:36:A:GLU:CG	6	9.47
(1,390)	1:106:A:PRO:C	1:107:A:ASP:N	1:107:A:ASP:CA	1:107:A:ASP:C	15	9.44
(1,44)	1:63:A:ASP:N	1:63:A:ASP:CA	1:63:A:ASP:C	1:64:A:GLN:N	15	9.44
(1,361)	1:96:A:HIS:N	1:96:A:HIS:CA	1:96:A:HIS:CB	1:96:A:HIS:CG	6	9.42
(1,125)	1:145:A:TYR:C	1:146:A:HIS:N	1:146:A:HIS:CA	1:146:A:HIS:C	8	9.42
(1,312)	1:65:A:GLN:N	1:65:A:GLN:CA	1:65:A:GLN:C	1:66:A:SER:N	13	9.4
(1,174)	1:49:A:GLY:N	1:49:A:GLY:CA	1:49:A:GLY:C	1:50:A:GLN:N	3	9.39
(1,252)	1:32:A:PRO:N	1:32:A:PRO:CA	1:32:A:PRO:C	1:33:A:GLN:N	12	9.36
(1,166)	1:170:A:VAL:N	1:170:A:VAL:CA	1:170:A:VAL:C	1:171:A:ASN:N	13	9.35
(1,261)	1:36:A:GLU:N	1:36:A:GLU:CA	1:36:A:GLU:CB	1:36:A:GLU:CG	8	9.28
(1,252)	1:32:A:PRO:N	1:32:A:PRO:CA	1:32:A:PRO:C	1:33:A:GLN:N	1	9.28
(1,119)	1:135:A:HIS:C	1:136:A:ILE:N	1:136:A:ILE:CA	1:136:A:ILE:C	3	9.27
(1,89)	1:95:A:TRP:C	1:96:A:HIS:N	1:96:A:HIS:CA	1:96:A:HIS:C	15	9.26
(1,67)	1:79:A:GLU:C	1:80:A:HIS:N	1:80:A:HIS:CA	2:173:A:CU1:CU	19	9.24
(1,66)	1:79:A:GLU:N	1:79:A:GLU:CA	1:79:A:GLU:C	1:80:A:HIS:N	18	9.24
(1,261)	1:36:A:GLU:N	1:36:A:GLU:CA	1:36:A:GLU:CB	1:36:A:GLU:CG	4	9.23
(1,118)	1:135:A:HIS:N	1:135:A:HIS:CA	1:135:A:HIS:C	1:136:A:ILE:N	15	9.13
(1,12)	1:27:A:SER:N	1:27:A:SER:CA	1:27:A:SER:C	1:28:A:VAL:N	1	9.11
(1,8)	1:13:A:LEU:N	1:13:A:LEU:CA	1:13:A:LEU:C	1:14:A:CYS:N	8	9.11
(1,294)	1:57:A:LEU:N	1:57:A:LEU:CA	1:57:A:LEU:CB	1:57:A:LEU:CG	7	9.1
(1,386)	1:104:A:TRP:C	1:105:A:ASP:N	1:105:A:ASP:CA	1:105:A:ASP:C	1	9.08
(1,238)	1:25:A:CYS:N	1:25:A:CYS:CA	1:25:A:CYS:C	1:26:A:GLY:N	14	9.05
(1,141)	1:155:A:ALA:C	1:156:A:ASP:N	1:156:A:ASP:CA	1:156:A:ASP:C	7	9.05
(1,502)	1:158:A:GLU:N	1:158:A:GLU:CA	1:158:A:GLU:C	1:159:A:ASN:N	11	9.04
(1,390)	1:106:A:PRO:C	1:107:A:ASP:N	1:107:A:ASP:CA	1:107:A:ASP:C	11	9.04
(1,21)	1:36:A:GLU:C	1:37:A:ALA:N	1:37:A:ALA:CA	1:37:A:ALA:C	5	9.02
(1,265)	1:38:A:LYS:N	1:38:A:LYS:CA	1:38:A:LYS:CB	1:38:A:LYS:CG	4	8.99
(1,108)	1:130:A:ARG:N	1:130:A:ARG:CA	1:130:A:ARG:C	1:131:A:ASN:N	15	8.98
(1,390)	1:106:A:PRO:C	1:107:A:ASP:N	1:107:A:ASP:CA	1:107:A:ASP:C	14	8.97
(1,81)	1:87:A:THR:C	1:88:A:ALA:N	1:88:A:ALA:CA	1:88:A:ALA:C	8	8.95
(1,471)	1:140:A:GLU:C	1:141:A:ASP:N	1:141:A:ASP:CA	1:141:A:ASP:C	7	8.94
(1,316)	1:67:A:GLU:N	1:67:A:GLU:CA	1:67:A:GLU:CB	1:67:A:GLU:CG	1	8.87
(1,260)	1:35:A:LEU:C	1:36:A:GLU:N	1:36:A:GLU:CA	1:36:A:GLU:C	2	8.87
(1,16)	1:29:A:MET:N	1:29:A:MET:CA	1:29:A:MET:C	1:30:A:TYR:N	6	8.87
(1,316)	1:67:A:GLU:N	1:67:A:GLU:CA	1:67:A:GLU:CB	1:67:A:GLU:CG	16	8.84
(1,115)	1:133:A:SER:C	1:134:A:HIS:N	1:134:A:HIS:CA	1:134:A:HIS:C	8	8.84
(1,89)	1:95:A:TRP:C	1:96:A:HIS:N	1:96:A:HIS:CA	1:96:A:HIS:C	5	8.84
(1,172)	1:39:A:LYS:N	1:39:A:LYS:CA	1:39:A:LYS:C	1:40:A:GLY:N	12	8.82
(1,21)	1:36:A:GLU:C	1:37:A:ALA:N	1:37:A:ALA:CA	1:37:A:ALA:C	13	8.79
(1,50)	1:70:A:TRP:N	1:70:A:TRP:CA	1:70:A:TRP:C	1:71:A:PHE:N	1	8.77
(1,275)	1:43:A:HIS:C	1:44:A:SER:N	1:44:A:SER:CA	1:44:A:SER:C	19	8.76

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,261)	1:36:A:GLU:N	1:36:A:GLU:CA	1:36:A:GLU:CB	1:36:A:GLU:CG	18	8.76
(1,9)	1:15:A:SER:C	1:16:A:GLU:N	1:16:A:GLU:CA	1:16:A:GLU:C	17	8.76
(1,1)	1:3:A:PHE:C	1:4:A:ILE:N	1:4:A:ILE:CA	1:4:A:ILE:C	17	8.76
(1,116)	1:134:A:HIS:N	1:134:A:HIS:CA	2:173:A:CU1:CU	1:135:A:HIS:N	8	8.72
(1,140)	1:153:A:ASP:N	1:153:A:ASP:CA	1:153:A:ASP:C	1:154:A:VAL:N	3	8.69
(1,43)	1:62:A:LEU:C	1:63:A:ASP:N	1:63:A:ASP:CA	1:63:A:ASP:C	17	8.69
(1,111)	1:131:A:ASN:C	1:132:A:LEU:N	1:132:A:LEU:CA	1:132:A:LEU:C	5	8.67
(1,113)	1:132:A:LEU:C	1:133:A:SER:N	1:133:A:SER:CA	1:133:A:SER:C	9	8.63
(1,449)	1:132:A:LEU:N	1:132:A:LEU:CA	1:132:A:LEU:CB	1:132:A:LEU:CG	20	8.62
(1,212)	1:18:A:PHE:N	1:18:A:PHE:CA	1:18:A:PHE:CB	1:18:A:PHE:CG	16	8.6
(1,117)	1:134:A:HIS:C	1:135:A:HIS:N	1:135:A:HIS:CA	1:135:A:HIS:C	17	8.59
(1,161)	1:167:A:VAL:C	1:168:A:ASP:N	1:168:A:ASP:CA	1:168:A:ASP:C	8	8.58
(1,124)	1:145:A:TYR:N	1:145:A:TYR:CA	1:145:A:TYR:C	1:146:A:HIS:N	4	8.52
(1,390)	1:106:A:PRO:C	1:107:A:ASP:N	1:107:A:ASP:CA	1:107:A:ASP:C	19	8.47
(1,47)	1:67:A:GLU:C	1:68:A:ASN:N	1:68:A:ASN:CA	1:68:A:ASN:C	3	8.46
(1,261)	1:36:A:GLU:N	1:36:A:GLU:CA	1:36:A:GLU:CB	1:36:A:GLU:CG	12	8.43
(1,109)	1:130:A:ARG:C	1:131:A:ASN:N	1:131:A:ASN:CA	1:131:A:ASN:C	8	8.43
(1,61)	1:75:A:MET:C	1:76:A:THR:N	1:76:A:THR:CA	1:76:A:THR:C	9	8.42
(1,8)	1:13:A:LEU:N	1:13:A:LEU:CA	1:13:A:LEU:C	1:14:A:CYS:N	6	8.41
(1,180)	1:154:A:VAL:C	1:155:A:ALA:N	1:155:A:ALA:CA	1:155:A:ALA:C	16	8.38
(1,151)	1:162:A:TYR:C	1:163:A:GLN:N	1:163:A:GLN:CA	1:163:A:GLN:C	13	8.38
(1,453)	1:134:A:HIS:CA	1:134:A:HIS:CB	1:134:A:HIS:CG	1:134:A:HIS:ND1	11	8.37
(1,263)	1:36:A:GLU:N	1:36:A:GLU:CA	1:36:A:GLU:C	1:37:A:ALA:N	17	8.37
(1,236)	1:24:A:ASN:C	1:25:A:CYS:N	1:25:A:CYS:CA	1:25:A:CYS:C	16	8.34
(1,153)	1:163:A:GLN:C	1:164:A:VAL:N	1:164:A:VAL:CA	1:164:A:VAL:C	16	8.32
(1,76)	1:84:A:TRP:N	1:84:A:TRP:CA	1:84:A:TRP:C	1:85:A:THR:N	9	8.3
(1,21)	1:36:A:GLU:C	1:37:A:ALA:N	1:37:A:ALA:CA	1:37:A:ALA:C	3	8.26
(1,21)	1:36:A:GLU:C	1:37:A:ALA:N	1:37:A:ALA:CA	1:37:A:ALA:C	6	8.25
(1,102)	1:123:A:HIS:N	1:123:A:HIS:CA	1:123:A:HIS:C	1:124:A:ASP:N	14	8.24
(1,76)	1:84:A:TRP:N	1:84:A:TRP:CA	1:84:A:TRP:C	1:85:A:THR:N	16	8.24
(1,43)	1:62:A:LEU:C	1:63:A:ASP:N	1:63:A:ASP:CA	1:63:A:ASP:C	8	8.22
(1,43)	1:62:A:LEU:C	1:63:A:ASP:N	1:63:A:ASP:CA	1:63:A:ASP:C	14	8.22
(1,118)	1:135:A:HIS:N	1:135:A:HIS:CA	1:135:A:HIS:C	1:136:A:ILE:N	19	8.21
(1,101)	1:122:A:PRO:C	1:123:A:HIS:N	1:123:A:HIS:CA	1:123:A:HIS:C	20	8.21
(1,66)	1:79:A:GLU:N	1:79:A:GLU:CA	1:79:A:GLU:C	1:80:A:HIS:N	7	8.21
(1,268)	1:39:A:LYS:N	1:39:A:LYS:CA	1:39:A:LYS:CB	1:39:A:LYS:CG	9	8.2
(1,203)	1:14:A:CYS:N	1:14:A:CYS:CA	1:14:A:CYS:C	1:15:A:SER:N	1	8.2
(1,390)	1:106:A:PRO:C	1:107:A:ASP:N	1:107:A:ASP:CA	1:107:A:ASP:C	6	8.19
(1,281)	1:47:A:ALA:C	1:48:A:ASP:N	1:48:A:ASP:CA	1:48:A:ASP:C	11	8.19
(1,299)	1:61:A:ILE:N	1:61:A:ILE:CA	1:61:A:ILE:CB	1:61:A:ILE:CG1	5	8.15
(1,252)	1:32:A:PRO:N	1:32:A:PRO:CA	1:32:A:PRO:C	1:33:A:GLN:N	19	8.14
(1,214)	1:18:A:PHE:N	1:18:A:PHE:CA	1:18:A:PHE:C	1:19:A:GLY:N	16	8.14
(1,440)	1:124:A:ASP:N	1:124:A:ASP:CA	1:124:A:ASP:C	1:125:A:GLY:N	16	8.1
(1,119)	1:135:A:HIS:C	1:136:A:ILE:N	1:136:A:ILE:CA	1:136:A:ILE:C	15	8.1
(1,16)	1:29:A:MET:N	1:29:A:MET:CA	1:29:A:MET:C	1:30:A:TYR:N	19	8.08
(1,66)	1:79:A:GLU:N	1:79:A:GLU:CA	1:79:A:GLU:C	1:80:A:HIS:N	10	8.06
(1,237)	1:25:A:CYS:N	1:25:A:CYS:CA	1:25:A:CYS:CB	1:25:A:CYS:SG	9	8.05
(1,406)	1:111:A:LYS:N	1:111:A:LYS:CA	1:111:A:LYS:C	1:112:A:ARG:N	11	8.04
(1,301)	1:62:A:LEU:N	1:62:A:LEU:CA	1:62:A:LEU:CB	1:62:A:LEU:CG	9	8.04
(1,147)	1:160:A:ALA:C	1:161:A:PHE:N	1:161:A:PHE:CA	1:161:A:PHE:C	3	8.01
(1,1)	1:3:A:PHE:C	1:4:A:ILE:N	1:4:A:ILE:CA	1:4:A:ILE:C	9	8.0

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,140)	1:153:A:ASP:N	1:153:A:ASP:CA	1:153:A:ASP:C	1:154:A:VAL:N	5	7.98
(1,128)	1:147:A:VAL:N	1:147:A:VAL:CA	1:147:A:VAL:C	1:148:A:ILE:N	16	7.98
(1,93)	1:97:A:TYR:C	1:98:A:TYR:N	1:98:A:TYR:CA	1:98:A:TYR:C	3	7.98
(1,264)	1:37:A:ALA:C	1:38:A:LYS:N	1:38:A:LYS:CA	1:38:A:LYS:C	12	7.96
(1,229)	1:23:A:LEU:N	1:23:A:LEU:CA	1:23:A:LEU:CB	1:23:A:LEU:CG	17	7.92
(1,21)	1:36:A:GLU:C	1:37:A:ALA:N	1:37:A:ALA:CA	1:37:A:ALA:C	4	7.92
(1,118)	1:135:A:HIS:N	1:135:A:HIS:CA	1:135:A:HIS:C	1:136:A:ILE:N	17	7.9
(1,312)	1:65:A:GLN:N	1:65:A:GLN:CA	1:65:A:GLN:C	1:66:A:SER:N	3	7.89
(1,128)	1:147:A:VAL:N	1:147:A:VAL:CA	1:147:A:VAL:C	1:148:A:ILE:N	13	7.87
(1,112)	1:132:A:LEU:N	1:132:A:LEU:CA	1:132:A:LEU:C	1:133:A:SER:N	2	7.86
(1,76)	1:84:A:TRP:N	1:84:A:TRP:CA	1:84:A:TRP:C	1:85:A:THR:N	3	7.85
(1,135)	1:150:A:ALA:C	1:151:A:VAL:N	1:151:A:VAL:CA	1:151:A:VAL:C	7	7.84
(1,12)	1:27:A:SER:N	1:27:A:SER:CA	1:27:A:SER:C	1:28:A:VAL:N	5	7.84
(1,67)	1:79:A:GLU:C	1:80:A:HIS:N	1:80:A:HIS:CA	2:173:A:CU1:CU	12	7.8
(1,54)	1:72:A:LYS:N	1:72:A:LYS:CA	1:72:A:LYS:C	1:73:A:HIS:N	4	7.8
(1,212)	1:18:A:PHE:N	1:18:A:PHE:CA	1:18:A:PHE:CB	1:18:A:PHE:CG	4	7.78
(1,8)	1:13:A:LEU:N	1:13:A:LEU:CA	1:13:A:LEU:C	1:14:A:CYS:N	19	7.78
(1,413)	1:113:A:ALA:C	1:114:A:ASP:N	1:114:A:ASP:CA	1:114:A:ASP:C	7	7.74
(1,74)	1:83:A:THR:N	1:83:A:THR:CA	1:83:A:THR:C	1:84:A:TRP:N	2	7.74
(1,482)	1:145:A:TYR:N	1:145:A:TYR:CA	1:145:A:TYR:CB	1:145:A:TYR:CG	18	7.73
(1,43)	1:62:A:LEU:C	1:63:A:ASP:N	1:63:A:ASP:CA	1:63:A:ASP:C	4	7.7
(1,471)	1:140:A:GLU:C	1:141:A:ASP:N	1:141:A:ASP:CA	1:141:A:ASP:C	2	7.69
(1,252)	1:32:A:PRO:N	1:32:A:PRO:CA	1:32:A:PRO:C	1:33:A:GLN:N	3	7.68
(1,66)	1:79:A:GLU:N	1:79:A:GLU:CA	1:79:A:GLU:C	1:80:A:HIS:N	4	7.68
(1,54)	1:72:A:LYS:N	1:72:A:LYS:CA	1:72:A:LYS:C	1:73:A:HIS:N	7	7.68
(1,502)	1:158:A:GLU:N	1:158:A:GLU:CA	1:158:A:GLU:C	1:159:A:ASN:N	18	7.65
(1,261)	1:36:A:GLU:N	1:36:A:GLU:CA	1:36:A:GLU:CB	1:36:A:GLU:CG	16	7.63
(1,151)	1:162:A:TYR:C	1:163:A:GLN:N	1:163:A:GLN:CA	1:163:A:GLN:C	18	7.62
(1,21)	1:36:A:GLU:C	1:37:A:ALA:N	1:37:A:ALA:CA	1:37:A:ALA:C	2	7.62
(1,493)	1:153:A:ASP:N	1:153:A:ASP:CA	1:153:A:ASP:CB	1:153:A:ASP:CG	4	7.61
(1,66)	1:79:A:GLU:N	1:79:A:GLU:CA	1:79:A:GLU:C	1:80:A:HIS:N	17	7.61
(1,46)	1:67:A:GLU:N	1:67:A:GLU:CA	1:67:A:GLU:C	1:68:A:ASN:N	10	7.61
(1,263)	1:36:A:GLU:N	1:36:A:GLU:CA	1:36:A:GLU:C	1:37:A:ALA:N	2	7.6
(1,46)	1:67:A:GLU:N	1:67:A:GLU:CA	1:67:A:GLU:C	1:68:A:ASN:N	3	7.6
(1,435)	1:122:A:PRO:N	1:122:A:PRO:CA	1:122:A:PRO:C	1:123:A:HIS:N	1	7.56
(1,140)	1:153:A:ASP:N	1:153:A:ASP:CA	1:153:A:ASP:C	1:154:A:VAL:N	14	7.56
(1,118)	1:135:A:HIS:N	1:135:A:HIS:CA	1:135:A:HIS:C	1:136:A:ILE:N	3	7.55
(1,150)	1:162:A:TYR:N	1:162:A:TYR:CA	1:162:A:TYR:C	1:163:A:GLN:N	7	7.53
(1,22)	1:37:A:ALA:N	1:37:A:ALA:CA	1:37:A:ALA:C	1:38:A:LYS:N	5	7.52
(1,172)	1:39:A:LYS:N	1:39:A:LYS:CA	1:39:A:LYS:C	1:40:A:GLY:N	8	7.5
(1,8)	1:13:A:LEU:N	1:13:A:LEU:CA	1:13:A:LEU:C	1:14:A:CYS:N	9	7.5
(1,149)	1:161:A:PHE:C	1:162:A:TYR:N	1:162:A:TYR:CA	1:162:A:TYR:C	1	7.48
(1,42)	1:62:A:LEU:N	1:62:A:LEU:CA	1:62:A:LEU:C	1:63:A:ASP:N	10	7.48
(1,118)	1:135:A:HIS:N	1:135:A:HIS:CA	1:135:A:HIS:C	1:136:A:ILE:N	4	7.45
(1,42)	1:62:A:LEU:N	1:62:A:LEU:CA	1:62:A:LEU:C	1:63:A:ASP:N	9	7.45
(1,17)	1:32:A:PRO:C	1:33:A:GLN:N	1:33:A:GLN:CA	1:33:A:GLN:C	19	7.45
(1,79)	1:85:A:THR:C	1:86:A:TYR:N	1:86:A:TYR:CA	1:86:A:TYR:C	7	7.44
(1,82)	1:88:A:ALA:N	1:88:A:ALA:CA	1:88:A:ALA:C	1:89:A:PRO:N	4	7.43
(1,337)	1:79:A:GLU:N	1:79:A:GLU:CA	1:79:A:GLU:CB	1:79:A:GLU:CG	16	7.42
(1,435)	1:122:A:PRO:N	1:122:A:PRO:CA	1:122:A:PRO:C	1:123:A:HIS:N	7	7.41
(1,440)	1:124:A:ASP:N	1:124:A:ASP:CA	1:124:A:ASP:C	1:125:A:GLY:N	19	7.4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,82)	1:88:A:ALA:N	1:88:A:ALA:CA	1:88:A:ALA:C	1:89:A:PRO:N	3	7.4
(1,82)	1:88:A:ALA:N	1:88:A:ALA:CA	1:88:A:ALA:C	1:89:A:PRO:N	6	7.4
(1,46)	1:67:A:GLU:N	1:67:A:GLU:CA	1:67:A:GLU:C	1:68:A:ASN:N	17	7.39
(1,46)	1:67:A:GLU:N	1:67:A:GLU:CA	1:67:A:GLU:C	1:68:A:ASN:N	15	7.38
(1,150)	1:162:A:TYR:N	1:162:A:TYR:CA	1:162:A:TYR:C	1:163:A:GLN:N	2	7.34
(1,10)	1:16:A:GLU:N	1:16:A:GLU:CA	1:16:A:GLU:C	1:17:A:ALA:N	1	7.34
(1,22)	1:37:A:ALA:N	1:37:A:ALA:CA	1:37:A:ALA:C	1:38:A:LYS:N	18	7.32
(1,82)	1:88:A:ALA:N	1:88:A:ALA:CA	1:88:A:ALA:C	1:89:A:PRO:N	18	7.31
(1,303)	1:63:A:ASP:N	1:63:A:ASP:CA	1:63:A:ASP:CB	1:63:A:ASP:CG	14	7.3
(1,125)	1:145:A:TYR:C	1:146:A:HIS:N	1:146:A:HIS:CA	1:146:A:HIS:C	18	7.27
(1,316)	1:67:A:GLU:N	1:67:A:GLU:CA	1:67:A:GLU:CB	1:67:A:GLU:CG	12	7.24
(1,493)	1:153:A:ASP:N	1:153:A:ASP:CA	1:153:A:ASP:CB	1:153:A:ASP:CG	2	7.22
(1,168)	1:171:A:ASN:N	1:171:A:ASN:CA	1:171:A:ASN:C	1:172:A:LYS:N	1	7.21
(1,120)	1:136:A:ILE:N	1:136:A:ILE:CA	1:136:A:ILE:C	1:137:A:TYR:N	11	7.21
(1,32)	1:54:A:ALA:N	1:54:A:ALA:CA	1:54:A:ALA:C	1:55:A:GLY:N	4	7.2
(1,113)	1:132:A:LEU:C	1:133:A:SER:N	1:133:A:SER:CA	1:133:A:SER:C	17	7.19
(1,438)	1:124:A:ASP:N	1:124:A:ASP:CA	1:124:A:ASP:CB	1:124:A:ASP:CG	16	7.13
(1,263)	1:36:A:GLU:N	1:36:A:GLU:CA	1:36:A:GLU:C	1:37:A:ALA:N	8	7.12
(1,117)	1:134:A:HIS:C	1:135:A:HIS:N	1:135:A:HIS:CA	1:135:A:HIS:C	8	7.12
(1,22)	1:37:A:ALA:N	1:37:A:ALA:CA	1:37:A:ALA:C	1:38:A:LYS:N	9	7.11
(1,467)	1:139:A:PRO:C	1:140:A:GLU:N	1:140:A:GLU:CA	1:140:A:GLU:C	5	7.1
(1,462)	1:137:A:TYR:C	1:138:A:ILE:N	1:138:A:ILE:CA	1:138:A:ILE:C	7	7.1
(1,261)	1:36:A:GLU:N	1:36:A:GLU:CA	1:36:A:GLU:CB	1:36:A:GLU:CG	2	7.1
(1,80)	1:86:A:TYR:N	1:86:A:TYR:CA	1:86:A:TYR:C	1:87:A:THR:N	16	7.1
(1,236)	1:24:A:ASN:C	1:25:A:CYS:N	1:25:A:CYS:CA	1:25:A:CYS:C	7	7.06
(1,164)	1:169:A:LEU:N	1:169:A:LEU:CA	1:169:A:LEU:C	1:170:A:VAL:N	19	7.01
(1,261)	1:36:A:GLU:N	1:36:A:GLU:CA	1:36:A:GLU:CB	1:36:A:GLU:CG	10	6.98
(1,117)	1:134:A:HIS:C	1:135:A:HIS:N	1:135:A:HIS:CA	1:135:A:HIS:C	1	6.97
(1,507)	1:161:A:PHE:N	1:161:A:PHE:CA	1:161:A:PHE:CB	1:161:A:PHE:CG	3	6.96
(1,139)	1:152:A:TRP:C	1:153:A:ASP:N	1:153:A:ASP:CA	1:153:A:ASP:C	16	6.96
(1,303)	1:63:A:ASP:N	1:63:A:ASP:CA	1:63:A:ASP:CB	1:63:A:ASP:CG	11	6.94
(1,212)	1:18:A:PHE:N	1:18:A:PHE:CA	1:18:A:PHE:CB	1:18:A:PHE:CG	18	6.93
(1,14)	1:28:A:VAL:N	1:28:A:VAL:CA	1:28:A:VAL:C	1:29:A:MET:N	3	6.91
(1,89)	1:95:A:TRP:C	1:96:A:HIS:N	1:96:A:HIS:CA	1:96:A:HIS:C	17	6.9
(1,391)	1:107:A:ASP:N	1:107:A:ASP:CA	1:107:A:ASP:CB	1:107:A:ASP:CG	20	6.87
(1,316)	1:67:A:GLU:N	1:67:A:GLU:CA	1:67:A:GLU:CB	1:67:A:GLU:CG	20	6.87
(1,260)	1:35:A:LEU:C	1:36:A:GLU:N	1:36:A:GLU:CA	1:36:A:GLU:C	7	6.83
(1,9)	1:15:A:SER:C	1:16:A:GLU:N	1:16:A:GLU:CA	1:16:A:GLU:C	18	6.82
(1,189)	1:5:A:GLU:N	1:5:A:GLU:CA	1:5:A:GLU:C	1:6:A:LYS:N	9	6.81
(1,44)	1:63:A:ASP:N	1:63:A:ASP:CA	1:63:A:ASP:C	1:64:A:GLN:N	8	6.8
(1,361)	1:96:A:HIS:N	1:96:A:HIS:CA	1:96:A:HIS:CB	1:96:A:HIS:CG	5	6.76
(1,429)	1:118:A:ILE:N	1:118:A:ILE:CA	1:118:A:ILE:C	1:119:A:GLY:N	14	6.71
(1,61)	1:75:A:MET:C	1:76:A:THR:N	1:76:A:THR:CA	1:76:A:THR:C	13	6.69
(1,148)	1:161:A:PHE:N	1:161:A:PHE:CA	1:161:A:PHE:C	1:162:A:TYR:N	11	6.67
(1,120)	1:136:A:ILE:N	1:136:A:ILE:CA	1:136:A:ILE:C	1:137:A:TYR:N	13	6.67
(1,456)	1:136:A:ILE:N	1:136:A:ILE:CA	1:136:A:ILE:CB	1:136:A:ILE:CG1	11	6.66
(1,116)	1:134:A:HIS:N	1:134:A:HIS:CA	2:173:A:CU1:CU	1:135:A:HIS:N	15	6.66
(1,474)	1:141:A:ASP:N	1:141:A:ASP:CA	1:141:A:ASP:C	1:142:A:ARG:N	3	6.64
(1,227)	1:22:A:ASN:N	1:22:A:ASN:CA	1:22:A:ASN:C	1:23:A:LEU:N	20	6.63
(1,13)	1:27:A:SER:C	1:28:A:VAL:N	1:28:A:VAL:CA	1:28:A:VAL:C	20	6.61
(1,440)	1:124:A:ASP:N	1:124:A:ASP:CA	1:124:A:ASP:C	1:125:A:GLY:N	14	6.6

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,153)	1:163:A:GLN:C	1:164:A:VAL:N	1:164:A:VAL:CA	1:164:A:VAL:C	15	6.6
(1,410)	1:112:A:ARG:N	1:112:A:ARG:CA	1:112:A:ARG:C	1:113:A:ALA:N	4	6.59
(1,75)	1:83:A:THR:C	1:84:A:TRP:N	1:84:A:TRP:CA	1:84:A:TRP:C	8	6.59
(1,110)	1:131:A:ASN:N	1:131:A:ASN:CA	1:131:A:ASN:C	1:132:A:LEU:N	15	6.57
(1,53)	1:71:A:PHE:C	1:72:A:LYS:N	1:72:A:LYS:CA	1:72:A:LYS:C	11	6.56
(1,386)	1:104:A:TRP:C	1:105:A:ASP:N	1:105:A:ASP:CA	1:105:A:ASP:C	20	6.55
(1,302)	1:62:A:LEU:CA	1:62:A:LEU:CB	1:62:A:LEU:CG	1:62:A:LEU:CD2	11	6.53
(1,283)	1:48:A:ASP:N	1:48:A:ASP:CA	1:48:A:ASP:C	1:49:A:GLY:N	7	6.53
(1,47)	1:67:A:GLU:C	1:68:A:ASN:N	1:68:A:ASN:CA	1:68:A:ASN:C	15	6.53
(1,390)	1:106:A:PRO:C	1:107:A:ASP:N	1:107:A:ASP:CA	1:107:A:ASP:C	18	6.51
(1,135)	1:150:A:ALA:C	1:151:A:VAL:N	1:151:A:VAL:CA	1:151:A:VAL:C	15	6.4
(1,132)	1:149:A:LEU:N	1:149:A:LEU:CA	1:149:A:LEU:C	1:150:A:ALA:N	3	6.39
(1,361)	1:96:A:HIS:N	1:96:A:HIS:CA	1:96:A:HIS:CB	1:96:A:HIS:CG	20	6.37
(1,474)	1:141:A:ASP:N	1:141:A:ASP:CA	1:141:A:ASP:C	1:142:A:ARG:N	9	6.34
(1,212)	1:18:A:PHE:N	1:18:A:PHE:CA	1:18:A:PHE:CB	1:18:A:PHE:CG	3	6.34
(1,123)	1:144:A:GLY:C	1:145:A:TYR:N	1:145:A:TYR:CA	1:145:A:TYR:C	3	6.32
(1,61)	1:75:A:MET:C	1:76:A:THR:N	1:76:A:THR:CA	1:76:A:THR:C	2	6.29
(1,174)	1:49:A:GLY:N	1:49:A:GLY:CA	1:49:A:GLY:C	1:50:A:GLN:N	12	6.27
(1,236)	1:24:A:ASN:C	1:25:A:CYS:N	1:25:A:CYS:CA	1:25:A:CYS:C	14	6.26
(1,98)	1:115:A:PHE:N	1:115:A:PHE:CA	1:115:A:PHE:C	1:116:A:GLU:N	19	6.26
(1,48)	1:68:A:ASN:N	1:68:A:ASN:CA	1:68:A:ASN:C	1:69:A:ARG:N	18	6.26
(1,391)	1:107:A:ASP:N	1:107:A:ASP:CA	1:107:A:ASP:CB	1:107:A:ASP:CG	18	6.25
(1,62)	1:76:A:THR:N	1:76:A:THR:CA	1:76:A:THR:C	1:77:A:GLY:N	6	6.25
(1,500)	1:158:A:GLU:N	1:158:A:GLU:CA	1:158:A:GLU:CB	1:158:A:GLU:CG	12	6.24
(1,312)	1:65:A:GLN:N	1:65:A:GLN:CA	1:65:A:GLN:C	1:66:A:SER:N	10	6.22
(1,44)	1:63:A:ASP:N	1:63:A:ASP:CA	1:63:A:ASP:C	1:64:A:GLN:N	4	6.2
(1,174)	1:49:A:GLY:N	1:49:A:GLY:CA	1:49:A:GLY:C	1:50:A:GLN:N	8	6.19
(1,229)	1:23:A:LEU:N	1:23:A:LEU:CA	1:23:A:LEU:CB	1:23:A:LEU:CG	12	6.18
(1,66)	1:79:A:GLU:N	1:79:A:GLU:CA	1:79:A:GLU:C	1:80:A:HIS:N	15	6.18
(1,438)	1:124:A:ASP:N	1:124:A:ASP:CA	1:124:A:ASP:CB	1:124:A:ASP:CG	14	6.17
(1,399)	1:109:A:PRO:C	1:110:A:LEU:N	1:110:A:LEU:CA	1:110:A:LEU:C	19	6.16
(1,89)	1:95:A:TRP:C	1:96:A:HIS:N	1:96:A:HIS:CA	1:96:A:HIS:C	9	6.16
(1,42)	1:62:A:LEU:N	1:62:A:LEU:CA	1:62:A:LEU:C	1:63:A:ASP:N	3	6.15
(1,21)	1:36:A:GLU:C	1:37:A:ALA:N	1:37:A:ALA:CA	1:37:A:ALA:C	18	6.15
(1,43)	1:62:A:LEU:C	1:63:A:ASP:N	1:63:A:ASP:CA	1:63:A:ASP:C	12	6.14
(1,77)	1:84:A:TRP:C	1:85:A:THR:N	1:85:A:THR:CA	1:85:A:THR:C	10	6.13
(1,66)	1:79:A:GLU:N	1:79:A:GLU:CA	1:79:A:GLU:C	1:80:A:HIS:N	20	6.1
(1,127)	1:146:A:HIS:C	1:147:A:VAL:N	1:147:A:VAL:CA	1:147:A:VAL:C	16	5.99
(1,153)	1:163:A:GLN:C	1:164:A:VAL:N	1:164:A:VAL:CA	1:164:A:VAL:C	20	5.96
(1,238)	1:25:A:CYS:N	1:25:A:CYS:CA	1:25:A:CYS:C	1:26:A:GLY:N	17	5.95
(1,189)	1:5:A:GLU:N	1:5:A:GLU:CA	1:5:A:GLU:C	1:6:A:LYS:N	4	5.92
(1,493)	1:153:A:ASP:N	1:153:A:ASP:CA	1:153:A:ASP:CB	1:153:A:ASP:CG	6	5.91
(1,21)	1:36:A:GLU:C	1:37:A:ALA:N	1:37:A:ALA:CA	1:37:A:ALA:C	16	5.91
(1,316)	1:67:A:GLU:N	1:67:A:GLU:CA	1:67:A:GLU:CB	1:67:A:GLU:CG	14	5.89
(1,91)	1:96:A:HIS:C	1:97:A:TYR:N	1:97:A:TYR:CA	1:97:A:TYR:C	16	5.88
(1,81)	1:87:A:THR:C	1:88:A:ALA:N	1:88:A:ALA:CA	1:88:A:ALA:C	4	5.87
(1,106)	1:129:A:SER:N	1:129:A:SER:CA	1:129:A:SER:C	1:130:A:ARG:N	3	5.86
(1,303)	1:63:A:ASP:N	1:63:A:ASP:CA	1:63:A:ASP:CB	1:63:A:ASP:CG	13	5.83
(1,435)	1:122:A:PRO:N	1:122:A:PRO:CA	1:122:A:PRO:C	1:123:A:HIS:N	10	5.77
(1,120)	1:136:A:ILE:N	1:136:A:ILE:CA	1:136:A:ILE:C	1:137:A:TYR:N	10	5.77
(1,453)	1:134:A:HIS:CA	1:134:A:HIS:CB	1:134:A:HIS:CG	1:134:A:HIS:ND1	6	5.76

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,406)	1:111:A:LYS:N	1:111:A:LYS:CA	1:111:A:LYS:C	1:112:A:ARG:N	18	5.75
(1,312)	1:65:A:GLN:N	1:65:A:GLN:CA	1:65:A:GLN:C	1:66:A:SER:N	9	5.75
(1,474)	1:141:A:ASP:N	1:141:A:ASP:CA	1:141:A:ASP:C	1:142:A:ARG:N	1	5.74
(1,38)	1:60:A:GLY:N	1:60:A:GLY:CA	1:60:A:GLY:C	1:61:A:ILE:N	9	5.74
(1,260)	1:35:A:LEU:C	1:36:A:GLU:N	1:36:A:GLU:CA	1:36:A:GLU:C	12	5.73
(1,61)	1:75:A:MET:C	1:76:A:THR:N	1:76:A:THR:CA	1:76:A:THR:C	6	5.72
(1,12)	1:27:A:SER:N	1:27:A:SER:CA	1:27:A:SER:C	1:28:A:VAL:N	9	5.72
(1,37)	1:59:A:GLY:C	1:60:A:GLY:N	1:60:A:GLY:CA	1:60:A:GLY:C	6	5.7
(1,125)	1:145:A:TYR:C	1:146:A:HIS:N	1:146:A:HIS:CA	1:146:A:HIS:C	9	5.69
(1,101)	1:122:A:PRO:C	1:123:A:HIS:N	1:123:A:HIS:CA	1:123:A:HIS:C	4	5.69
(1,406)	1:111:A:LYS:N	1:111:A:LYS:CA	1:111:A:LYS:C	1:112:A:ARG:N	20	5.66
(1,438)	1:124:A:ASP:N	1:124:A:ASP:CA	1:124:A:ASP:CB	1:124:A:ASP:CG	11	5.64
(1,23)	1:46:A:PRO:C	1:47:A:ALA:N	1:47:A:ALA:CA	1:47:A:ALA:C	11	5.64
(1,90)	1:96:A:HIS:N	1:96:A:HIS:CA	1:96:A:HIS:C	1:97:A:TYR:N	2	5.63
(1,60)	1:75:A:MET:N	1:75:A:MET:CA	1:75:A:MET:C	1:76:A:THR:N	4	5.63
(1,172)	1:39:A:LYS:N	1:39:A:LYS:CA	1:39:A:LYS:C	1:40:A:GLY:N	17	5.62
(1,82)	1:88:A:ALA:N	1:88:A:ALA:CA	1:88:A:ALA:C	1:89:A:PRO:N	8	5.61
(1,132)	1:149:A:LEU:N	1:149:A:LEU:CA	1:149:A:LEU:C	1:150:A:ALA:N	18	5.59
(1,102)	1:123:A:HIS:N	1:123:A:HIS:CA	1:123:A:HIS:C	1:124:A:ASP:N	12	5.59
(1,438)	1:124:A:ASP:N	1:124:A:ASP:CA	1:124:A:ASP:CB	1:124:A:ASP:CG	18	5.58
(1,150)	1:162:A:TYR:N	1:162:A:TYR:CA	1:162:A:TYR:C	1:163:A:GLN:N	11	5.58
(1,102)	1:123:A:HIS:N	1:123:A:HIS:CA	1:123:A:HIS:C	1:124:A:ASP:N	15	5.58
(1,321)	1:69:A:ARG:N	1:69:A:ARG:CA	1:69:A:ARG:CB	1:69:A:ARG:CG	2	5.57
(1,189)	1:5:A:GLU:N	1:5:A:GLU:CA	1:5:A:GLU:C	1:6:A:LYS:N	17	5.56
(1,135)	1:150:A:ALA:C	1:151:A:VAL:N	1:151:A:VAL:CA	1:151:A:VAL:C	5	5.56
(1,261)	1:36:A:GLU:N	1:36:A:GLU:CA	1:36:A:GLU:CB	1:36:A:GLU:CG	11	5.55
(1,117)	1:134:A:HIS:C	1:135:A:HIS:N	1:135:A:HIS:CA	1:135:A:HIS:C	20	5.53
(1,146)	1:160:A:ALA:N	1:160:A:ALA:CA	1:160:A:ALA:C	1:161:A:PHE:N	18	5.52
(1,252)	1:32:A:PRO:N	1:32:A:PRO:CA	1:32:A:PRO:C	1:33:A:GLN:N	17	5.51
(1,24)	1:47:A:ALA:N	1:47:A:ALA:CA	1:47:A:ALA:C	1:48:A:ASP:N	18	5.5
(1,154)	1:164:A:VAL:N	1:164:A:VAL:CA	1:164:A:VAL:C	1:165:A:ILE:N	5	5.49
(1,118)	1:135:A:HIS:N	1:135:A:HIS:CA	1:135:A:HIS:C	1:136:A:ILE:N	10	5.49
(1,189)	1:5:A:GLU:N	1:5:A:GLU:CA	1:5:A:GLU:C	1:6:A:LYS:N	19	5.48
(1,391)	1:107:A:ASP:N	1:107:A:ASP:CA	1:107:A:ASP:CB	1:107:A:ASP:CG	12	5.44
(1,146)	1:160:A:ALA:N	1:160:A:ALA:CA	1:160:A:ALA:C	1:161:A:PHE:N	10	5.44
(1,126)	1:146:A:HIS:N	1:146:A:HIS:CA	2:173:A:CU1:CU	1:147:A:VAL:N	12	5.44
(1,507)	1:161:A:PHE:N	1:161:A:PHE:CA	1:161:A:PHE:CB	1:161:A:PHE:CG	13	5.42
(1,34)	1:58:A:PHE:N	1:58:A:PHE:CA	1:58:A:PHE:C	1:59:A:GLY:N	20	5.42
(1,275)	1:43:A:HIS:C	1:44:A:SER:N	1:44:A:SER:CA	1:44:A:SER:C	1	5.4
(1,163)	1:168:A:ASP:C	1:169:A:LEU:N	1:169:A:LEU:CA	1:169:A:LEU:C	12	5.4
(1,160)	1:167:A:VAL:N	1:167:A:VAL:CA	1:167:A:VAL:C	1:168:A:ASP:N	15	5.37
(1,163)	1:168:A:ASP:C	1:169:A:LEU:N	1:169:A:LEU:CA	1:169:A:LEU:C	2	5.36
(1,467)	1:139:A:PRO:C	1:140:A:GLU:N	1:140:A:GLU:CA	1:140:A:GLU:C	3	5.35
(1,312)	1:65:A:GLN:N	1:65:A:GLN:CA	1:65:A:GLN:C	1:66:A:SER:N	14	5.3
(1,203)	1:14:A:CYS:N	1:14:A:CYS:CA	1:14:A:CYS:C	1:15:A:SER:N	5	5.29
(1,189)	1:5:A:GLU:N	1:5:A:GLU:CA	1:5:A:GLU:C	1:6:A:LYS:N	7	5.28
(1,312)	1:65:A:GLN:N	1:65:A:GLN:CA	1:65:A:GLN:C	1:66:A:SER:N	17	5.27
(1,407)	1:111:A:LYS:C	1:112:A:ARG:N	1:112:A:ARG:CA	1:112:A:ARG:C	13	5.26
(1,303)	1:63:A:ASP:N	1:63:A:ASP:CA	1:63:A:ASP:CB	1:63:A:ASP:CG	5	5.26
(1,79)	1:85:A:THR:C	1:86:A:TYR:N	1:86:A:TYR:CA	1:86:A:TYR:C	8	5.26
(1,54)	1:72:A:LYS:N	1:72:A:LYS:CA	1:72:A:LYS:C	1:73:A:HIS:N	2	5.26

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,391)	1:107:A:ASP:N	1:107:A:ASP:CA	1:107:A:ASP:CB	1:107:A:ASP:CG	7	5.24
(1,453)	1:134:A:HIS:CA	1:134:A:HIS:CB	1:134:A:HIS:CG	1:134:A:HIS:ND1	12	5.21
(1,328)	1:72:A:LYS:N	1:72:A:LYS:CA	1:72:A:LYS:CB	1:72:A:LYS:CG	16	5.21
(1,106)	1:129:A:SER:N	1:129:A:SER:CA	1:129:A:SER:C	1:130:A:ARG:N	15	5.19
(1,316)	1:67:A:GLU:N	1:67:A:GLU:CA	1:67:A:GLU:CB	1:67:A:GLU:CG	4	5.17
(1,283)	1:48:A:ASP:N	1:48:A:ASP:CA	1:48:A:ASP:C	1:49:A:GLY:N	14	5.17
(1,172)	1:39:A:LYS:N	1:39:A:LYS:CA	1:39:A:LYS:C	1:40:A:GLY:N	3	5.15
(1,123)	1:144:A:GLY:C	1:145:A:TYR:N	1:145:A:TYR:CA	1:145:A:TYR:C	17	5.14
(1,252)	1:32:A:PRO:N	1:32:A:PRO:CA	1:32:A:PRO:C	1:33:A:GLN:N	20	5.13
(1,34)	1:58:A:PHE:N	1:58:A:PHE:CA	1:58:A:PHE:C	1:59:A:GLY:N	18	5.13
(1,23)	1:46:A:PRO:C	1:47:A:ALA:N	1:47:A:ALA:CA	1:47:A:ALA:C	9	5.13
(1,163)	1:168:A:ASP:C	1:169:A:LEU:N	1:169:A:LEU:CA	1:169:A:LEU:C	3	5.12
(1,12)	1:27:A:SER:N	1:27:A:SER:CA	1:27:A:SER:C	1:28:A:VAL:N	8	5.11
(1,377)	1:102:A:LYS:N	1:102:A:LYS:CA	1:102:A:LYS:CB	1:102:A:LYS:CG	10	5.06
(1,406)	1:111:A:LYS:N	1:111:A:LYS:CA	1:111:A:LYS:C	1:112:A:ARG:N	4	5.05
(1,162)	1:168:A:ASP:N	1:168:A:ASP:CA	1:168:A:ASP:C	1:169:A:LEU:N	9	5.04
(1,252)	1:32:A:PRO:N	1:32:A:PRO:CA	1:32:A:PRO:C	1:33:A:GLN:N	13	5.01
(1,139)	1:152:A:TRP:C	1:153:A:ASP:N	1:153:A:ASP:CA	1:153:A:ASP:C	8	5.0
(1,75)	1:83:A:THR:C	1:84:A:TRP:N	1:84:A:TRP:CA	1:84:A:TRP:C	3	4.99
(1,188)	1:5:A:GLU:CA	1:5:A:GLU:CB	1:5:A:GLU:CG	1:5:A:GLU:CD	3	4.97
(1,96)	1:99:A:ILE:N	1:99:A:ILE:CA	1:99:A:ILE:C	1:100:A:THR:N	9	4.97
(1,452)	1:134:A:HIS:N	1:134:A:HIS:CA	1:134:A:HIS:CB	1:134:A:HIS:CG	9	4.95
(1,452)	1:134:A:HIS:N	1:134:A:HIS:CA	1:134:A:HIS:CB	1:134:A:HIS:CG	4	4.94
(1,81)	1:87:A:THR:C	1:88:A:ALA:N	1:88:A:ALA:CA	1:88:A:ALA:C	2	4.94
(1,126)	1:146:A:HIS:N	1:146:A:HIS:CA	2:173:A:CU1:CU	1:147:A:VAL:N	14	4.93
(1,361)	1:96:A:HIS:N	1:96:A:HIS:CA	1:96:A:HIS:CB	1:96:A:HIS:CG	2	4.92
(1,361)	1:96:A:HIS:N	1:96:A:HIS:CA	1:96:A:HIS:CB	1:96:A:HIS:CG	9	4.88
(1,321)	1:69:A:ARG:N	1:69:A:ARG:CA	1:69:A:ARG:CB	1:69:A:ARG:CG	17	4.87
(1,23)	1:46:A:PRO:C	1:47:A:ALA:N	1:47:A:ALA:CA	1:47:A:ALA:C	6	4.87
(1,123)	1:144:A:GLY:C	1:145:A:TYR:N	1:145:A:TYR:CA	1:145:A:TYR:C	9	4.85
(1,135)	1:150:A:ALA:C	1:151:A:VAL:N	1:151:A:VAL:CA	1:151:A:VAL:C	19	4.84
(1,100)	1:121:A:VAL:N	1:121:A:VAL:CA	1:121:A:VAL:C	1:122:A:PRO:N	12	4.84
(1,76)	1:84:A:TRP:N	1:84:A:TRP:CA	1:84:A:TRP:C	1:85:A:THR:N	18	4.84
(1,300)	1:61:A:ILE:CA	1:61:A:ILE:CB	1:61:A:ILE:CG1	1:61:A:ILE:CD1	11	4.82
(1,52)	1:71:A:PHE:N	1:71:A:PHE:CA	1:71:A:PHE:C	1:72:A:LYS:N	14	4.8
(1,134)	1:150:A:ALA:N	1:150:A:ALA:CA	1:150:A:ALA:C	1:151:A:VAL:N	20	4.77
(1,132)	1:149:A:LEU:N	1:149:A:LEU:CA	1:149:A:LEU:C	1:150:A:ALA:N	8	4.77
(1,524)	1:171:A:ASN:C	1:172:A:LYS:N	1:172:A:LYS:CA	1:172:A:LYS:C	2	4.76
(1,202)	1:14:A:CYS:N	1:14:A:CYS:CA	1:14:A:CYS:CB	1:14:A:CYS:SG	13	4.75
(1,180)	1:154:A:VAL:C	1:155:A:ALA:N	1:155:A:ALA:CA	1:155:A:ALA:C	4	4.75
(1,150)	1:162:A:TYR:N	1:162:A:TYR:CA	1:162:A:TYR:C	1:163:A:GLN:N	18	4.75
(1,283)	1:48:A:ASP:N	1:48:A:ASP:CA	1:48:A:ASP:C	1:49:A:GLY:N	2	4.74
(1,415)	1:114:A:ASP:N	1:114:A:ASP:CA	1:114:A:ASP:C	1:115:A:PHE:N	14	4.73
(1,90)	1:96:A:HIS:N	1:96:A:HIS:CA	1:96:A:HIS:C	1:97:A:TYR:N	3	4.72
(1,335)	1:76:A:THR:N	1:76:A:THR:CA	1:76:A:THR:CB	1:76:A:THR:OG1	16	4.7
(1,385)	1:104:A:TRP:N	1:104:A:TRP:CA	1:104:A:TRP:C	1:105:A:ASP:N	20	4.69
(1,390)	1:106:A:PRO:C	1:107:A:ASP:N	1:107:A:ASP:CA	1:107:A:ASP:C	4	4.67
(1,260)	1:35:A:LEU:C	1:36:A:GLU:N	1:36:A:GLU:CA	1:36:A:GLU:C	11	4.67
(1,212)	1:18:A:PHE:N	1:18:A:PHE:CA	1:18:A:PHE:CB	1:18:A:PHE:CG	8	4.66
(1,171)	1:38:A:LYS:C	1:39:A:LYS:N	1:39:A:LYS:CA	1:39:A:LYS:C	10	4.66
(1,145)	1:159:A:ASN:C	1:160:A:ALA:N	1:160:A:ALA:CA	1:160:A:ALA:C	7	4.66

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,493)	1:153:A:ASP:N	1:153:A:ASP:CA	1:153:A:ASP:CB	1:153:A:ASP:CG	12	4.65
(1,337)	1:79:A:GLU:N	1:79:A:GLU:CA	1:79:A:GLU:CB	1:79:A:GLU:CG	17	4.64
(1,167)	1:170:A:VAL:C	1:171:A:ASN:N	1:171:A:ASN:CA	1:171:A:ASN:C	6	4.64
(1,153)	1:163:A:GLN:C	1:164:A:VAL:N	1:164:A:VAL:CA	1:164:A:VAL:C	9	4.64
(1,32)	1:54:A:ALA:N	1:54:A:ALA:CA	1:54:A:ALA:C	1:55:A:GLY:N	14	4.64
(1,291)	1:54:A:ALA:C	1:55:A:GLY:N	1:55:A:GLY:CA	1:55:A:GLY:C	10	4.63
(1,123)	1:144:A:GLY:C	1:145:A:TYR:N	1:145:A:TYR:CA	1:145:A:TYR:C	20	4.61
(1,312)	1:65:A:GLN:N	1:65:A:GLN:CA	1:65:A:GLN:C	1:66:A:SER:N	4	4.6
(1,265)	1:38:A:LYS:N	1:38:A:LYS:CA	1:38:A:LYS:CB	1:38:A:LYS:CG	9	4.6
(1,172)	1:39:A:LYS:N	1:39:A:LYS:CA	1:39:A:LYS:C	1:40:A:GLY:N	6	4.58
(1,107)	1:129:A:SER:C	1:130:A:ARG:N	1:130:A:ARG:CA	1:130:A:ARG:C	19	4.57
(1,80)	1:86:A:TYR:N	1:86:A:TYR:CA	1:86:A:TYR:C	1:87:A:THR:N	2	4.57
(1,176)	1:56:A:GLY:N	1:56:A:GLY:CA	1:56:A:GLY:C	1:57:A:LEU:N	13	4.56
(1,109)	1:130:A:ARG:C	1:131:A:ASN:N	1:131:A:ASN:CA	1:131:A:ASN:C	4	4.56
(1,361)	1:96:A:HIS:N	1:96:A:HIS:CA	1:96:A:HIS:CB	1:96:A:HIS:CG	7	4.55
(1,46)	1:67:A:GLU:N	1:67:A:GLU:CA	1:67:A:GLU:C	1:68:A:ASN:N	18	4.55
(1,44)	1:63:A:ASP:N	1:63:A:ASP:CA	1:63:A:ASP:C	1:64:A:GLN:N	12	4.55
(1,44)	1:63:A:ASP:N	1:63:A:ASP:CA	1:63:A:ASP:C	1:64:A:GLN:N	2	4.53
(1,152)	1:163:A:GLN:N	1:163:A:GLN:CA	1:163:A:GLN:C	1:164:A:VAL:N	10	4.52
(1,12)	1:27:A:SER:N	1:27:A:SER:CA	1:27:A:SER:C	1:28:A:VAL:N	15	4.5
(1,12)	1:27:A:SER:N	1:27:A:SER:CA	1:27:A:SER:C	1:28:A:VAL:N	6	4.48
(1,238)	1:25:A:CYS:N	1:25:A:CYS:CA	1:25:A:CYS:C	1:26:A:GLY:N	9	4.47
(1,493)	1:153:A:ASP:N	1:153:A:ASP:CA	1:153:A:ASP:CB	1:153:A:ASP:CG	18	4.46
(1,150)	1:162:A:TYR:N	1:162:A:TYR:CA	1:162:A:TYR:C	1:163:A:GLN:N	8	4.46
(1,467)	1:139:A:PRO:C	1:140:A:GLU:N	1:140:A:GLU:CA	1:140:A:GLU:C	7	4.45
(1,11)	1:26:A:GLY:C	1:27:A:SER:N	1:27:A:SER:CA	1:27:A:SER:C	20	4.45
(1,138)	1:152:A:TRP:N	1:152:A:TRP:CA	1:152:A:TRP:C	1:153:A:ASP:N	1	4.44
(1,14)	1:28:A:VAL:N	1:28:A:VAL:CA	1:28:A:VAL:C	1:29:A:MET:N	13	4.44
(1,147)	1:160:A:ALA:C	1:161:A:PHE:N	1:161:A:PHE:CA	1:161:A:PHE:C	5	4.42
(1,115)	1:133:A:SER:C	1:134:A:HIS:N	1:134:A:HIS:CA	1:134:A:HIS:C	6	4.39
(1,120)	1:136:A:ILE:N	1:136:A:ILE:CA	1:136:A:ILE:C	1:137:A:TYR:N	7	4.38
(1,453)	1:134:A:HIS:CA	1:134:A:HIS:CB	1:134:A:HIS:CG	1:134:A:HIS:ND1	18	4.37
(1,453)	1:134:A:HIS:CA	1:134:A:HIS:CB	1:134:A:HIS:CG	1:134:A:HIS:ND1	5	4.36
(1,320)	1:68:A:ASN:C	1:69:A:ARG:N	1:69:A:ARG:CA	1:69:A:ARG:C	20	4.36
(1,227)	1:22:A:ASN:N	1:22:A:ASN:CA	1:22:A:ASN:C	1:23:A:LEU:N	19	4.36
(1,449)	1:132:A:LEU:N	1:132:A:LEU:CA	1:132:A:LEU:CB	1:132:A:LEU:CG	16	4.33
(1,303)	1:63:A:ASP:N	1:63:A:ASP:CA	1:63:A:ASP:CB	1:63:A:ASP:CG	4	4.33
(1,98)	1:115:A:PHE:N	1:115:A:PHE:CA	1:115:A:PHE:C	1:116:A:GLU:N	4	4.33
(1,7)	1:12:A:ALA:C	1:13:A:LEU:N	1:13:A:LEU:CA	1:13:A:LEU:C	5	4.31
(1,77)	1:84:A:TRP:C	1:85:A:THR:N	1:85:A:THR:CA	1:85:A:THR:C	4	4.29
(1,410)	1:112:A:ARG:N	1:112:A:ARG:CA	1:112:A:ARG:C	1:113:A:ALA:N	1	4.27
(1,281)	1:47:A:ALA:C	1:48:A:ASP:N	1:48:A:ASP:CA	1:48:A:ASP:C	13	4.25
(1,67)	1:79:A:GLU:C	1:80:A:HIS:N	1:80:A:HIS:CA	2:173:A:CU1:CU	13	4.25
(1,44)	1:63:A:ASP:N	1:63:A:ASP:CA	1:63:A:ASP:C	1:64:A:GLN:N	10	4.25
(1,252)	1:32:A:PRO:N	1:32:A:PRO:CA	1:32:A:PRO:C	1:33:A:GLN:N	5	4.23
(1,202)	1:14:A:CYS:N	1:14:A:CYS:CA	1:14:A:CYS:CB	1:14:A:CYS:SG	3	4.23
(1,147)	1:160:A:ALA:C	1:161:A:PHE:N	1:161:A:PHE:CA	1:161:A:PHE:C	9	4.23
(1,506)	1:159:A:ASN:N	1:159:A:ASN:CA	1:159:A:ASN:C	1:160:A:ALA:N	9	4.22
(1,504)	1:159:A:ASN:N	1:159:A:ASN:CA	1:159:A:ASN:CB	1:159:A:ASN:CG	19	4.22
(1,180)	1:154:A:VAL:C	1:155:A:ALA:N	1:155:A:ALA:CA	1:155:A:ALA:C	19	4.2
(1,1)	1:3:A:PHE:C	1:4:A:ILE:N	1:4:A:ILE:CA	1:4:A:ILE:C	7	4.19

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,281)	1:47:A:ALA:C	1:48:A:ASP:N	1:48:A:ASP:CA	1:48:A:ASP:C	18	4.18
(1,67)	1:79:A:GLU:C	1:80:A:HIS:N	1:80:A:HIS:CA	2:173:A:CU1:CU	1	4.17
(1,18)	1:33:A:GLN:N	1:33:A:GLN:CA	1:33:A:GLN:C	1:34:A:SER:N	1	4.17
(1,303)	1:63:A:ASP:N	1:63:A:ASP:CA	1:63:A:ASP:CB	1:63:A:ASP:CG	6	4.13
(1,43)	1:62:A:LEU:C	1:63:A:ASP:N	1:63:A:ASP:CA	1:63:A:ASP:C	2	4.12
(1,252)	1:32:A:PRO:N	1:32:A:PRO:CA	1:32:A:PRO:C	1:33:A:GLN:N	9	4.11
(1,141)	1:155:A:ALA:C	1:156:A:ASP:N	1:156:A:ASP:CA	1:156:A:ASP:C	10	4.11
(1,117)	1:134:A:HIS:C	1:135:A:HIS:N	1:135:A:HIS:CA	1:135:A:HIS:C	11	4.11
(1,79)	1:85:A:THR:C	1:86:A:TYR:N	1:86:A:TYR:CA	1:86:A:TYR:C	10	4.11
(1,263)	1:36:A:GLU:N	1:36:A:GLU:CA	1:36:A:GLU:C	1:37:A:ALA:N	13	4.1
(1,89)	1:95:A:TRP:C	1:96:A:HIS:N	1:96:A:HIS:CA	1:96:A:HIS:C	4	4.1
(1,291)	1:54:A:ALA:C	1:55:A:GLY:N	1:55:A:GLY:CA	1:55:A:GLY:C	8	4.08
(1,77)	1:84:A:TRP:C	1:85:A:THR:N	1:85:A:THR:CA	1:85:A:THR:C	14	4.08
(1,302)	1:62:A:LEU:CA	1:62:A:LEU:CB	1:62:A:LEU:CG	1:62:A:LEU:CD2	17	4.06
(1,229)	1:23:A:LEU:N	1:23:A:LEU:CA	1:23:A:LEU:CB	1:23:A:LEU:CG	9	4.06
(1,203)	1:14:A:CYS:N	1:14:A:CYS:CA	1:14:A:CYS:C	1:15:A:SER:N	9	4.06
(1,132)	1:149:A:LEU:N	1:149:A:LEU:CA	1:149:A:LEU:C	1:150:A:ALA:N	5	4.06
(1,91)	1:96:A:HIS:C	1:97:A:TYR:N	1:97:A:TYR:CA	1:97:A:TYR:C	6	4.06
(1,301)	1:62:A:LEU:N	1:62:A:LEU:CA	1:62:A:LEU:CB	1:62:A:LEU:CG	2	4.03
(1,166)	1:170:A:VAL:N	1:170:A:VAL:CA	1:170:A:VAL:C	1:171:A:ASN:N	1	4.03
(1,154)	1:164:A:VAL:N	1:164:A:VAL:CA	1:164:A:VAL:C	1:165:A:ILE:N	7	4.03
(1,132)	1:149:A:LEU:N	1:149:A:LEU:CA	1:149:A:LEU:C	1:150:A:ALA:N	13	4.03
(1,120)	1:136:A:ILE:N	1:136:A:ILE:CA	1:136:A:ILE:C	1:137:A:TYR:N	2	4.02
(1,61)	1:75:A:MET:C	1:76:A:THR:N	1:76:A:THR:CA	1:76:A:THR:C	15	4.02
(1,118)	1:135:A:HIS:N	1:135:A:HIS:CA	1:135:A:HIS:C	1:136:A:ILE:N	18	4.0
(1,38)	1:60:A:GLY:N	1:60:A:GLY:CA	1:60:A:GLY:C	1:61:A:ILE:N	14	3.99
(1,252)	1:32:A:PRO:N	1:32:A:PRO:CA	1:32:A:PRO:C	1:33:A:GLN:N	7	3.98
(1,89)	1:95:A:TRP:C	1:96:A:HIS:N	1:96:A:HIS:CA	1:96:A:HIS:C	8	3.98
(1,62)	1:76:A:THR:N	1:76:A:THR:CA	1:76:A:THR:C	1:77:A:GLY:N	13	3.97
(1,8)	1:13:A:LEU:N	1:13:A:LEU:CA	1:13:A:LEU:C	1:14:A:CYS:N	5	3.96
(1,98)	1:115:A:PHE:N	1:115:A:PHE:CA	1:115:A:PHE:C	1:116:A:GLU:N	2	3.95
(1,189)	1:5:A:GLU:N	1:5:A:GLU:CA	1:5:A:GLU:C	1:6:A:LYS:N	5	3.93
(1,135)	1:150:A:ALA:C	1:151:A:VAL:N	1:151:A:VAL:CA	1:151:A:VAL:C	16	3.9
(1,66)	1:79:A:GLU:N	1:79:A:GLU:CA	1:79:A:GLU:C	1:80:A:HIS:N	2	3.9
(1,463)	1:138:A:ILE:N	1:138:A:ILE:CA	1:138:A:ILE:CB	1:138:A:ILE:CG1	19	3.89
(1,190)	1:7:A:PRO:N	1:7:A:PRO:CA	1:7:A:PRO:C	1:8:A:GLY:N	10	3.89
(1,77)	1:84:A:TRP:C	1:85:A:THR:N	1:85:A:THR:CA	1:85:A:THR:C	17	3.88
(1,120)	1:136:A:ILE:N	1:136:A:ILE:CA	1:136:A:ILE:C	1:137:A:TYR:N	5	3.87
(1,449)	1:132:A:LEU:N	1:132:A:LEU:CA	1:132:A:LEU:CB	1:132:A:LEU:CG	14	3.86
(1,429)	1:118:A:ILE:N	1:118:A:ILE:CA	1:118:A:ILE:C	1:119:A:GLY:N	12	3.86
(1,237)	1:25:A:CYS:N	1:25:A:CYS:CA	1:25:A:CYS:CB	1:25:A:CYS:SG	16	3.86
(1,155)	1:164:A:VAL:C	1:165:A:ILE:N	1:165:A:ILE:CA	1:165:A:ILE:C	13	3.86
(1,53)	1:71:A:PHE:C	1:72:A:LYS:N	1:72:A:LYS:CA	1:72:A:LYS:C	7	3.86
(1,261)	1:36:A:GLU:N	1:36:A:GLU:CA	1:36:A:GLU:CB	1:36:A:GLU:CG	5	3.85
(1,524)	1:171:A:ASN:C	1:172:A:LYS:N	1:172:A:LYS:CA	1:172:A:LYS:C	15	3.84
(1,252)	1:32:A:PRO:N	1:32:A:PRO:CA	1:32:A:PRO:C	1:33:A:GLN:N	6	3.82
(1,158)	1:166:A:ASP:N	1:166:A:ASP:CA	1:166:A:ASP:C	1:167:A:VAL:N	13	3.82
(1,133)	1:149:A:LEU:C	1:150:A:ALA:N	1:150:A:ALA:CA	1:150:A:ALA:C	14	3.82
(1,231)	1:23:A:LEU:N	1:23:A:LEU:CA	1:23:A:LEU:C	1:24:A:ASN:N	7	3.8
(1,210)	1:17:A:ALA:N	1:17:A:ALA:CA	1:17:A:ALA:C	1:18:A:PHE:N	12	3.79
(1,89)	1:95:A:TRP:C	1:96:A:HIS:N	1:96:A:HIS:CA	1:96:A:HIS:C	19	3.79

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,189)	1:5:A:GLU:N	1:5:A:GLU:CA	1:5:A:GLU:C	1:6:A:LYS:N	2	3.78
(1,144)	1:157:A:THR:N	1:157:A:THR:CA	1:157:A:THR:C	1:158:A:GLU:N	20	3.77
(1,435)	1:122:A:PRO:N	1:122:A:PRO:CA	1:122:A:PRO:C	1:123:A:HIS:N	12	3.76
(1,115)	1:133:A:SER:C	1:134:A:HIS:N	1:134:A:HIS:CA	1:134:A:HIS:C	12	3.76
(1,147)	1:160:A:ALA:C	1:161:A:PHE:N	1:161:A:PHE:CA	1:161:A:PHE:C	17	3.75
(1,122)	1:143:A:LEU:N	1:143:A:LEU:CA	1:143:A:LEU:C	1:144:A:GLY:N	6	3.75
(1,261)	1:36:A:GLU:N	1:36:A:GLU:CA	1:36:A:GLU:CB	1:36:A:GLU:CG	1	3.74
(1,16)	1:29:A:MET:N	1:29:A:MET:CA	1:29:A:MET:C	1:30:A:TYR:N	20	3.72
(1,12)	1:27:A:SER:N	1:27:A:SER:CA	1:27:A:SER:C	1:28:A:VAL:N	12	3.72
(1,74)	1:83:A:THR:N	1:83:A:THR:CA	1:83:A:THR:C	1:84:A:TRP:N	10	3.69
(1,62)	1:76:A:THR:N	1:76:A:THR:CA	1:76:A:THR:C	1:77:A:GLY:N	19	3.68
(1,31)	1:53:A:SER:C	1:54:A:ALA:N	1:54:A:ALA:CA	1:54:A:ALA:C	10	3.68
(1,467)	1:139:A:PRO:C	1:140:A:GLU:N	1:140:A:GLU:CA	1:140:A:GLU:C	16	3.66
(1,10)	1:16:A:GLU:N	1:16:A:GLU:CA	1:16:A:GLU:C	1:17:A:ALA:N	10	3.65
(1,112)	1:132:A:LEU:N	1:132:A:LEU:CA	1:132:A:LEU:C	1:133:A:SER:N	5	3.63
(1,112)	1:132:A:LEU:N	1:132:A:LEU:CA	1:132:A:LEU:C	1:133:A:SER:N	15	3.63
(1,66)	1:79:A:GLU:N	1:79:A:GLU:CA	1:79:A:GLU:C	1:80:A:HIS:N	13	3.63
(1,462)	1:137:A:TYR:C	1:138:A:ILE:N	1:138:A:ILE:CA	1:138:A:ILE:C	15	3.62
(1,406)	1:111:A:LYS:N	1:111:A:LYS:CA	1:111:A:LYS:C	1:112:A:ARG:N	8	3.6
(1,149)	1:161:A:PHE:C	1:162:A:TYR:N	1:162:A:TYR:CA	1:162:A:TYR:C	13	3.59
(1,413)	1:113:A:ALA:C	1:114:A:ASP:N	1:114:A:ASP:CA	1:114:A:ASP:C	10	3.58
(1,16)	1:29:A:MET:N	1:29:A:MET:CA	1:29:A:MET:C	1:30:A:TYR:N	14	3.58
(1,21)	1:36:A:GLU:C	1:37:A:ALA:N	1:37:A:ALA:CA	1:37:A:ALA:C	10	3.57
(1,406)	1:111:A:LYS:N	1:111:A:LYS:CA	1:111:A:LYS:C	1:112:A:ARG:N	1	3.56
(1,8)	1:13:A:LEU:N	1:13:A:LEU:CA	1:13:A:LEU:C	1:14:A:CYS:N	12	3.55
(1,79)	1:85:A:THR:C	1:86:A:TYR:N	1:86:A:TYR:CA	1:86:A:TYR:C	14	3.54
(1,124)	1:145:A:TYR:N	1:145:A:TYR:CA	1:145:A:TYR:C	1:146:A:HIS:N	16	3.53
(1,54)	1:72:A:LYS:N	1:72:A:LYS:CA	1:72:A:LYS:C	1:73:A:HIS:N	10	3.52
(1,174)	1:49:A:GLY:N	1:49:A:GLY:CA	1:49:A:GLY:C	1:50:A:GLN:N	5	3.47
(1,43)	1:62:A:LEU:C	1:63:A:ASP:N	1:63:A:ASP:CA	1:63:A:ASP:C	11	3.47
(1,10)	1:16:A:GLU:N	1:16:A:GLU:CA	1:16:A:GLU:C	1:17:A:ALA:N	15	3.47
(1,302)	1:62:A:LEU:CA	1:62:A:LEU:CB	1:62:A:LEU:CG	1:62:A:LEU:CD2	15	3.46
(1,119)	1:135:A:HIS:C	1:136:A:ILE:N	1:136:A:ILE:CA	1:136:A:ILE:C	18	3.46
(1,127)	1:146:A:HIS:C	1:147:A:VAL:N	1:147:A:VAL:CA	1:147:A:VAL:C	15	3.45
(1,8)	1:13:A:LEU:N	1:13:A:LEU:CA	1:13:A:LEU:C	1:14:A:CYS:N	18	3.45
(1,89)	1:95:A:TRP:C	1:96:A:HIS:N	1:96:A:HIS:CA	1:96:A:HIS:C	7	3.43
(1,90)	1:96:A:HIS:N	1:96:A:HIS:CA	1:96:A:HIS:C	1:97:A:TYR:N	4	3.42
(1,390)	1:106:A:PRO:C	1:107:A:ASP:N	1:107:A:ASP:CA	1:107:A:ASP:C	7	3.41
(1,135)	1:150:A:ALA:C	1:151:A:VAL:N	1:151:A:VAL:CA	1:151:A:VAL:C	8	3.41
(1,23)	1:46:A:PRO:C	1:47:A:ALA:N	1:47:A:ALA:CA	1:47:A:ALA:C	16	3.41
(1,435)	1:122:A:PRO:N	1:122:A:PRO:CA	1:122:A:PRO:C	1:123:A:HIS:N	15	3.4
(1,301)	1:62:A:LEU:N	1:62:A:LEU:CA	1:62:A:LEU:CB	1:62:A:LEU:CG	4	3.4
(1,117)	1:134:A:HIS:C	1:135:A:HIS:N	1:135:A:HIS:CA	1:135:A:HIS:C	10	3.4
(1,333)	1:75:A:MET:N	1:75:A:MET:CA	1:75:A:MET:CB	1:75:A:MET:CG	19	3.38
(1,210)	1:17:A:ALA:N	1:17:A:ALA:CA	1:17:A:ALA:C	1:18:A:PHE:N	11	3.38
(1,48)	1:68:A:ASN:N	1:68:A:ASN:CA	1:68:A:ASN:C	1:69:A:ARG:N	10	3.38
(1,190)	1:7:A:PRO:N	1:7:A:PRO:CA	1:7:A:PRO:C	1:8:A:GLY:N	16	3.35
(1,82)	1:88:A:ALA:N	1:88:A:ALA:CA	1:88:A:ALA:C	1:89:A:PRO:N	11	3.34
(1,252)	1:32:A:PRO:N	1:32:A:PRO:CA	1:32:A:PRO:C	1:33:A:GLN:N	18	3.33
(1,238)	1:25:A:CYS:N	1:25:A:CYS:CA	1:25:A:CYS:C	1:26:A:GLY:N	8	3.33
(1,107)	1:129:A:SER:C	1:130:A:ARG:N	1:130:A:ARG:CA	1:130:A:ARG:C	7	3.33

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,429)	1:118:A:ILE:N	1:118:A:ILE:CA	1:118:A:ILE:C	1:119:A:GLY:N	9	3.32
(1,238)	1:25:A:CYS:N	1:25:A:CYS:CA	1:25:A:CYS:C	1:26:A:GLY:N	6	3.32
(1,143)	1:156:A:ASP:C	1:157:A:THR:N	1:157:A:THR:CA	1:157:A:THR:C	2	3.32
(1,504)	1:159:A:ASN:N	1:159:A:ASN:CA	1:159:A:ASN:CB	1:159:A:ASN:CG	11	3.31
(1,437)	1:123:A:HIS:C	1:124:A:ASP:N	1:124:A:ASP:CA	1:124:A:ASP:C	13	3.3
(1,66)	1:79:A:GLU:N	1:79:A:GLU:CA	1:79:A:GLU:C	1:80:A:HIS:N	11	3.29
(1,263)	1:36:A:GLU:N	1:36:A:GLU:CA	1:36:A:GLU:C	1:37:A:ALA:N	18	3.28
(1,526)	1:172:A:LYS:CA	1:172:A:LYS:CB	1:172:A:LYS:CG	1:172:A:LYS:CD	18	3.26
(1,66)	1:79:A:GLU:N	1:79:A:GLU:CA	1:79:A:GLU:C	1:80:A:HIS:N	8	3.24
(1,263)	1:36:A:GLU:N	1:36:A:GLU:CA	1:36:A:GLU:C	1:37:A:ALA:N	1	3.22
(1,252)	1:32:A:PRO:N	1:32:A:PRO:CA	1:32:A:PRO:C	1:33:A:GLN:N	14	3.22
(1,117)	1:134:A:HIS:C	1:135:A:HIS:N	1:135:A:HIS:CA	1:135:A:HIS:C	13	3.22
(1,189)	1:5:A:GLU:N	1:5:A:GLU:CA	1:5:A:GLU:C	1:6:A:LYS:N	16	3.21
(1,180)	1:154:A:VAL:C	1:155:A:ALA:N	1:155:A:ALA:CA	1:155:A:ALA:C	14	3.21
(1,98)	1:115:A:PHE:N	1:115:A:PHE:CA	1:115:A:PHE:C	1:116:A:GLU:N	14	3.21
(1,90)	1:96:A:HIS:N	1:96:A:HIS:CA	1:96:A:HIS:C	1:97:A:TYR:N	16	3.21
(1,90)	1:96:A:HIS:N	1:96:A:HIS:CA	1:96:A:HIS:C	1:97:A:TYR:N	10	3.2
(1,506)	1:159:A:ASN:N	1:159:A:ASN:CA	1:159:A:ASN:C	1:160:A:ALA:N	4	3.15
(1,43)	1:62:A:LEU:C	1:63:A:ASP:N	1:63:A:ASP:CA	1:63:A:ASP:C	9	3.15
(1,123)	1:144:A:GLY:C	1:145:A:TYR:N	1:145:A:TYR:CA	1:145:A:TYR:C	2	3.14
(1,19)	1:34:A:SER:C	1:35:A:LEU:N	1:35:A:LEU:CA	1:35:A:LEU:C	9	3.13
(1,61)	1:75:A:MET:C	1:76:A:THR:N	1:76:A:THR:CA	1:76:A:THR:C	3	3.12
(1,410)	1:112:A:ARG:N	1:112:A:ARG:CA	1:112:A:ARG:C	1:113:A:ALA:N	11	3.11
(1,275)	1:43:A:HIS:C	1:44:A:SER:N	1:44:A:SER:CA	1:44:A:SER:C	18	3.11
(1,125)	1:145:A:TYR:C	1:146:A:HIS:N	1:146:A:HIS:CA	1:146:A:HIS:C	3	3.11
(1,437)	1:123:A:HIS:C	1:124:A:ASP:N	1:124:A:ASP:CA	1:124:A:ASP:C	12	3.09
(1,263)	1:36:A:GLU:N	1:36:A:GLU:CA	1:36:A:GLU:C	1:37:A:ALA:N	11	3.08
(1,287)	1:50:A:GLN:N	1:50:A:GLN:CA	1:50:A:GLN:C	1:51:A:ILE:N	18	3.07
(1,44)	1:63:A:ASP:N	1:63:A:ASP:CA	1:63:A:ASP:C	1:64:A:GLN:N	16	3.05
(1,399)	1:109:A:PRO:C	1:110:A:LEU:N	1:110:A:LEU:CA	1:110:A:LEU:C	18	3.03
(1,328)	1:72:A:LYS:N	1:72:A:LYS:CA	1:72:A:LYS:CB	1:72:A:LYS:CG	6	3.03
(1,44)	1:63:A:ASP:N	1:63:A:ASP:CA	1:63:A:ASP:C	1:64:A:GLN:N	18	3.03
(1,236)	1:24:A:ASN:C	1:25:A:CYS:N	1:25:A:CYS:CA	1:25:A:CYS:C	6	3.02
(1,227)	1:22:A:ASN:N	1:22:A:ASN:CA	1:22:A:ASN:C	1:23:A:LEU:N	18	3.02
(1,106)	1:129:A:SER:N	1:129:A:SER:CA	1:129:A:SER:C	1:130:A:ARG:N	8	3.02
(1,468)	1:140:A:GLU:N	1:140:A:GLU:CA	1:140:A:GLU:CB	1:140:A:GLU:CG	12	3.01
(1,60)	1:75:A:MET:N	1:75:A:MET:CA	1:75:A:MET:C	1:76:A:THR:N	17	3.0
(1,361)	1:96:A:HIS:N	1:96:A:HIS:CA	1:96:A:HIS:CB	1:96:A:HIS:CG	8	2.99
(1,46)	1:67:A:GLU:N	1:67:A:GLU:CA	1:67:A:GLU:C	1:68:A:ASN:N	13	2.99
(1,36)	1:59:A:GLY:N	1:59:A:GLY:CA	1:59:A:GLY:C	1:60:A:GLY:N	13	2.98
(1,265)	1:38:A:LYS:N	1:38:A:LYS:CA	1:38:A:LYS:CB	1:38:A:LYS:CG	1	2.97
(1,406)	1:111:A:LYS:N	1:111:A:LYS:CA	1:111:A:LYS:C	1:112:A:ARG:N	12	2.96
(1,235)	1:24:A:ASN:N	1:24:A:ASN:CA	1:24:A:ASN:C	1:25:A:CYS:N	6	2.96
(1,160)	1:167:A:VAL:N	1:167:A:VAL:CA	1:167:A:VAL:C	1:168:A:ASP:N	13	2.96
(1,435)	1:122:A:PRO:N	1:122:A:PRO:CA	1:122:A:PRO:C	1:123:A:HIS:N	5	2.95
(1,435)	1:122:A:PRO:N	1:122:A:PRO:CA	1:122:A:PRO:C	1:123:A:HIS:N	16	2.95
(1,406)	1:111:A:LYS:N	1:111:A:LYS:CA	1:111:A:LYS:C	1:112:A:ARG:N	5	2.93
(1,90)	1:96:A:HIS:N	1:96:A:HIS:CA	1:96:A:HIS:C	1:97:A:TYR:N	1	2.92
(1,361)	1:96:A:HIS:N	1:96:A:HIS:CA	1:96:A:HIS:CB	1:96:A:HIS:CG	18	2.91
(1,132)	1:149:A:LEU:N	1:149:A:LEU:CA	1:149:A:LEU:C	1:150:A:ALA:N	15	2.91
(1,9)	1:15:A:SER:C	1:16:A:GLU:N	1:16:A:GLU:CA	1:16:A:GLU:C	3	2.91

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,126)	1:146:A:HIS:N	1:146:A:HIS:CA	2:173:A:CU1:CU	1:147:A:VAL:N	16	2.89
(1,337)	1:79:A:GLU:N	1:79:A:GLU:CA	1:79:A:GLU:CB	1:79:A:GLU:CG	20	2.88
(1,161)	1:167:A:VAL:C	1:168:A:ASP:N	1:168:A:ASP:CA	1:168:A:ASP:C	1	2.88
(1,115)	1:133:A:SER:C	1:134:A:HIS:N	1:134:A:HIS:CA	1:134:A:HIS:C	1	2.88
(1,38)	1:60:A:GLY:N	1:60:A:GLY:CA	1:60:A:GLY:C	1:61:A:ILE:N	20	2.87
(1,135)	1:150:A:ALA:C	1:151:A:VAL:N	1:151:A:VAL:CA	1:151:A:VAL:C	3	2.86
(1,302)	1:62:A:LEU:CA	1:62:A:LEU:CB	1:62:A:LEU:CG	1:62:A:LEU:CD2	4	2.84
(1,263)	1:36:A:GLU:N	1:36:A:GLU:CA	1:36:A:GLU:C	1:37:A:ALA:N	14	2.84
(1,302)	1:62:A:LEU:CA	1:62:A:LEU:CB	1:62:A:LEU:CG	1:62:A:LEU:CD2	18	2.83
(1,135)	1:150:A:ALA:C	1:151:A:VAL:N	1:151:A:VAL:CA	1:151:A:VAL:C	9	2.82
(1,410)	1:112:A:ARG:N	1:112:A:ARG:CA	1:112:A:ARG:C	1:113:A:ALA:N	10	2.81
(1,407)	1:111:A:LYS:C	1:112:A:ARG:N	1:112:A:ARG:CA	1:112:A:ARG:C	12	2.8
(1,163)	1:168:A:ASP:C	1:169:A:LEU:N	1:169:A:LEU:CA	1:169:A:LEU:C	14	2.8
(1,75)	1:83:A:THR:C	1:84:A:TRP:N	1:84:A:TRP:CA	1:84:A:TRP:C	16	2.8
(1,1)	1:3:A:PHE:C	1:4:A:ILE:N	1:4:A:ILE:CA	1:4:A:ILE:C	5	2.8
(1,452)	1:134:A:HIS:N	1:134:A:HIS:CA	1:134:A:HIS:CB	1:134:A:HIS:CG	13	2.79
(1,506)	1:159:A:ASN:N	1:159:A:ASN:CA	1:159:A:ASN:C	1:160:A:ALA:N	16	2.78
(1,252)	1:32:A:PRO:N	1:32:A:PRO:CA	1:32:A:PRO:C	1:33:A:GLN:N	8	2.78
(1,303)	1:63:A:ASP:N	1:63:A:ASP:CA	1:63:A:ASP:CB	1:63:A:ASP:CG	2	2.74
(1,263)	1:36:A:GLU:N	1:36:A:GLU:CA	1:36:A:GLU:C	1:37:A:ALA:N	12	2.74
(1,267)	1:38:A:LYS:N	1:38:A:LYS:CA	1:38:A:LYS:C	1:39:A:LYS:N	7	2.73
(1,97)	1:114:A:ASP:C	1:115:A:PHE:N	1:115:A:PHE:CA	1:115:A:PHE:C	19	2.73
(1,301)	1:62:A:LEU:N	1:62:A:LEU:CA	1:62:A:LEU:CB	1:62:A:LEU:CG	17	2.72
(1,29)	1:52:A:ALA:C	1:53:A:SER:N	1:53:A:SER:CA	1:53:A:SER:C	11	2.71
(1,219)	1:20:A:PHE:N	1:20:A:PHE:CA	1:20:A:PHE:C	1:21:A:LEU:N	5	2.7
(1,320)	1:68:A:ASN:C	1:69:A:ARG:N	1:69:A:ARG:CA	1:69:A:ARG:C	13	2.69
(1,261)	1:36:A:GLU:N	1:36:A:GLU:CA	1:36:A:GLU:CB	1:36:A:GLU:CG	19	2.65
(1,90)	1:96:A:HIS:N	1:96:A:HIS:CA	1:96:A:HIS:C	1:97:A:TYR:N	13	2.64
(1,301)	1:62:A:LEU:N	1:62:A:LEU:CA	1:62:A:LEU:CB	1:62:A:LEU:CG	5	2.63
(1,328)	1:72:A:LYS:N	1:72:A:LYS:CA	1:72:A:LYS:CB	1:72:A:LYS:CG	1	2.61
(1,210)	1:17:A:ALA:N	1:17:A:ALA:CA	1:17:A:ALA:C	1:18:A:PHE:N	10	2.6
(1,160)	1:167:A:VAL:N	1:167:A:VAL:CA	1:167:A:VAL:C	1:168:A:ASP:N	12	2.6
(1,140)	1:153:A:ASP:N	1:153:A:ASP:CA	1:153:A:ASP:C	1:154:A:VAL:N	11	2.6
(1,44)	1:63:A:ASP:N	1:63:A:ASP:CA	1:63:A:ASP:C	1:64:A:GLN:N	5	2.6
(1,316)	1:67:A:GLU:N	1:67:A:GLU:CA	1:67:A:GLU:CB	1:67:A:GLU:CG	10	2.57
(1,263)	1:36:A:GLU:N	1:36:A:GLU:CA	1:36:A:GLU:C	1:37:A:ALA:N	10	2.57
(1,113)	1:132:A:LEU:C	1:133:A:SER:N	1:133:A:SER:CA	1:133:A:SER:C	19	2.56
(1,142)	1:156:A:ASP:N	1:156:A:ASP:CA	1:156:A:ASP:C	1:157:A:THR:N	4	2.53
(1,54)	1:72:A:LYS:N	1:72:A:LYS:CA	1:72:A:LYS:C	1:73:A:HIS:N	3	2.53
(1,161)	1:167:A:VAL:C	1:168:A:ASP:N	1:168:A:ASP:CA	1:168:A:ASP:C	3	2.52
(1,438)	1:124:A:ASP:N	1:124:A:ASP:CA	1:124:A:ASP:CB	1:124:A:ASP:CG	20	2.51
(1,299)	1:61:A:ILE:N	1:61:A:ILE:CA	1:61:A:ILE:CB	1:61:A:ILE:CG1	13	2.5
(1,482)	1:145:A:TYR:N	1:145:A:TYR:CA	1:145:A:TYR:CB	1:145:A:TYR:CG	7	2.49
(1,429)	1:118:A:ILE:N	1:118:A:ILE:CA	1:118:A:ILE:C	1:119:A:GLY:N	5	2.48
(1,142)	1:156:A:ASP:N	1:156:A:ASP:CA	1:156:A:ASP:C	1:157:A:THR:N	14	2.48
(1,462)	1:137:A:TYR:C	1:138:A:ILE:N	1:138:A:ILE:CA	1:138:A:ILE:C	3	2.47
(1,362)	1:96:A:HIS:CA	1:96:A:HIS:CB	1:96:A:HIS:CG	1:96:A:HIS:ND1	3	2.47
(1,126)	1:146:A:HIS:N	1:146:A:HIS:CA	2:173:A:CU1:CU	1:147:A:VAL:N	8	2.47
(1,440)	1:124:A:ASP:N	1:124:A:ASP:CA	1:124:A:ASP:C	1:125:A:GLY:N	20	2.45
(1,66)	1:79:A:GLU:N	1:79:A:GLU:CA	1:79:A:GLU:C	1:80:A:HIS:N	14	2.45
(1,90)	1:96:A:HIS:N	1:96:A:HIS:CA	1:96:A:HIS:C	1:97:A:TYR:N	12	2.43

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,88)	1:95:A:TRP:N	1:95:A:TRP:CA	1:95:A:TRP:C	1:96:A:HIS:N	16	2.43
(1,272)	1:42:A:PRO:C	1:43:A:HIS:N	1:43:A:HIS:CA	1:43:A:HIS:C	13	2.41
(1,115)	1:133:A:SER:C	1:134:A:HIS:N	1:134:A:HIS:CA	1:134:A:HIS:C	17	2.41
(1,32)	1:54:A:ALA:N	1:54:A:ALA:CA	1:54:A:ALA:C	1:55:A:GLY:N	15	2.41
(1,46)	1:67:A:GLU:N	1:67:A:GLU:CA	1:67:A:GLU:C	1:68:A:ASN:N	20	2.4
(1,10)	1:16:A:GLU:N	1:16:A:GLU:CA	1:16:A:GLU:C	1:17:A:ALA:N	7	2.38
(1,391)	1:107:A:ASP:N	1:107:A:ASP:CA	1:107:A:ASP:CB	1:107:A:ASP:CG	13	2.37
(1,61)	1:75:A:MET:C	1:76:A:THR:N	1:76:A:THR:CA	1:76:A:THR:C	5	2.37
(1,48)	1:68:A:ASN:N	1:68:A:ASN:CA	1:68:A:ASN:C	1:69:A:ARG:N	19	2.36
(1,43)	1:62:A:LEU:C	1:63:A:ASP:N	1:63:A:ASP:CA	1:63:A:ASP:C	5	2.35
(1,337)	1:79:A:GLU:N	1:79:A:GLU:CA	1:79:A:GLU:CB	1:79:A:GLU:CG	19	2.34
(1,26)	1:51:A:ILE:N	1:51:A:ILE:CA	1:51:A:ILE:C	1:52:A:ALA:N	9	2.34
(1,6)	1:12:A:ALA:N	1:12:A:ALA:CA	1:12:A:ALA:C	1:13:A:LEU:N	12	2.34
(1,320)	1:68:A:ASN:C	1:69:A:ARG:N	1:69:A:ARG:CA	1:69:A:ARG:C	15	2.31
(1,12)	1:27:A:SER:N	1:27:A:SER:CA	1:27:A:SER:C	1:28:A:VAL:N	13	2.31
(1,449)	1:132:A:LEU:N	1:132:A:LEU:CA	1:132:A:LEU:CB	1:132:A:LEU:CG	1	2.29
(1,302)	1:62:A:LEU:CA	1:62:A:LEU:CB	1:62:A:LEU:CG	1:62:A:LEU:CD2	1	2.29
(1,97)	1:114:A:ASP:C	1:115:A:PHE:N	1:115:A:PHE:CA	1:115:A:PHE:C	14	2.29
(1,75)	1:83:A:THR:C	1:84:A:TRP:N	1:84:A:TRP:CA	1:84:A:TRP:C	14	2.27
(1,54)	1:72:A:LYS:N	1:72:A:LYS:CA	1:72:A:LYS:C	1:73:A:HIS:N	15	2.27
(1,8)	1:13:A:LEU:N	1:13:A:LEU:CA	1:13:A:LEU:C	1:14:A:CYS:N	1	2.27
(1,60)	1:75:A:MET:N	1:75:A:MET:CA	1:75:A:MET:C	1:76:A:THR:N	12	2.24
(1,453)	1:134:A:HIS:CA	1:134:A:HIS:CB	1:134:A:HIS:CG	1:134:A:HIS:ND1	16	2.23
(1,77)	1:84:A:TRP:C	1:85:A:THR:N	1:85:A:THR:CA	1:85:A:THR:C	3	2.23
(1,287)	1:50:A:GLN:N	1:50:A:GLN:CA	1:50:A:GLN:C	1:51:A:ILE:N	12	2.22
(1,233)	1:24:A:ASN:N	1:24:A:ASN:CA	1:24:A:ASN:CB	1:24:A:ASN:CG	4	2.22
(1,260)	1:35:A:LEU:C	1:36:A:GLU:N	1:36:A:GLU:CA	1:36:A:GLU:C	15	2.21
(1,81)	1:87:A:THR:C	1:88:A:ALA:N	1:88:A:ALA:CA	1:88:A:ALA:C	5	2.18
(1,23)	1:46:A:PRO:C	1:47:A:ALA:N	1:47:A:ALA:CA	1:47:A:ALA:C	8	2.16
(1,261)	1:36:A:GLU:N	1:36:A:GLU:CA	1:36:A:GLU:CB	1:36:A:GLU:CG	14	2.14
(1,161)	1:167:A:VAL:C	1:168:A:ASP:N	1:168:A:ASP:CA	1:168:A:ASP:C	20	2.14
(1,391)	1:107:A:ASP:N	1:107:A:ASP:CA	1:107:A:ASP:CB	1:107:A:ASP:CG	1	2.13
(1,337)	1:79:A:GLU:N	1:79:A:GLU:CA	1:79:A:GLU:CB	1:79:A:GLU:CG	6	2.13
(1,12)	1:27:A:SER:N	1:27:A:SER:CA	1:27:A:SER:C	1:28:A:VAL:N	10	2.11
(1,386)	1:104:A:TRP:C	1:105:A:ASP:N	1:105:A:ASP:CA	1:105:A:ASP:C	2	2.1
(1,328)	1:72:A:LYS:N	1:72:A:LYS:CA	1:72:A:LYS:CB	1:72:A:LYS:CG	20	2.1
(1,133)	1:149:A:LEU:C	1:150:A:ALA:N	1:150:A:ALA:CA	1:150:A:ALA:C	18	2.1
(1,135)	1:150:A:ALA:C	1:151:A:VAL:N	1:151:A:VAL:CA	1:151:A:VAL:C	18	2.09
(1,94)	1:98:A:TYR:N	1:98:A:TYR:CA	1:98:A:TYR:C	1:99:A:ILE:N	2	2.09
(1,493)	1:153:A:ASP:N	1:153:A:ASP:CA	1:153:A:ASP:CB	1:153:A:ASP:CG	8	2.08
(1,238)	1:25:A:CYS:N	1:25:A:CYS:CA	1:25:A:CYS:C	1:26:A:GLY:N	12	2.08
(1,429)	1:118:A:ILE:N	1:118:A:ILE:CA	1:118:A:ILE:C	1:119:A:GLY:N	1	2.07
(1,261)	1:36:A:GLU:N	1:36:A:GLU:CA	1:36:A:GLU:CB	1:36:A:GLU:CG	15	2.07
(1,76)	1:84:A:TRP:N	1:84:A:TRP:CA	1:84:A:TRP:C	1:85:A:THR:N	15	2.07
(1,73)	1:82:A:PHE:C	1:83:A:THR:N	1:83:A:THR:CA	1:83:A:THR:C	10	2.05
(1,156)	1:165:A:ILE:N	1:165:A:ILE:CA	1:165:A:ILE:C	1:166:A:ASP:N	12	2.04
(1,172)	1:39:A:LYS:N	1:39:A:LYS:CA	1:39:A:LYS:C	1:40:A:GLY:N	13	2.03
(1,468)	1:140:A:GLU:N	1:140:A:GLU:CA	1:140:A:GLU:CB	1:140:A:GLU:CG	15	2.02
(1,125)	1:145:A:TYR:C	1:146:A:HIS:N	1:146:A:HIS:CA	1:146:A:HIS:C	1	2.02
(1,47)	1:67:A:GLU:C	1:68:A:ASN:N	1:68:A:ASN:CA	1:68:A:ASN:C	20	2.02
(1,42)	1:62:A:LEU:N	1:62:A:LEU:CA	1:62:A:LEU:C	1:63:A:ASP:N	1	2.01

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,42)	1:62:A:LEU:N	1:62:A:LEU:CA	1:62:A:LEU:C	1:63:A:ASP:N	8	2.0
(1,14)	1:28:A:VAL:N	1:28:A:VAL:CA	1:28:A:VAL:C	1:29:A:MET:N	12	2.0
(1,474)	1:141:A:ASP:N	1:141:A:ASP:CA	1:141:A:ASP:C	1:142:A:ARG:N	2	1.98
(1,16)	1:29:A:MET:N	1:29:A:MET:CA	1:29:A:MET:C	1:30:A:TYR:N	7	1.98
(1,43)	1:62:A:LEU:C	1:63:A:ASP:N	1:63:A:ASP:CA	1:63:A:ASP:C	18	1.97
(1,130)	1:148:A:ILE:N	1:148:A:ILE:CA	1:148:A:ILE:C	1:149:A:LEU:N	5	1.95
(1,328)	1:72:A:LYS:N	1:72:A:LYS:CA	1:72:A:LYS:CB	1:72:A:LYS:CG	12	1.94
(1,190)	1:7:A:PRO:N	1:7:A:PRO:CA	1:7:A:PRO:C	1:8:A:GLY:N	13	1.94
(1,107)	1:129:A:SER:C	1:130:A:ARG:N	1:130:A:ARG:CA	1:130:A:ARG:C	15	1.94
(1,80)	1:86:A:TYR:N	1:86:A:TYR:CA	1:86:A:TYR:C	1:87:A:THR:N	4	1.93
(1,471)	1:140:A:GLU:C	1:141:A:ASP:N	1:141:A:ASP:CA	1:141:A:ASP:C	3	1.91
(1,267)	1:38:A:LYS:N	1:38:A:LYS:CA	1:38:A:LYS:C	1:39:A:LYS:N	20	1.9
(1,203)	1:14:A:CYS:N	1:14:A:CYS:CA	1:14:A:CYS:C	1:15:A:SER:N	7	1.9
(1,410)	1:112:A:ARG:N	1:112:A:ARG:CA	1:112:A:ARG:C	1:113:A:ALA:N	19	1.89
(1,19)	1:34:A:SER:C	1:35:A:LEU:N	1:35:A:LEU:CA	1:35:A:LEU:C	18	1.89
(1,438)	1:124:A:ASP:N	1:124:A:ASP:CA	1:124:A:ASP:CB	1:124:A:ASP:CG	8	1.88
(1,210)	1:17:A:ALA:N	1:17:A:ALA:CA	1:17:A:ALA:C	1:18:A:PHE:N	17	1.88
(1,112)	1:132:A:LEU:N	1:132:A:LEU:CA	1:132:A:LEU:C	1:133:A:SER:N	4	1.88
(1,10)	1:16:A:GLU:N	1:16:A:GLU:CA	1:16:A:GLU:C	1:17:A:ALA:N	17	1.88
(1,299)	1:61:A:ILE:N	1:61:A:ILE:CA	1:61:A:ILE:CB	1:61:A:ILE:CG1	2	1.87
(1,59)	1:74:A:ILE:C	1:75:A:MET:N	1:75:A:MET:CA	1:75:A:MET:C	19	1.87
(1,153)	1:163:A:GLN:C	1:164:A:VAL:N	1:164:A:VAL:CA	1:164:A:VAL:C	11	1.85
(1,406)	1:111:A:LYS:N	1:111:A:LYS:CA	1:111:A:LYS:C	1:112:A:ARG:N	14	1.84
(1,190)	1:7:A:PRO:N	1:7:A:PRO:CA	1:7:A:PRO:C	1:8:A:GLY:N	20	1.84
(1,23)	1:46:A:PRO:C	1:47:A:ALA:N	1:47:A:ALA:CA	1:47:A:ALA:C	2	1.84
(1,106)	1:129:A:SER:N	1:129:A:SER:CA	1:129:A:SER:C	1:130:A:ARG:N	9	1.83
(1,24)	1:47:A:ALA:N	1:47:A:ALA:CA	1:47:A:ALA:C	1:48:A:ASP:N	9	1.83
(1,316)	1:67:A:GLU:N	1:67:A:GLU:CA	1:67:A:GLU:CB	1:67:A:GLU:CG	11	1.79
(1,149)	1:161:A:PHE:C	1:162:A:TYR:N	1:162:A:TYR:CA	1:162:A:TYR:C	7	1.79
(1,25)	1:50:A:GLN:C	1:51:A:ILE:N	1:51:A:ILE:CA	1:51:A:ILE:C	11	1.79
(1,191)	1:7:A:PRO:C	1:8:A:GLY:N	1:8:A:GLY:CA	1:8:A:GLY:C	20	1.78
(1,299)	1:61:A:ILE:N	1:61:A:ILE:CA	1:61:A:ILE:CB	1:61:A:ILE:CG1	11	1.77
(1,156)	1:165:A:ILE:N	1:165:A:ILE:CA	1:165:A:ILE:C	1:166:A:ASP:N	13	1.77
(1,407)	1:111:A:LYS:C	1:112:A:ARG:N	1:112:A:ARG:CA	1:112:A:ARG:C	15	1.76
(1,506)	1:159:A:ASN:N	1:159:A:ASN:CA	1:159:A:ASN:C	1:160:A:ALA:N	15	1.75
(1,271)	1:42:A:PRO:N	1:42:A:PRO:CA	1:42:A:PRO:C	1:43:A:HIS:N	18	1.75
(1,18)	1:33:A:GLN:N	1:33:A:GLN:CA	1:33:A:GLN:C	1:34:A:SER:N	2	1.75
(1,80)	1:86:A:TYR:N	1:86:A:TYR:CA	1:86:A:TYR:C	1:87:A:THR:N	5	1.73
(1,265)	1:38:A:LYS:N	1:38:A:LYS:CA	1:38:A:LYS:CB	1:38:A:LYS:CG	13	1.72
(1,74)	1:83:A:THR:N	1:83:A:THR:CA	1:83:A:THR:C	1:84:A:TRP:N	9	1.72
(1,36)	1:59:A:GLY:N	1:59:A:GLY:CA	1:59:A:GLY:C	1:60:A:GLY:N	5	1.7
(1,14)	1:28:A:VAL:N	1:28:A:VAL:CA	1:28:A:VAL:C	1:29:A:MET:N	8	1.7
(1,203)	1:14:A:CYS:N	1:14:A:CYS:CA	1:14:A:CYS:C	1:15:A:SER:N	17	1.69
(1,66)	1:79:A:GLU:N	1:79:A:GLU:CA	1:79:A:GLU:C	1:80:A:HIS:N	5	1.67
(1,161)	1:167:A:VAL:C	1:168:A:ASP:N	1:168:A:ASP:CA	1:168:A:ASP:C	13	1.66
(1,7)	1:12:A:ALA:C	1:13:A:LEU:N	1:13:A:LEU:CA	1:13:A:LEU:C	17	1.66
(1,15)	1:28:A:VAL:C	1:29:A:MET:N	1:29:A:MET:CA	1:29:A:MET:C	13	1.64
(1,34)	1:58:A:PHE:N	1:58:A:PHE:CA	1:58:A:PHE:C	1:59:A:GLY:N	7	1.6
(1,32)	1:54:A:ALA:N	1:54:A:ALA:CA	1:54:A:ALA:C	1:55:A:GLY:N	3	1.58
(1,140)	1:153:A:ASP:N	1:153:A:ASP:CA	1:153:A:ASP:C	1:154:A:VAL:N	2	1.53
(1,382)	1:103:A:GLY:C	1:104:A:TRP:N	1:104:A:TRP:CA	1:104:A:TRP:C	18	1.5

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,131)	1:148:A:ILE:C	1:149:A:LEU:N	1:149:A:LEU:CA	1:149:A:LEU:C	10	1.5
(1,77)	1:84:A:TRP:C	1:85:A:THR:N	1:85:A:THR:CA	1:85:A:THR:C	7	1.5
(1,43)	1:62:A:LEU:C	1:63:A:ASP:N	1:63:A:ASP:CA	1:63:A:ASP:C	16	1.5
(1,34)	1:58:A:PHE:N	1:58:A:PHE:CA	1:58:A:PHE:C	1:59:A:GLY:N	8	1.5
(1,100)	1:121:A:VAL:N	1:121:A:VAL:CA	1:121:A:VAL:C	1:122:A:PRO:N	17	1.49
(1,30)	1:53:A:SER:N	1:53:A:SER:CA	1:53:A:SER:C	1:54:A:ALA:N	20	1.49
(1,189)	1:5:A:GLU:N	1:5:A:GLU:CA	1:5:A:GLU:C	1:6:A:LYS:N	15	1.45
(1,96)	1:99:A:ILE:N	1:99:A:ILE:CA	1:99:A:ILE:C	1:100:A:THR:N	4	1.45
(1,81)	1:87:A:THR:C	1:88:A:ALA:N	1:88:A:ALA:CA	1:88:A:ALA:C	7	1.45
(1,34)	1:58:A:PHE:N	1:58:A:PHE:CA	1:58:A:PHE:C	1:59:A:GLY:N	10	1.45
(1,299)	1:61:A:ILE:N	1:61:A:ILE:CA	1:61:A:ILE:CB	1:61:A:ILE:CG1	9	1.44
(1,229)	1:23:A:LEU:N	1:23:A:LEU:CA	1:23:A:LEU:CB	1:23:A:LEU:CG	4	1.44
(1,90)	1:96:A:HIS:N	1:96:A:HIS:CA	1:96:A:HIS:C	1:97:A:TYR:N	20	1.44
(1,36)	1:59:A:GLY:N	1:59:A:GLY:CA	1:59:A:GLY:C	1:60:A:GLY:N	17	1.44
(1,391)	1:107:A:ASP:N	1:107:A:ASP:CA	1:107:A:ASP:CB	1:107:A:ASP:CG	11	1.43
(1,90)	1:96:A:HIS:N	1:96:A:HIS:CA	1:96:A:HIS:C	1:97:A:TYR:N	14	1.43
(1,474)	1:141:A:ASP:N	1:141:A:ASP:CA	1:141:A:ASP:C	1:142:A:ARG:N	7	1.42
(1,356)	1:93:A:SER:N	1:93:A:SER:CA	1:93:A:SER:CB	1:93:A:SER:OG	9	1.42
(1,26)	1:51:A:ILE:N	1:51:A:ILE:CA	1:51:A:ILE:C	1:52:A:ALA:N	3	1.42
(1,18)	1:33:A:GLN:N	1:33:A:GLN:CA	1:33:A:GLN:C	1:34:A:SER:N	20	1.42
(1,260)	1:35:A:LEU:C	1:36:A:GLU:N	1:36:A:GLU:CA	1:36:A:GLU:C	19	1.41
(1,109)	1:130:A:ARG:C	1:131:A:ASN:N	1:131:A:ASN:CA	1:131:A:ASN:C	17	1.41
(1,147)	1:160:A:ALA:C	1:161:A:PHE:N	1:161:A:PHE:CA	1:161:A:PHE:C	7	1.4
(1,134)	1:150:A:ALA:N	1:150:A:ALA:CA	1:150:A:ALA:C	1:151:A:VAL:N	7	1.4
(1,112)	1:132:A:LEU:N	1:132:A:LEU:CA	1:132:A:LEU:C	1:133:A:SER:N	17	1.4
(1,43)	1:62:A:LEU:C	1:63:A:ASP:N	1:63:A:ASP:CA	1:63:A:ASP:C	10	1.4
(1,504)	1:159:A:ASN:N	1:159:A:ASN:CA	1:159:A:ASN:CB	1:159:A:ASN:CG	8	1.39
(1,456)	1:136:A:ILE:N	1:136:A:ILE:CA	1:136:A:ILE:CB	1:136:A:ILE:CG1	3	1.39
(1,151)	1:162:A:TYR:C	1:163:A:GLN:N	1:163:A:GLN:CA	1:163:A:GLN:C	8	1.38
(1,93)	1:97:A:TYR:C	1:98:A:TYR:N	1:98:A:TYR:CA	1:98:A:TYR:C	9	1.38
(1,229)	1:23:A:LEU:N	1:23:A:LEU:CA	1:23:A:LEU:CB	1:23:A:LEU:CG	3	1.37
(1,37)	1:59:A:GLY:C	1:60:A:GLY:N	1:60:A:GLY:CA	1:60:A:GLY:C	3	1.37
(1,41)	1:61:A:ILE:C	1:62:A:LEU:N	1:62:A:LEU:CA	1:62:A:LEU:C	14	1.36
(1,214)	1:18:A:PHE:N	1:18:A:PHE:CA	1:18:A:PHE:C	1:19:A:GLY:N	4	1.35
(1,80)	1:86:A:TYR:N	1:86:A:TYR:CA	1:86:A:TYR:C	1:87:A:THR:N	20	1.35
(1,54)	1:72:A:LYS:N	1:72:A:LYS:CA	1:72:A:LYS:C	1:73:A:HIS:N	9	1.35
(1,48)	1:68:A:ASN:N	1:68:A:ASN:CA	1:68:A:ASN:C	1:69:A:ARG:N	8	1.34
(1,390)	1:106:A:PRO:C	1:107:A:ASP:N	1:107:A:ASP:CA	1:107:A:ASP:C	3	1.31
(1,46)	1:67:A:GLU:N	1:67:A:GLU:CA	1:67:A:GLU:C	1:68:A:ASN:N	6	1.31
(1,109)	1:130:A:ARG:C	1:131:A:ASN:N	1:131:A:ASN:CA	1:131:A:ASN:C	15	1.3
(1,93)	1:97:A:TYR:C	1:98:A:TYR:N	1:98:A:TYR:CA	1:98:A:TYR:C	19	1.3
(1,54)	1:72:A:LYS:N	1:72:A:LYS:CA	1:72:A:LYS:C	1:73:A:HIS:N	12	1.28
(1,502)	1:158:A:GLU:N	1:158:A:GLU:CA	1:158:A:GLU:C	1:159:A:ASN:N	10	1.27
(1,219)	1:20:A:PHE:N	1:20:A:PHE:CA	1:20:A:PHE:C	1:21:A:LEU:N	15	1.27
(1,115)	1:133:A:SER:C	1:134:A:HIS:N	1:134:A:HIS:CA	1:134:A:HIS:C	14	1.27
(1,524)	1:171:A:ASN:C	1:172:A:LYS:N	1:172:A:LYS:CA	1:172:A:LYS:C	8	1.26
(1,172)	1:39:A:LYS:N	1:39:A:LYS:CA	1:39:A:LYS:C	1:40:A:GLY:N	20	1.26
(1,124)	1:145:A:TYR:N	1:145:A:TYR:CA	1:145:A:TYR:C	1:146:A:HIS:N	17	1.25
(1,82)	1:88:A:ALA:N	1:88:A:ALA:CA	1:88:A:ALA:C	1:89:A:PRO:N	5	1.24
(1,303)	1:63:A:ASP:N	1:63:A:ASP:CA	1:63:A:ASP:CB	1:63:A:ASP:CG	15	1.23
(1,112)	1:132:A:LEU:N	1:132:A:LEU:CA	1:132:A:LEU:C	1:133:A:SER:N	11	1.22

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,108)	1:130:A:ARG:N	1:130:A:ARG:CA	1:130:A:ARG:C	1:131:A:ASN:N	19	1.22
(1,73)	1:82:A:PHE:C	1:83:A:THR:N	1:83:A:THR:CA	1:83:A:THR:C	4	1.22
(1,54)	1:72:A:LYS:N	1:72:A:LYS:CA	1:72:A:LYS:C	1:73:A:HIS:N	19	1.22
(1,502)	1:158:A:GLU:N	1:158:A:GLU:CA	1:158:A:GLU:C	1:159:A:ASN:N	19	1.21
(1,144)	1:157:A:THR:N	1:157:A:THR:CA	1:157:A:THR:C	1:158:A:GLU:N	5	1.21
(1,149)	1:161:A:PHE:C	1:162:A:TYR:N	1:162:A:TYR:CA	1:162:A:TYR:C	8	1.19
(1,391)	1:107:A:ASP:N	1:107:A:ASP:CA	1:107:A:ASP:CB	1:107:A:ASP:CG	8	1.18
(1,256)	1:34:A:SER:N	1:34:A:SER:CA	1:34:A:SER:CB	1:34:A:SER:OG	10	1.18
(1,302)	1:62:A:LEU:CA	1:62:A:LEU:CB	1:62:A:LEU:CG	1:62:A:LEU:CD2	5	1.17
(1,99)	1:120:A:ALA:C	1:121:A:VAL:N	1:121:A:VAL:CA	1:121:A:VAL:C	6	1.17
(1,153)	1:163:A:GLN:C	1:164:A:VAL:N	1:164:A:VAL:CA	1:164:A:VAL:C	6	1.15
(1,227)	1:22:A:ASN:N	1:22:A:ASN:CA	1:22:A:ASN:C	1:23:A:LEU:N	12	1.14
(1,106)	1:129:A:SER:N	1:129:A:SER:CA	1:129:A:SER:C	1:130:A:ARG:N	2	1.14
(1,435)	1:122:A:PRO:N	1:122:A:PRO:CA	1:122:A:PRO:C	1:123:A:HIS:N	9	1.13
(1,321)	1:69:A:ARG:N	1:69:A:ARG:CA	1:69:A:ARG:CB	1:69:A:ARG:CG	3	1.11
(1,117)	1:134:A:HIS:C	1:135:A:HIS:N	1:135:A:HIS:CA	1:135:A:HIS:C	5	1.1
(1,1)	1:3:A:PHE:C	1:4:A:ILE:N	1:4:A:ILE:CA	1:4:A:ILE:C	14	1.1
(1,21)	1:36:A:GLU:C	1:37:A:ALA:N	1:37:A:ALA:CA	1:37:A:ALA:C	11	1.09
(1,189)	1:5:A:GLU:N	1:5:A:GLU:CA	1:5:A:GLU:C	1:6:A:LYS:N	1	1.08
(1,152)	1:163:A:GLN:N	1:163:A:GLN:CA	1:163:A:GLN:C	1:164:A:VAL:N	14	1.08
(1,391)	1:107:A:ASP:N	1:107:A:ASP:CA	1:107:A:ASP:CB	1:107:A:ASP:CG	16	1.07
(1,210)	1:17:A:ALA:N	1:17:A:ALA:CA	1:17:A:ALA:C	1:18:A:PHE:N	6	1.07
(1,291)	1:54:A:ALA:C	1:55:A:GLY:N	1:55:A:GLY:CA	1:55:A:GLY:C	18	1.06
(1,42)	1:62:A:LEU:N	1:62:A:LEU:CA	1:62:A:LEU:C	1:63:A:ASP:N	4	1.06
(1,154)	1:164:A:VAL:N	1:164:A:VAL:CA	1:164:A:VAL:C	1:165:A:ILE:N	1	1.05
(1,141)	1:155:A:ALA:C	1:156:A:ASP:N	1:156:A:ASP:CA	1:156:A:ASP:C	18	1.05
(1,26)	1:51:A:ILE:N	1:51:A:ILE:CA	1:51:A:ILE:C	1:52:A:ALA:N	6	1.05
(1,303)	1:63:A:ASP:N	1:63:A:ASP:CA	1:63:A:ASP:CB	1:63:A:ASP:CG	17	1.04
(1,23)	1:46:A:PRO:C	1:47:A:ALA:N	1:47:A:ALA:CA	1:47:A:ALA:C	3	1.04
(1,137)	1:151:A:VAL:C	1:152:A:TRP:N	1:152:A:TRP:CA	1:152:A:TRP:C	14	1.03
(1,502)	1:158:A:GLU:N	1:158:A:GLU:CA	1:158:A:GLU:C	1:159:A:ASN:N	4	1.02
(1,171)	1:38:A:LYS:C	1:39:A:LYS:N	1:39:A:LYS:CA	1:39:A:LYS:C	15	1.0
(1,124)	1:145:A:TYR:N	1:145:A:TYR:CA	1:145:A:TYR:C	1:146:A:HIS:N	3	1.0