



Full wwPDB NMR Structure Validation Report ⓘ

Mar 24, 2026 – 12:49 AM UTC

PDB ID : 8CX6 / pdb_00008cx6
BMRB ID : 31025
Title : TPX2 Minimal Active Domain on Microtubules
Authors : Guo, C.; Alfaro-Aco, R.; Russell, R.; Zhang, C.; Petry, S.; Polenova, T.
Deposited on : 2022-05-19

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

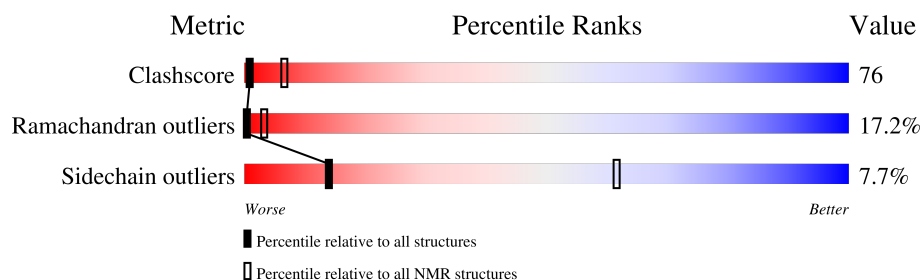
1 Overall quality at a glance

The following experimental techniques were used to determine the structure:

SOLID-STATE NMR

The overall completeness of chemical shifts assignment is 24%.

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



Metric	Whole archive (#Entries)	NMR archive (#Entries)
Clashscore	229148	14424
Ramachandran outliers	224038	12848
Sidechain outliers	223484	12823

The table below summarises the geometric issues observed across the polymeric chains and their fit to the experimental data. The red, orange, yellow and green segments indicate the fraction of residues that contain outliers for ≥ 3 , 2, 1 and 0 types of geometric quality criteria. A cyan segment indicates the fraction of residues that are not part of the well-defined cores, and a grey segment represents the fraction of residues that are not modelled. The numeric value for each fraction is indicated below the corresponding segment, with a dot representing fractions $\leq 5\%$.

Mol	Chain	Length	Quality of chain
1	A	240	23% 30% 28% 16% .

2 Ensemble composition and analysis

This entry contains 10 models. Model 2 is the overall representative, medoid model (most similar to other models). The authors have identified model 1 as representative, based on the following criterion: *medoid*.

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:479-A:707, A:713-A:716 (233)	2.04	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 2 clusters and 1 single-model cluster was found.

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

3 Entry composition [i](#)

There is only 1 type of molecule in this entry. The entry contains 4047 atoms, of which 2050 are hydrogens and 0 are deuteriums.

- Molecule 1 is a protein called Targeting protein for Xklp2-A.

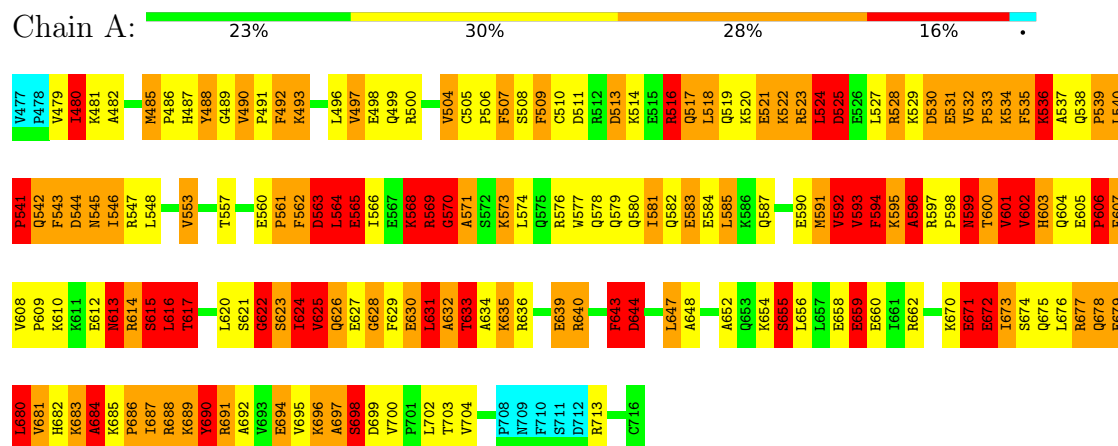
Mol	Chain	Residues	Atoms						Trace
1	A	240	Total	C	H	N	O	S	0
			4047	1255	2050	365	370	7	

4 Residue-property plots

4.1 Average score per residue in the NMR ensemble

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

- Molecule 1: Targeting protein for Xklp2-A

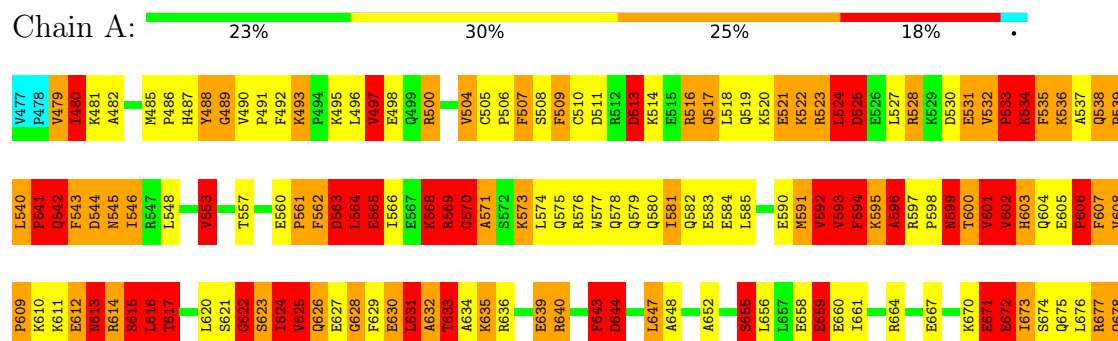


4.2 Scores per residue for each member of the ensemble

Colouring as in section 4.1 above.

4.2.1 Score per residue for model 1

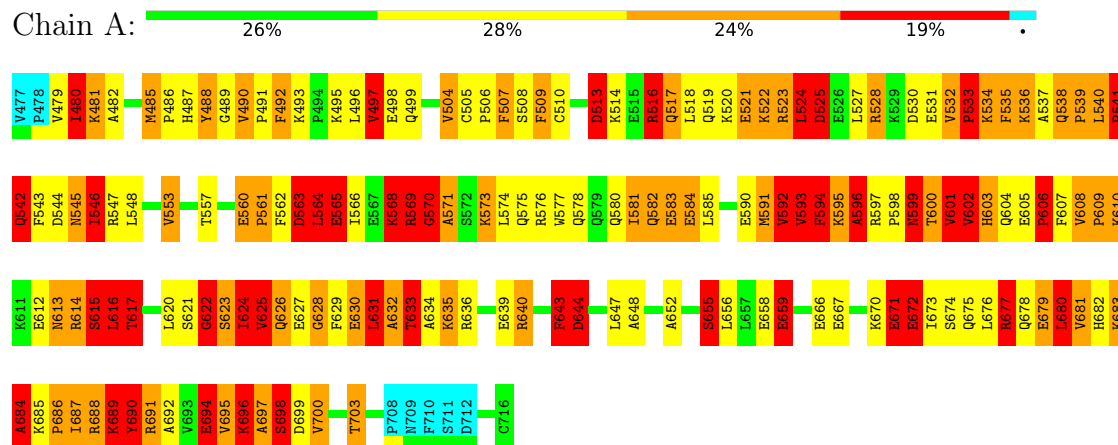
- Molecule 1: Targeting protein for Xklp2-A





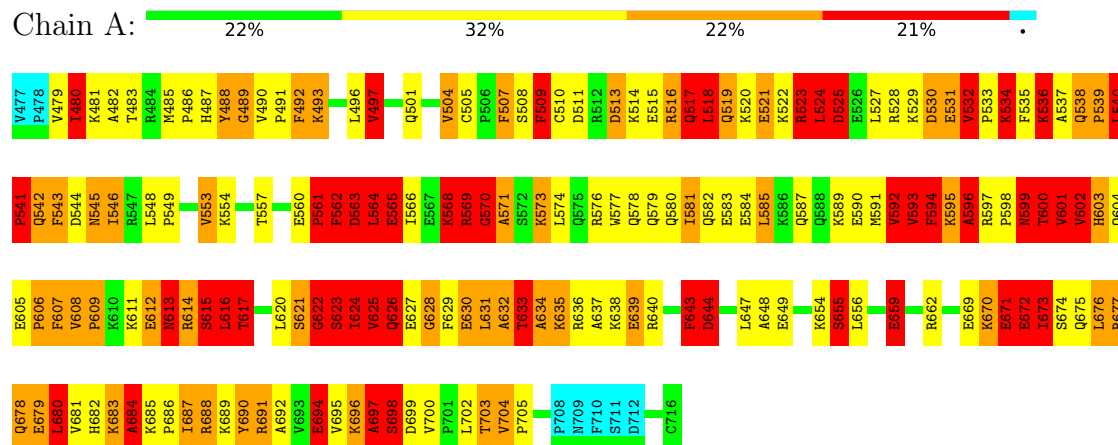
4.2.2 Score per residue for model 2 (medoid)

- Molecule 1: Targeting protein for Xklp2-A



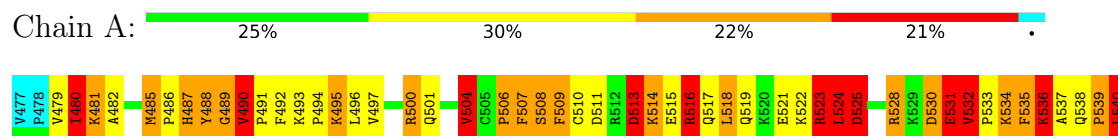
4.2.3 Score per residue for model 3

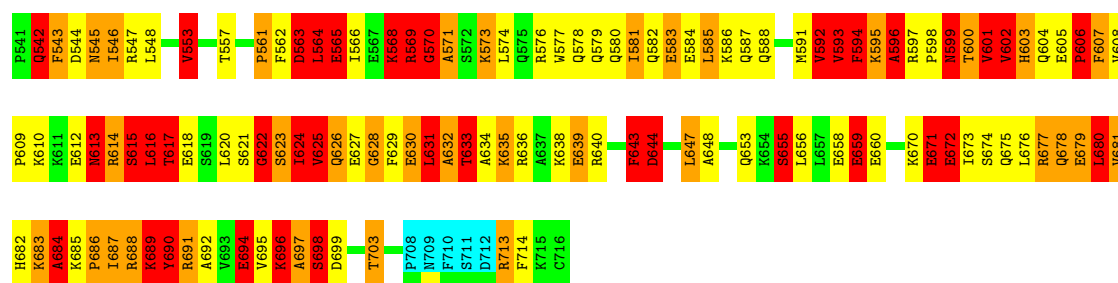
- Molecule 1: Targeting protein for Xklp2-A



4.2.4 Score per residue for model 4

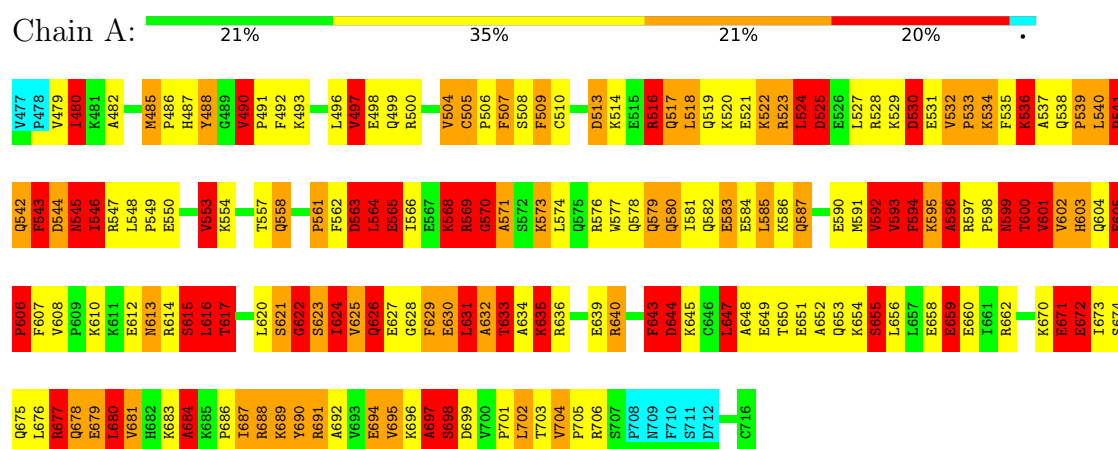
- Molecule 1: Targeting protein for Xklp2-A





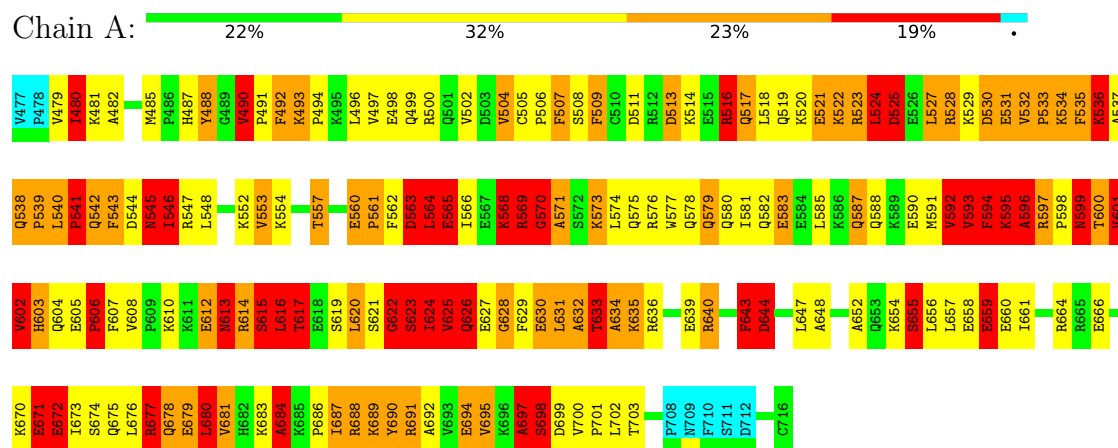
4.2.5 Score per residue for model 5

- Molecule 1: Targeting protein for Xklp2-A



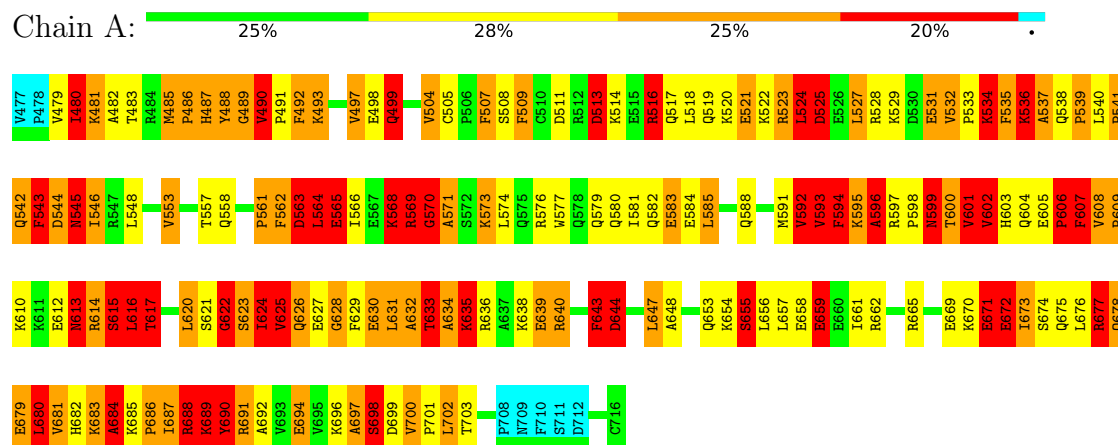
4.2.6 Score per residue for model 6

- Molecule 1: Targeting protein for Xklp2-A



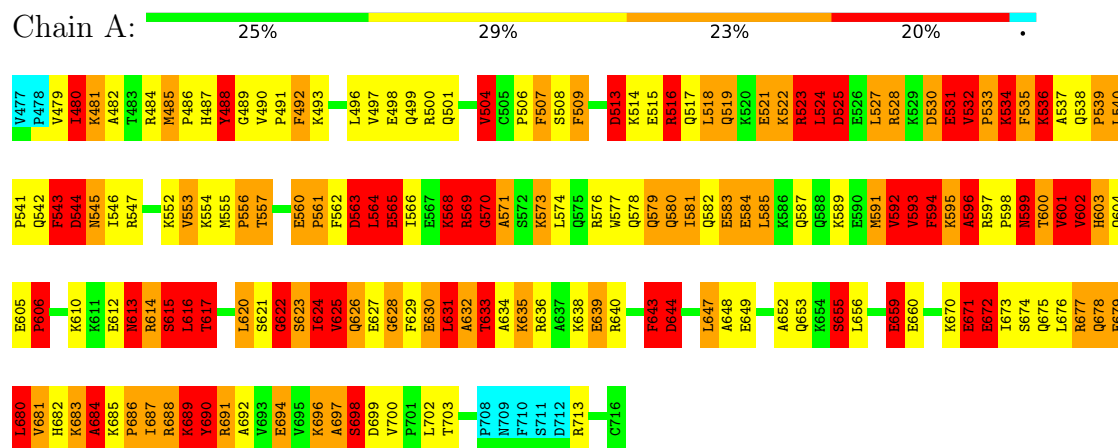
4.2.7 Score per residue for model 7

- Molecule 1: Targeting protein for Xklp2-A



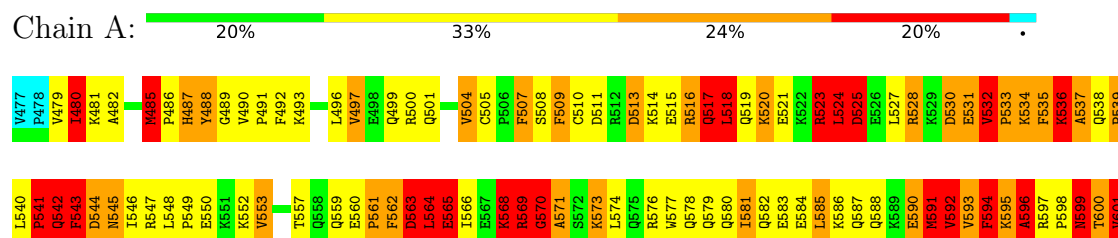
4.2.8 Score per residue for model 8

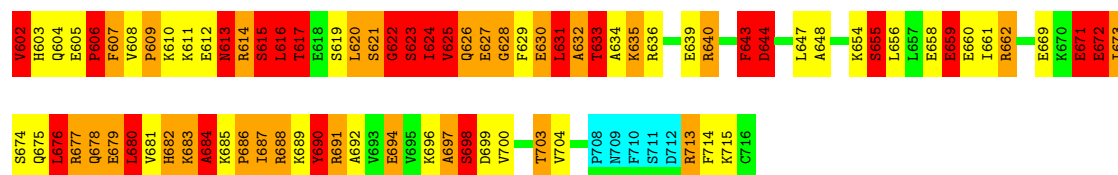
- Molecule 1: Targeting protein for Xklp2-A



4.2.9 Score per residue for model 9

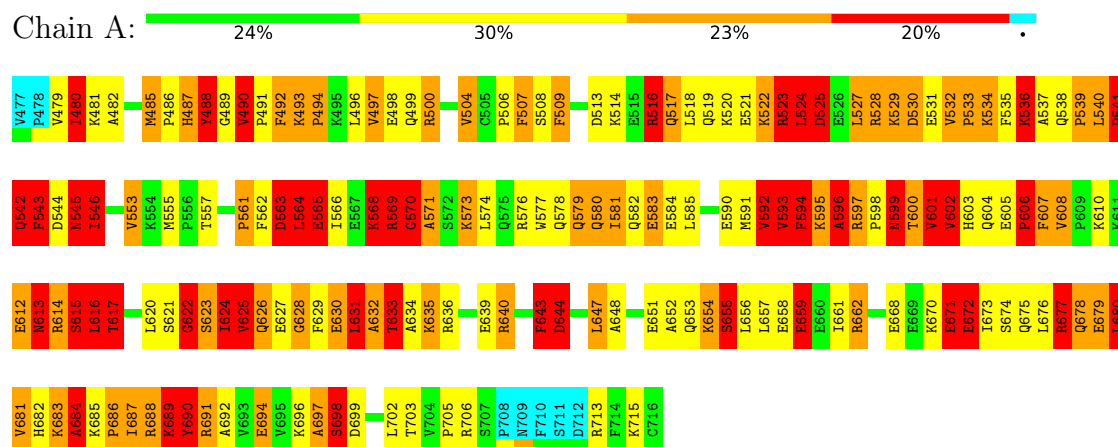
- Molecule 1: Targeting protein for Xklp2-A





4.2.10 Score per residue for model 10

- Molecule 1: Targeting protein for Xklp2-A



5 Refinement protocol and experimental data overview

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

Of the 100 calculated structures, 10 were deposited, based on the following criterion: *structures with the lowest energy*.

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

Software name	Classification	Version
X-PLOR NIH	structure calculation	
X-PLOR NIH	refinement	

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

Chemical shift file(s)	working_cs.cif
Number of chemical shift lists	1
Total number of shifts	851
Number of shifts mapped to atoms	851
Number of unparsed shifts	0
Number of shifts with mapping errors	0
Number of shifts with mapping warnings	0
Assignment completeness (well-defined parts)	24%

Note: This is a solid-state NMR structure, where hydrogen atoms are typically not assigned a chemical shift value, which may lead to lower completeness of assignment measure.

6 Model quality

6.1 Standard geometry

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	1.44±0.03	22±3/1976 (1.1± 0.2%)	2.21±0.02	97±3/2644 (3.7± 0.1%)
All	All	1.44	224/19760 (1.1%)	2.21	971/26440 (3.7%)

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

Mol	Chain	Chirality	Planarity
1	A	0.0±0.0	60.0±1.3
All	All	0	600

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	623	SER	C-N	-15.19	1.17	1.33	5	9
1	A	581	ILE	C-N	10.87	1.47	1.33	9	7
1	A	594	PHE	C-N	10.87	1.48	1.33	3	7
1	A	672	GLU	C-N	10.06	1.46	1.33	2	8
1	A	480	ILE	C-N	9.61	1.47	1.33	1	10
1	A	626	GLN	C-N	-9.49	1.20	1.33	10	9
1	A	542	GLN	CA-C	-9.38	1.46	1.52	2	3
1	A	591	MET	C-N	9.07	1.46	1.33	9	4
1	A	593	VAL	C-N	8.32	1.45	1.33	7	6
1	A	518	LEU	C-N	-7.89	1.23	1.33	4	3
1	A	545	ASN	N-CA	-7.81	1.36	1.46	7	1
1	A	516	ARG	C-N	7.71	1.44	1.33	7	7
1	A	563	ASP	C-N	7.68	1.43	1.33	9	10
1	A	603	HIS	CA-C	-7.53	1.45	1.53	5	2
1	A	689	LYS	C-N	7.36	1.44	1.33	10	6
1	A	517	GLN	C-N	-7.11	1.24	1.33	1	7

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)	Models	
								Worst	Total
1	A	535	PHE	CA-C	-7.08	1.43	1.52	9	2
1	A	616	LEU	C-N	7.05	1.43	1.33	6	10
1	A	521	GLU	C-N	-7.03	1.24	1.33	10	6
1	A	488	TYR	CA-C	-6.98	1.45	1.53	4	5
1	A	628	GLY	C-O	-6.95	1.17	1.23	6	1
1	A	489	GLY	C-N	6.92	1.41	1.33	7	5
1	A	531	GLU	C-N	6.91	1.41	1.33	4	2
1	A	625	VAL	C-N	-6.89	1.25	1.33	2	8
1	A	531	GLU	CA-CB	6.77	1.62	1.53	9	1
1	A	543	PHE	N-CA	-6.63	1.41	1.46	9	1
1	A	562	PHE	C-N	-6.57	1.24	1.33	3	1
1	A	535	PHE	C-O	-6.42	1.16	1.23	4	1
1	A	534	LYS	CA-C	-6.39	1.44	1.52	7	3
1	A	676	LEU	C-N	6.23	1.43	1.33	3	2
1	A	595	LYS	C-N	6.10	1.42	1.33	10	2
1	A	535	PHE	N-CA	-6.09	1.38	1.46	7	5
1	A	673	ILE	C-N	6.07	1.41	1.33	1	2
1	A	635	LYS	C-N	6.05	1.41	1.33	5	8
1	A	536	LYS	N-CA	-5.97	1.40	1.46	8	2
1	A	628	GLY	CA-C	-5.94	1.45	1.51	2	4
1	A	624	ILE	C-N	5.93	1.41	1.33	10	3
1	A	599	ASN	C-N	5.91	1.42	1.33	3	5
1	A	534	LYS	N-CA	-5.81	1.39	1.46	1	2
1	A	492	PHE	CA-C	-5.79	1.47	1.53	1	3
1	A	533	PRO	CA-C	-5.75	1.44	1.52	1	4
1	A	579	GLN	C-N	5.75	1.41	1.33	10	1
1	A	520	LYS	C-N	-5.71	1.26	1.33	9	1
1	A	543	PHE	CA-C	-5.67	1.50	1.53	9	3
1	A	697	ALA	C-N	5.65	1.41	1.33	4	7
1	A	680	LEU	C-N	5.58	1.41	1.33	4	3
1	A	607	PHE	C-N	5.54	1.39	1.33	7	2
1	A	545	ASN	C-N	5.44	1.41	1.33	5	1
1	A	606	PRO	C-N	5.42	1.41	1.33	8	1
1	A	493	LYS	N-CA	-5.41	1.42	1.46	1	1
1	A	698	SER	C-N	5.39	1.42	1.33	10	3
1	A	537	ALA	N-CA	-5.38	1.39	1.46	7	2
1	A	694	GLU	C-N	5.33	1.39	1.33	8	3
1	A	488	TYR	N-CA	-5.24	1.40	1.46	2	1
1	A	544	ASP	CA-C	-5.24	1.46	1.53	7	1
1	A	544	ASP	N-CA	-5.18	1.39	1.46	5	1
1	A	546	ILE	CA-CB	-5.17	1.47	1.55	3	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)	Models	
								Worst	Total
1	A	486	PRO	C-N	5.15	1.40	1.33	7	1
1	A	678	GLN	C-N	5.13	1.40	1.33	6	1
1	A	621	SER	C-N	-5.07	1.26	1.33	3	2
1	A	522	LYS	C-N	5.03	1.41	1.33	2	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	672	GLU	O-C-N	-21.00	94.66	122.59	2	10
1	A	698	SER	O-C-N	-18.34	98.19	122.59	2	10
1	A	680	LEU	O-C-N	-17.34	99.73	122.61	8	10
1	A	616	LEU	O-C-N	-17.09	104.52	122.64	2	10
1	A	697	ALA	O-C-N	-17.03	99.94	122.59	1	10
1	A	684	ALA	O-C-N	-16.51	100.63	122.59	9	10
1	A	606	PRO	CA-C-N	-16.50	95.05	122.11	3	10
1	A	606	PRO	C-N-CA	-16.50	95.05	122.11	3	10
1	A	635	LYS	O-C-N	-15.59	102.41	122.37	7	10
1	A	592	VAL	O-C-N	-15.28	103.48	122.57	6	10
1	A	628	GLY	N-CA-C	-14.92	92.13	112.57	6	9
1	A	694	GLU	O-C-N	-14.80	102.90	122.59	10	10
1	A	536	LYS	N-CA-C	-14.74	95.92	112.72	10	10
1	A	553	VAL	O-C-N	-14.41	104.56	122.57	1	10
1	A	644	ASP	O-C-N	-13.84	104.19	122.59	7	10
1	A	671	GLU	O-C-N	-13.80	104.23	122.59	3	10
1	A	504	VAL	O-C-N	-13.78	105.34	122.57	4	10
1	A	534	LYS	N-CA-C	-13.35	89.96	109.59	4	9
1	A	596	ALA	O-C-N	-13.00	109.76	121.85	6	10
1	A	615	SER	O-C-N	-12.67	105.74	122.59	5	10
1	A	594	PHE	O-C-N	-12.61	105.82	122.59	5	10
1	A	626	GLN	O-C-N	-12.46	112.19	123.41	7	9
1	A	601	VAL	O-C-N	-12.39	107.08	122.57	3	10
1	A	525	ASP	O-C-N	-12.39	106.11	122.59	7	10
1	A	524	LEU	O-C-N	-12.16	106.42	122.59	3	10
1	A	623	SER	CA-C-N	-11.97	107.51	122.48	3	10
1	A	623	SER	C-N-CA	-11.97	107.51	122.48	3	10
1	A	633	THR	O-C-N	-11.89	106.77	122.59	7	10
1	A	617	THR	O-C-N	-11.88	106.79	122.59	8	10
1	A	565	GLU	O-C-N	11.14	136.23	122.20	8	10
1	A	655	SER	O-C-N	-11.09	107.84	122.59	5	10
1	A	532	VAL	N-CA-C	-10.84	85.46	108.88	8	10

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)	Models	
								Worst	Total
1	A	593	VAL	O-C-N	-10.72	109.17	122.57	6	4
1	A	595	LYS	CA-C-N	-10.49	103.87	121.08	7	10
1	A	595	LYS	C-N-CA	-10.49	103.87	121.08	7	10
1	A	564	LEU	O-C-N	-10.46	110.01	122.46	2	10
1	A	594	PHE	CA-C-N	-10.13	109.45	123.03	8	9
1	A	594	PHE	C-N-CA	-10.13	109.45	123.03	8	9
1	A	613	ASN	CA-C-N	-9.76	107.13	120.90	4	9
1	A	613	ASN	C-N-CA	-9.76	107.13	120.90	4	9
1	A	626	GLN	CA-C-N	-9.72	107.52	121.42	10	10
1	A	626	GLN	C-N-CA	-9.72	107.52	121.42	10	10
1	A	676	LEU	CA-C-N	-9.67	108.27	121.71	6	10
1	A	676	LEU	C-N-CA	-9.67	108.27	121.71	6	10
1	A	624	ILE	O-C-N	-9.37	111.66	122.62	5	10
1	A	676	LEU	O-C-N	-9.31	112.25	122.12	1	10
1	A	510	CYS	N-CA-C	-9.25	102.14	113.97	4	5
1	A	545	ASN	N-CA-C	-9.12	102.29	113.97	9	2
1	A	488	TYR	N-CA-CB	9.02	122.75	110.57	3	9
1	A	623	SER	O-C-N	-8.99	112.54	122.79	1	8
1	A	643	PHE	O-C-N	-8.84	110.84	122.59	6	10
1	A	628	GLY	CA-C-N	-8.80	108.99	120.44	6	8
1	A	628	GLY	C-N-CA	-8.80	108.99	120.44	6	8
1	A	631	LEU	O-C-N	-8.67	106.74	122.34	5	7
1	A	522	LYS	CA-C-N	-8.63	107.33	122.26	1	7
1	A	522	LYS	C-N-CA	-8.63	107.33	122.26	1	7
1	A	628	GLY	O-C-N	-8.59	113.75	122.86	6	3
1	A	622	GLY	O-C-N	-8.36	111.83	122.70	6	10
1	A	523	ARG	O-C-N	-8.26	111.60	122.42	4	5
1	A	570	GLY	O-C-N	-8.26	111.97	122.70	5	10
1	A	628	GLY	CA-C-O	-8.05	113.39	122.33	6	3
1	A	490	VAL	N-CA-C	-7.99	98.97	107.84	6	4
1	A	594	PHE	CA-CB-CG	7.86	121.66	113.80	8	10
1	A	533	PRO	N-CA-C	7.76	122.89	110.40	5	1
1	A	614	ARG	O-C-N	-7.72	113.37	122.87	9	9
1	A	569	ARG	O-C-N	-7.71	112.34	122.59	7	10
1	A	519	GLN	CA-C-N	7.50	130.66	120.38	3	1
1	A	519	GLN	C-N-CA	7.50	130.66	120.38	3	1
1	A	687	ILE	CA-C-N	-7.47	110.30	122.26	5	10
1	A	687	ILE	C-N-CA	-7.47	110.30	122.26	5	10
1	A	678	GLN	O-C-N	7.47	132.11	122.10	1	9
1	A	522	LYS	O-C-N	-7.25	114.44	122.12	5	7
1	A	516	ARG	O-C-N	-7.24	112.96	122.59	4	4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)	Models	
								Worst	Total
1	A	565	GLU	CA-C-N	7.19	131.96	121.18	8	10
1	A	565	GLU	C-N-CA	7.19	131.96	121.18	8	10
1	A	480	ILE	O-C-N	-7.13	113.65	122.57	2	6
1	A	568	LYS	O-C-N	-7.10	113.14	122.59	5	10
1	A	561	PRO	CA-C-N	-6.97	112.82	122.93	3	1
1	A	561	PRO	C-N-CA	-6.97	112.82	122.93	3	1
1	A	563	ASP	O-C-N	-6.91	112.50	121.83	3	10
1	A	543	PHE	N-CA-C	-6.88	104.03	113.18	10	3
1	A	625	VAL	CA-C-N	6.87	134.87	122.09	1	7
1	A	625	VAL	C-N-CA	6.87	134.87	122.09	1	7
1	A	488	TYR	CA-CB-CG	-6.87	101.53	113.90	3	2
1	A	603	HIS	N-CA-C	-6.77	100.44	110.46	8	7
1	A	606	PRO	O-C-N	-6.69	113.61	122.64	7	5
1	A	521	GLU	O-C-N	-6.68	115.04	122.12	9	3
1	A	638	LYS	O-C-N	6.64	129.26	122.09	3	4
1	A	546	ILE	N-CA-C	6.59	117.24	110.05	6	1
1	A	602	VAL	O-C-N	-6.56	114.37	122.57	4	9
1	A	492	PHE	CA-C-N	-6.55	116.28	122.37	5	3
1	A	492	PHE	C-N-CA	-6.55	116.28	122.37	5	3
1	A	562	PHE	CA-C-N	-6.52	110.81	123.13	3	2
1	A	562	PHE	C-N-CA	-6.52	110.81	123.13	3	2
1	A	600	THR	CA-C-N	-6.52	110.24	121.97	5	2
1	A	600	THR	C-N-CA	-6.52	110.24	121.97	5	2
1	A	513	ASP	N-CA-C	-6.49	104.29	111.82	3	10
1	A	613	ASN	O-C-N	-6.41	112.49	121.72	4	9
1	A	624	ILE	CA-C-N	-6.39	110.47	121.97	8	9
1	A	624	ILE	C-N-CA	-6.39	110.47	121.97	8	9
1	A	687	ILE	O-C-N	-6.37	116.49	123.18	3	2
1	A	688	ARG	O-C-N	-6.32	114.04	122.38	8	8
1	A	647	LEU	O-C-N	-6.27	113.81	122.46	5	6
1	A	597	ARG	O-C-N	6.25	128.51	121.32	6	2
1	A	532	VAL	N-CA-CB	6.22	119.92	111.21	9	3
1	A	518	LEU	O-C-N	-6.21	114.33	122.59	9	2
1	A	595	LYS	O-C-N	-6.14	114.29	122.28	3	1
1	A	497	VAL	N-CA-C	-6.14	99.45	108.54	10	3
1	A	584	GLU	N-CA-C	-6.12	105.52	112.87	8	2
1	A	544	ASP	N-CA-CB	6.07	119.12	110.44	7	1
1	A	677	ARG	CA-C-N	-6.06	112.01	122.79	10	7
1	A	677	ARG	C-N-CA	-6.06	112.01	122.79	10	7
1	A	581	ILE	O-C-N	-6.04	115.61	121.83	8	2
1	A	487	HIS	CB-CA-C	-6.00	101.46	110.88	9	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)	Models	
								Worst	Total
1	A	535	PHE	N-CA-C	5.91	117.65	109.15	2	2
1	A	541	PRO	N-CA-CB	-5.90	97.05	103.25	9	2
1	A	579	GLN	O-C-N	-5.90	115.86	122.12	6	5
1	A	631	LEU	CA-C-N	-5.89	110.23	122.07	5	1
1	A	631	LEU	C-N-CA	-5.89	110.23	122.07	5	1
1	A	542	GLN	N-CA-C	-5.88	105.11	112.93	1	1
1	A	505	CYS	CA-C-N	-5.88	113.14	120.79	5	3
1	A	505	CYS	C-N-CA	-5.88	113.14	120.79	5	3
1	A	497	VAL	N-CA-CB	5.88	120.93	111.23	1	3
1	A	684	ALA	CA-C-N	-5.86	108.61	122.31	6	2
1	A	684	ALA	C-N-CA	-5.86	108.61	122.31	6	2
1	A	603	HIS	CA-CB-CG	5.85	119.65	113.80	6	1
1	A	492	PHE	CA-CB-CG	-5.82	107.98	113.80	7	1
1	A	514	LYS	O-C-N	-5.79	116.07	122.09	4	1
1	A	599	ASN	O-C-N	-5.77	114.91	122.59	9	3
1	A	515	GLU	O-C-N	5.77	128.73	122.15	9	3
1	A	677	ARG	O-C-N	-5.74	116.18	122.38	1	2
1	A	690	TYR	O-C-N	-5.72	114.98	122.59	10	7
1	A	640	ARG	O-C-N	-5.70	116.16	122.09	6	7
1	A	554	LYS	N-CA-C	-5.68	106.27	113.43	5	2
1	A	632	ALA	O-C-N	-5.67	116.59	122.94	5	1
1	A	532	VAL	CA-C-N	5.63	126.88	119.84	6	3
1	A	532	VAL	C-N-CA	5.63	126.88	119.84	6	3
1	A	622	GLY	CA-C-N	-5.61	112.13	120.94	6	3
1	A	622	GLY	C-N-CA	-5.61	112.13	120.94	6	3
1	A	601	VAL	CA-C-N	-5.60	111.88	121.97	5	1
1	A	601	VAL	C-N-CA	-5.60	111.88	121.97	5	1
1	A	561	PRO	N-CA-C	-5.59	106.25	113.57	9	1
1	A	612	GLU	O-C-N	-5.54	114.94	122.19	6	4
1	A	681	VAL	CA-C-N	-5.54	115.00	122.86	8	1
1	A	681	VAL	C-N-CA	-5.54	115.00	122.86	8	1
1	A	603	HIS	CA-C-N	-5.47	111.09	121.54	3	1
1	A	603	HIS	C-N-CA	-5.47	111.09	121.54	3	1
1	A	695	VAL	CA-C-O	-5.46	113.95	120.78	6	2
1	A	488	TYR	N-CA-C	-5.43	99.11	108.56	10	3
1	A	535	PHE	CA-CB-CG	-5.43	108.37	113.80	7	1
1	A	494	PRO	N-CA-C	-5.42	106.65	114.18	6	1
1	A	697	ALA	CA-C-N	-5.41	111.20	121.54	9	3
1	A	697	ALA	C-N-CA	-5.41	111.20	121.54	9	3
1	A	536	LYS	CA-C-O	5.41	124.44	118.65	8	1
1	A	479	VAL	N-CA-C	5.40	115.67	108.11	8	10

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)	Models	
								Worst	Total
1	A	531	GLU	N-CA-CB	5.40	117.51	109.19	1	2
1	A	537	ALA	N-CA-C	-5.40	99.30	110.80	9	1
1	A	621	SER	O-C-N	5.37	131.00	122.41	5	1
1	A	544	ASP	N-CA-C	5.33	118.26	109.85	8	1
1	A	515	GLU	CA-C-N	5.28	130.81	120.99	9	1
1	A	515	GLU	C-N-CA	5.28	130.81	120.99	9	1
1	A	696	LYS	CA-C-N	-5.27	111.47	121.54	4	4
1	A	696	LYS	C-N-CA	-5.27	111.47	121.54	4	4
1	A	545	ASN	N-CA-CB	5.25	119.37	110.49	10	1
1	A	605	GLU	O-C-N	-5.23	115.31	121.32	5	1
1	A	614	ARG	CA-C-N	-5.21	111.59	121.54	9	4
1	A	614	ARG	C-N-CA	-5.21	111.59	121.54	9	4
1	A	543	PHE	CA-C-O	5.21	120.96	117.94	9	1
1	A	531	GLU	CB-CA-C	-5.20	104.28	110.94	7	1
1	A	659	GLU	O-C-N	-5.20	115.68	122.59	3	3
1	A	487	HIS	CA-CB-CG	-5.20	108.60	113.80	9	1
1	A	543	PHE	N-CA-CB	5.19	119.27	110.49	5	1
1	A	479	VAL	O-C-N	-5.18	117.67	123.26	4	1
1	A	695	VAL	CA-C-N	-5.17	111.66	121.54	5	2
1	A	695	VAL	C-N-CA	-5.17	111.66	121.54	5	2
1	A	673	ILE	O-C-N	-5.17	115.38	122.26	3	1
1	A	508	SER	O-C-N	-5.16	116.85	122.84	4	1
1	A	487	HIS	ND1-CG-CD2	5.16	111.25	106.10	4	1
1	A	635	LYS	CA-C-N	-5.15	112.38	121.81	5	1
1	A	635	LYS	C-N-CA	-5.15	112.38	121.81	5	1
1	A	600	THR	O-C-N	-5.14	115.62	122.20	5	1
1	A	612	GLU	CA-C-N	-5.14	113.01	122.31	10	1
1	A	612	GLU	C-N-CA	-5.14	113.01	122.31	10	1
1	A	544	ASP	CA-CB-CG	-5.12	107.48	112.60	8	1
1	A	519	GLN	O-C-N	5.10	127.33	122.07	8	1
1	A	507	PHE	O-C-N	5.05	128.65	121.83	1	1
1	A	529	LYS	N-CA-C	-5.01	105.81	111.28	10	1
1	A	490	VAL	N-CA-CB	5.01	118.23	111.21	7	1
1	A	637	ALA	O-C-N	-5.01	116.72	122.08	3	1

There are no chirality outliers.

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	480	ILE	Mainchain	10

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Group	Models (Total)
1	A	504	VAL	Mainchain	10
1	A	507	PHE	Mainchain	10
1	A	516	ARG	Mainchain	10
1	A	523	ARG	Mainchain	10
1	A	524	LEU	Mainchain	10
1	A	525	ASP	Mainchain	10
1	A	553	VAL	Mainchain	10
1	A	563	ASP	Mainchain	10
1	A	564	LEU	Mainchain	10
1	A	565	GLU	Mainchain	10
1	A	568	LYS	Mainchain	10
1	A	569	ARG	Mainchain	10
1	A	570	GLY	Mainchain	10
1	A	573	LYS	Mainchain	10
1	A	592	VAL	Mainchain	10
1	A	593	VAL	Mainchain	10
1	A	594	PHE	Mainchain,Peptide	10
1	A	596	ALA	Mainchain	10
1	A	599	ASN	Mainchain	10
1	A	600	THR	Mainchain	10
1	A	601	VAL	Mainchain	10
1	A	602	VAL	Mainchain	10
1	A	613	ASN	Mainchain	10
1	A	615	SER	Mainchain	10
1	A	616	LEU	Mainchain	10
1	A	617	THR	Mainchain	10
1	A	622	GLY	Mainchain	10
1	A	624	ILE	Mainchain	10
1	A	625	VAL	Mainchain	10
1	A	630	GLU	Mainchain,Peptide	10
1	A	631	LEU	Mainchain	10
1	A	633	THR	Mainchain	10
1	A	635	LYS	Mainchain	10
1	A	643	PHE	Mainchain	10
1	A	644	ASP	Mainchain	10
1	A	655	SER	Mainchain	10
1	A	659	GLU	Mainchain	10
1	A	671	GLU	Mainchain	10
1	A	672	GLU	Mainchain	10
1	A	677	ARG	Mainchain	10
1	A	680	LEU	Mainchain	10
1	A	684	ALA	Mainchain	10

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Group	Models (Total)
1	A	686	PRO	Mainchain	10
1	A	688	ARG	Mainchain	10
1	A	690	TYR	Mainchain	10
1	A	694	GLU	Mainchain	10
1	A	697	ALA	Mainchain	10
1	A	698	SER	Mainchain	10
1	A	606	PRO	Mainchain	9
1	A	632	ALA	Mainchain	9
1	A	683	LYS	Mainchain	8
1	A	689	LYS	Mainchain	8
1	A	506	PRO	Mainchain	7
1	A	607	PHE	Mainchain	7
1	A	681	VAL	Mainchain	7
1	A	583	GLU	Mainchain	7
1	A	513	ASP	Mainchain	5
1	A	639	GLU	Mainchain	5
1	A	580	GLN	Mainchain	4
1	A	562	PHE	Mainchain	3
1	A	623	SER	Mainchain	3
1	A	626	GLN	Mainchain	3
1	A	517	GLN	Mainchain	2
1	A	518	LEU	Mainchain	2
1	A	673	ILE	Mainchain	2
1	A	479	VAL	Mainchain	1
1	A	505	CYS	Mainchain	1
1	A	582	GLN	Mainchain	1
1	A	670	LYS	Mainchain	1
1	A	605	GLU	Mainchain	1
1	A	629	PHE	Mainchain	1
1	A	647	LEU	Mainchain	1
1	A	595	LYS	Mainchain	1
1	A	591	MET	Mainchain	1
1	A	627	GLU	Mainchain	1
1	A	676	LEU	Mainchain	1
1	A	682	HIS	Mainchain	1
1	A	654	LYS	Mainchain	1

6.2 Too-close contacts

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

averaged over the ensemble.

Mol	Chain	Non-H	H(model)	H(added)	Clashes
1	A	1943	2001	2003	300±12
All	All	19430	20010	20030	2996

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 76.

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

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:532:VAL:HG12	1:A:577:TRP:CZ2	1.07	1.84	9	1
1:A:487:HIS:CG	1:A:488:TYR:H	0.97	1.77	2	4
1:A:497:VAL:HG12	1:A:539:PRO:HA	0.96	1.35	10	5
1:A:532:VAL:HG11	1:A:565:GLU:OE2	0.95	1.61	9	5
1:A:487:HIS:CG	1:A:488:TYR:N	0.94	2.36	2	8
1:A:585:LEU:HD23	1:A:587:GLN:H	0.94	1.22	6	1
1:A:507:PHE:CD2	1:A:536:LYS:HA	0.92	1.99	9	2
1:A:532:VAL:HG13	1:A:577:TRP:CZ2	0.92	1.99	6	6
1:A:487:HIS:CD2	1:A:488:TYR:H	0.92	1.83	2	6
1:A:523:ARG:HA	1:A:546:ILE:HG23	0.91	1.39	5	3
1:A:487:HIS:CE1	1:A:488:TYR:HB3	0.87	2.04	2	2
1:A:557:THR:HG21	1:A:563:ASP:OD1	0.86	1.70	2	2
1:A:487:HIS:CD2	1:A:544:ASP:C	0.85	2.54	1	3
1:A:486:PRO:HB2	1:A:546:ILE:HD13	0.85	1.45	3	1
1:A:603:HIS:CD2	1:A:626:GLN:HE21	0.84	1.91	5	1
1:A:492:PHE:CE2	1:A:557:THR:HG22	0.84	2.07	7	1
1:A:523:ARG:NE	1:A:532:VAL:HG23	0.83	1.88	8	3
1:A:497:VAL:HG12	1:A:539:PRO:CA	0.82	2.04	2	5
1:A:591:MET:C	1:A:593:VAL:H	0.81	1.84	1	10
1:A:561:PRO:HG2	1:A:562:PHE:H	0.80	1.36	6	8
1:A:535:PHE:HB3	1:A:537:ALA:HB3	0.80	1.53	10	3
1:A:487:HIS:O	1:A:490:VAL:HG22	0.79	1.77	1	1
1:A:523:ARG:HD3	1:A:532:VAL:H	0.79	1.37	5	5
1:A:594:PHE:CE2	1:A:603:HIS:CD2	0.79	2.70	2	5
1:A:492:PHE:CE2	1:A:557:THR:HG23	0.79	2.11	2	3
1:A:487:HIS:CD2	1:A:546:ILE:N	0.79	2.51	5	2
1:A:535:PHE:CG	1:A:537:ALA:HB3	0.79	2.12	1	4
1:A:671:GLU:C	1:A:673:ILE:H	0.78	1.84	9	10
1:A:522:LYS:HD3	1:A:545:ASN:H	0.78	1.38	7	1
1:A:577:TRP:CZ2	1:A:581:ILE:HG13	0.78	2.13	9	9
1:A:486:PRO:O	1:A:490:VAL:HG13	0.77	1.77	1	1
1:A:535:PHE:CD2	1:A:537:ALA:HB3	0.77	2.15	8	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:593:VAL:CG1	1:A:625:VAL:O	0.77	2.33	4	8
1:A:593:VAL:CG1	1:A:626:GLN:HB2	0.77	2.10	7	3
1:A:487:HIS:CD2	1:A:541:PRO:HB2	0.77	2.14	7	1
1:A:487:HIS:CD2	1:A:488:TYR:N	0.77	2.52	1	7
1:A:594:PHE:CD2	1:A:603:HIS:CG	0.77	2.72	2	6
1:A:585:LEU:HD21	1:A:604:GLN:NE2	0.76	1.95	10	2
1:A:593:VAL:C	1:A:595:LYS:H	0.76	1.88	7	6
1:A:594:PHE:CD2	1:A:626:GLN:OE1	0.76	2.39	7	3
1:A:527:LEU:HB2	1:A:546:ILE:HG22	0.76	1.56	5	2
1:A:490:VAL:HG22	1:A:491:PRO:HD2	0.75	1.55	6	8
1:A:488:TYR:CE1	1:A:557:THR:HG22	0.75	2.15	3	1
1:A:497:VAL:HG11	1:A:542:GLN:HA	0.75	1.55	9	1
1:A:602:VAL:O	1:A:624:ILE:CD1	0.75	2.35	8	10
1:A:585:LEU:HD21	1:A:604:GLN:HG3	0.75	1.59	2	2
1:A:523:ARG:HE	1:A:532:VAL:HG23	0.75	1.42	8	1
1:A:492:PHE:CD2	1:A:557:THR:HG23	0.74	2.15	2	2
1:A:596:ALA:C	1:A:597:ARG:HG2	0.74	2.07	6	10
1:A:540:LEU:HD12	1:A:542:GLN:HE22	0.74	1.40	4	1
1:A:497:VAL:HB	1:A:540:LEU:H	0.74	1.42	6	1
1:A:487:HIS:HA	1:A:490:VAL:HG12	0.74	1.56	7	1
1:A:603:HIS:CE1	1:A:627:GLU:O	0.73	2.41	2	5
1:A:523:ARG:HH22	1:A:530:ASP:H	0.73	1.24	8	4
1:A:488:TYR:CZ	1:A:543:PHE:HA	0.73	2.18	8	1
1:A:624:ILE:C	1:A:626:GLN:H	0.73	1.91	8	10
1:A:492:PHE:CD2	1:A:557:THR:HG22	0.72	2.18	7	1
1:A:480:ILE:O	1:A:482:ALA:N	0.72	2.23	4	10
1:A:535:PHE:CZ	1:A:544:ASP:CB	0.72	2.73	1	2
1:A:603:HIS:CE1	1:A:604:GLN:OE1	0.72	2.43	9	6
1:A:535:PHE:CZ	1:A:543:PHE:CD1	0.72	2.78	3	3
1:A:487:HIS:CE1	1:A:546:ILE:O	0.72	2.43	2	3
1:A:593:VAL:C	1:A:595:LYS:N	0.72	2.48	7	10
1:A:480:ILE:HA	1:A:540:LEU:HD22	0.72	1.60	4	2
1:A:566:ILE:HB	1:A:570:GLY:H	0.71	1.45	9	8
1:A:482:ALA:H	1:A:518:LEU:HD13	0.71	1.45	1	3
1:A:591:MET:O	1:A:593:VAL:N	0.71	2.23	2	7
1:A:582:GLN:HE21	1:A:591:MET:HG3	0.71	1.44	9	3
1:A:490:VAL:HG21	1:A:522:LYS:NZ	0.71	2.01	5	5
1:A:616:LEU:HD12	1:A:631:LEU:CD1	0.71	2.16	5	1
1:A:523:ARG:CD	1:A:532:VAL:HG23	0.70	2.17	10	5
1:A:543:PHE:CE2	1:A:700:VAL:HG12	0.70	2.20	8	2
1:A:482:ALA:N	1:A:518:LEU:CD1	0.70	2.55	8	7

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:488:TYR:CE1	1:A:563:ASP:HB3	0.70	2.22	1	5
1:A:533:PRO:CD	1:A:581:ILE:HG21	0.70	2.17	7	5
1:A:585:LEU:HD13	1:A:605:GLU:CG	0.70	2.17	6	1
1:A:540:LEU:HD12	1:A:540:LEU:O	0.69	1.85	10	1
1:A:561:PRO:CG	1:A:562:PHE:H	0.69	1.99	6	8
1:A:689:LYS:HA	1:A:703:THR:HG22	0.69	1.64	7	6
1:A:535:PHE:CE2	1:A:544:ASP:HB3	0.69	2.22	1	1
1:A:488:TYR:CD1	1:A:563:ASP:CB	0.69	2.75	3	1
1:A:487:HIS:CE1	1:A:488:TYR:HB2	0.69	2.21	5	2
1:A:543:PHE:CE1	1:A:581:ILE:HD11	0.69	2.23	7	3
1:A:523:ARG:CA	1:A:546:ILE:HG23	0.69	2.17	5	1
1:A:537:ALA:HB1	1:A:660:GLU:HG3	0.69	1.64	8	1
1:A:487:HIS:CG	1:A:546:ILE:HG23	0.68	2.23	2	1
1:A:533:PRO:HD2	1:A:577:TRP:CZ2	0.68	2.23	8	2
1:A:523:ARG:HD2	1:A:532:VAL:HG23	0.68	1.64	10	2
1:A:487:HIS:CG	1:A:541:PRO:HB2	0.68	2.24	7	1
1:A:704:VAL:HG22	1:A:705:PRO:HD2	0.68	1.66	3	2
1:A:492:PHE:CD1	1:A:557:THR:HG22	0.68	2.23	4	1
1:A:585:LEU:HD23	1:A:587:GLN:N	0.68	2.02	6	1
1:A:678:GLN:O	1:A:680:LEU:N	0.68	2.26	2	10
1:A:487:HIS:HA	1:A:490:VAL:CG1	0.68	2.19	7	1
1:A:534:LYS:H	1:A:606:PRO:HB3	0.68	1.49	9	1
1:A:496:LEU:HD13	1:A:698:SER:HB2	0.67	1.66	2	1
1:A:487:HIS:CE1	1:A:488:TYR:CB	0.67	2.77	2	3
1:A:532:VAL:HB	1:A:545:ASN:HA	0.67	1.67	7	1
1:A:487:HIS:CE1	1:A:546:ILE:C	0.67	2.72	1	2
1:A:497:VAL:HG21	1:A:539:PRO:HB2	0.67	1.65	4	3
1:A:594:PHE:CD2	1:A:603:HIS:CD2	0.67	2.82	4	5
1:A:577:TRP:CZ2	1:A:581:ILE:HB	0.67	2.25	5	5
1:A:593:VAL:HG12	1:A:625:VAL:O	0.67	1.90	7	5
1:A:492:PHE:CE2	1:A:557:THR:CG2	0.67	2.78	7	1
1:A:488:TYR:CD1	1:A:563:ASP:HB2	0.66	2.25	3	1
1:A:508:SER:C	1:A:509:PHE:CD2	0.66	2.73	7	3
1:A:497:VAL:HG11	1:A:542:GLN:CA	0.66	2.20	9	1
1:A:540:LEU:HD23	1:A:540:LEU:H	0.66	1.51	4	4
1:A:531:GLU:OE1	1:A:533:PRO:HA	0.66	1.90	7	1
1:A:632:ALA:O	1:A:633:THR:C	0.66	2.35	5	10
1:A:490:VAL:HG21	1:A:522:LYS:HZ1	0.66	1.51	5	2
1:A:689:LYS:CB	1:A:703:THR:HG22	0.66	2.21	1	3
1:A:487:HIS:CG	1:A:545:ASN:CB	0.66	2.79	6	2
1:A:488:TYR:O	1:A:548:LEU:HD13	0.66	1.90	1	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:624:ILE:HG22	1:A:626:GLN:O	0.66	1.91	7	10
1:A:603:HIS:CD2	1:A:626:GLN:NE2	0.66	2.63	5	1
1:A:519:GLN:H	1:A:541:PRO:CG	0.66	2.04	9	1
1:A:516:ARG:CG	1:A:534:LYS:HZ1	0.66	2.04	2	1
1:A:697:ALA:HB2	1:A:702:LEU:HD12	0.65	1.68	3	1
1:A:627:GLU:HG2	1:A:628:GLY:O	0.65	1.91	6	9
1:A:679:GLU:C	1:A:681:VAL:N	0.65	2.54	2	10
1:A:493:LYS:CE	1:A:542:GLN:HE21	0.65	2.04	5	2
1:A:582:GLN:HE21	1:A:591:MET:CG	0.65	2.05	1	3
1:A:535:PHE:CZ	1:A:544:ASP:HB3	0.65	2.25	2	2
1:A:497:VAL:HG11	1:A:542:GLN:HB2	0.65	1.68	3	1
1:A:578:GLN:HE21	1:A:595:LYS:HE2	0.65	1.50	5	1
1:A:519:GLN:HG2	1:A:534:LYS:HA	0.65	1.68	7	1
1:A:487:HIS:CD2	1:A:546:ILE:HG13	0.65	2.27	10	1
1:A:482:ALA:H	1:A:518:LEU:CD1	0.65	2.04	1	7
1:A:585:LEU:HD11	1:A:604:GLN:HG2	0.65	1.66	6	1
1:A:671:GLU:C	1:A:673:ILE:N	0.65	2.54	9	10
1:A:518:LEU:CD1	1:A:540:LEU:HD22	0.65	2.21	3	1
1:A:580:GLN:HB2	1:A:681:VAL:CG2	0.65	2.22	7	3
1:A:480:ILE:HD11	1:A:497:VAL:HG23	0.65	1.69	7	1
1:A:509:PHE:CD1	1:A:509:PHE:N	0.65	2.65	8	6
1:A:540:LEU:HD23	1:A:540:LEU:N	0.65	2.07	4	3
1:A:523:ARG:HH22	1:A:530:ASP:N	0.65	1.90	8	1
1:A:519:GLN:HE22	1:A:540:LEU:HA	0.65	1.52	8	4
1:A:532:VAL:HG13	1:A:577:TRP:HZ2	0.64	1.49	7	6
1:A:520:LYS:HB2	1:A:534:LYS:HZ3	0.64	1.51	5	2
1:A:601:VAL:HG23	1:A:612:GLU:CD	0.64	2.18	10	7
1:A:605:GLU:HB2	1:A:606:PRO:CD	0.64	2.22	4	8
1:A:577:TRP:CE3	1:A:591:MET:CE	0.64	2.80	8	2
1:A:487:HIS:CE1	1:A:543:PHE:C	0.64	2.76	8	3
1:A:497:VAL:CB	1:A:539:PRO:HA	0.64	2.23	5	2
1:A:519:GLN:OE1	1:A:535:PHE:CB	0.64	2.46	4	3
1:A:543:PHE:C	1:A:543:PHE:CD1	0.64	2.76	1	3
1:A:523:ARG:CD	1:A:532:VAL:H	0.64	2.06	5	1
1:A:516:ARG:O	1:A:518:LEU:N	0.64	2.31	7	9
1:A:602:VAL:O	1:A:624:ILE:HD11	0.64	1.92	3	8
1:A:672:GLU:O	1:A:673:ILE:C	0.64	2.39	2	9
1:A:519:GLN:OE1	1:A:531:GLU:CD	0.64	2.41	7	1
1:A:534:LYS:NZ	1:A:607:PHE:H	0.64	1.91	7	1
1:A:538:GLN:O	1:A:539:PRO:C	0.63	2.41	6	3
1:A:487:HIS:CD2	1:A:542:GLN:O	0.63	2.52	3	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:582:GLN:HA	1:A:585:LEU:HD23	0.63	1.69	8	1
1:A:687:ILE:HG22	1:A:703:THR:HG22	0.63	1.70	3	1
1:A:535:PHE:CZ	1:A:544:ASP:HB2	0.63	2.29	1	1
1:A:482:ALA:HB2	1:A:540:LEU:HD22	0.63	1.69	10	1
1:A:535:PHE:CD1	1:A:537:ALA:HB3	0.63	2.29	1	2
1:A:487:HIS:CD2	1:A:492:PHE:CD2	0.63	2.86	3	1
1:A:487:HIS:CE1	1:A:565:GLU:HG3	0.63	2.29	6	2
1:A:490:VAL:HG12	1:A:541:PRO:O	0.63	1.94	10	3
1:A:509:PHE:CE1	1:A:652:ALA:HB1	0.63	2.29	5	6
1:A:599:ASN:HB2	1:A:621:SER:O	0.63	1.94	9	10
1:A:593:VAL:CG2	1:A:625:VAL:O	0.63	2.47	6	5
1:A:482:ALA:N	1:A:518:LEU:HD11	0.63	2.09	4	3
1:A:539:PRO:O	1:A:540:LEU:C	0.63	2.42	7	9
1:A:535:PHE:CD1	1:A:537:ALA:HB2	0.63	2.29	6	1
1:A:523:ARG:NH1	1:A:530:ASP:C	0.63	2.57	1	6
1:A:599:ASN:CG	1:A:612:GLU:HA	0.63	2.19	6	8
1:A:490:VAL:HG12	1:A:542:GLN:HA	0.62	1.70	4	1
1:A:519:GLN:HB3	1:A:535:PHE:O	0.62	1.93	4	1
1:A:519:GLN:HE22	1:A:540:LEU:CA	0.62	2.07	8	2
1:A:487:HIS:CD2	1:A:546:ILE:H	0.62	2.11	6	1
1:A:488:TYR:H	1:A:544:ASP:HB3	0.62	1.55	7	1
1:A:487:HIS:CE1	1:A:488:TYR:CD2	0.62	2.87	8	2
1:A:535:PHE:CE2	1:A:537:ALA:HB3	0.62	2.29	8	1
1:A:675:GLN:HG2	1:A:689:LYS:CD	0.62	2.24	9	1
1:A:577:TRP:CZ2	1:A:581:ILE:CB	0.62	2.82	5	6
1:A:538:GLN:HE21	1:A:699:ASP:HB3	0.62	1.55	8	1
1:A:523:ARG:HH12	1:A:530:ASP:N	0.62	1.92	2	4
1:A:535:PHE:C	1:A:537:ALA:H	0.62	2.00	10	5
1:A:585:LEU:HD12	1:A:604:GLN:NE2	0.62	2.10	5	1
1:A:497:VAL:CG1	1:A:539:PRO:HA	0.62	2.24	2	5
1:A:570:GLY:O	1:A:571:ALA:C	0.62	2.41	9	10
1:A:532:VAL:HA	1:A:577:TRP:CZ2	0.62	2.29	1	3
1:A:675:GLN:HG2	1:A:689:LYS:HD2	0.62	1.72	3	2
1:A:536:LYS:HB2	1:A:656:LEU:HD22	0.62	1.72	9	1
1:A:480:ILE:O	1:A:540:LEU:HD23	0.61	1.95	2	1
1:A:585:LEU:HD12	1:A:659:GLU:HA	0.61	1.72	6	3
1:A:543:PHE:CD1	1:A:562:PHE:CE1	0.61	2.88	6	2
1:A:543:PHE:CZ	1:A:581:ILE:HD11	0.61	2.30	7	3
1:A:487:HIS:CE1	1:A:488:TYR:CG	0.61	2.88	8	2
1:A:532:VAL:HG22	1:A:577:TRP:CZ2	0.61	2.29	7	3
1:A:480:ILE:HG22	1:A:518:LEU:HD12	0.61	1.71	6	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:487:HIS:CG	1:A:541:PRO:O	0.61	2.53	7	1
1:A:628:GLY:O	1:A:629:PHE:C	0.61	2.37	3	8
1:A:538:GLN:HG3	1:A:543:PHE:CE2	0.61	2.30	2	2
1:A:591:MET:HA	1:A:626:GLN:HE22	0.61	1.55	1	2
1:A:679:GLU:O	1:A:681:VAL:N	0.61	2.29	3	7
1:A:522:LYS:C	1:A:546:ILE:HG22	0.61	2.20	2	2
1:A:519:GLN:OE1	1:A:535:PHE:HB3	0.61	1.95	4	2
1:A:531:GLU:HB3	1:A:594:PHE:CE1	0.61	2.30	9	1
1:A:519:GLN:OE1	1:A:535:PHE:HB2	0.61	1.96	1	5
1:A:516:ARG:HG3	1:A:519:GLN:HG3	0.61	1.72	4	1
1:A:532:VAL:HG12	1:A:535:PHE:CE2	0.61	2.30	7	2
1:A:522:LYS:HZ2	1:A:541:PRO:CB	0.61	2.09	10	1
1:A:605:GLU:HG2	1:A:659:GLU:CD	0.60	2.21	1	5
1:A:532:VAL:HG12	1:A:544:ASP:OD2	0.60	1.96	8	1
1:A:532:VAL:HA	1:A:577:TRP:CH2	0.60	2.30	9	1
1:A:523:ARG:NH1	1:A:532:VAL:H	0.60	1.94	9	2
1:A:604:GLN:O	1:A:656:LEU:CD2	0.60	2.48	7	1
1:A:580:GLN:HB2	1:A:681:VAL:HG21	0.60	1.71	2	5
1:A:541:PRO:HG2	1:A:545:ASN:HD22	0.60	1.56	8	2
1:A:594:PHE:CD2	1:A:626:GLN:NE2	0.60	2.69	6	3
1:A:602:VAL:HG23	1:A:624:ILE:HD11	0.60	1.72	5	2
1:A:508:SER:C	1:A:509:PHE:CG	0.60	2.77	7	3
1:A:540:LEU:O	1:A:541:PRO:C	0.60	2.44	10	6
1:A:602:VAL:O	1:A:624:ILE:HD13	0.60	1.97	5	8
1:A:522:LYS:HZ2	1:A:541:PRO:HB2	0.60	1.56	10	1
1:A:538:GLN:HE21	1:A:538:GLN:N	0.60	1.95	3	1
1:A:616:LEU:CD1	1:A:631:LEU:HG	0.60	2.26	9	4
1:A:603:HIS:CE1	1:A:626:GLN:HG2	0.60	2.32	10	5
1:A:482:ALA:N	1:A:518:LEU:HD13	0.60	2.12	1	3
1:A:573:LYS:O	1:A:576:ARG:N	0.60	2.35	1	10
1:A:488:TYR:CG	1:A:563:ASP:CB	0.60	2.85	3	1
1:A:601:VAL:O	1:A:606:PRO:CG	0.60	2.50	5	5
1:A:519:GLN:CG	1:A:534:LYS:HA	0.60	2.26	7	1
1:A:580:GLN:H	1:A:681:VAL:HG21	0.60	1.57	8	1
1:A:616:LEU:CD1	1:A:631:LEU:HD21	0.59	2.27	8	7
1:A:534:LYS:H	1:A:534:LYS:HD2	0.59	1.56	7	1
1:A:519:GLN:H	1:A:541:PRO:HG2	0.59	1.56	9	1
1:A:557:THR:HG21	1:A:563:ASP:CG	0.59	2.22	7	1
1:A:614:ARG:O	1:A:615:SER:C	0.59	2.44	6	10
1:A:480:ILE:CG2	1:A:518:LEU:HD13	0.59	2.27	9	1
1:A:616:LEU:HD13	1:A:631:LEU:HD11	0.59	1.72	9	9

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:679:GLU:C	1:A:681:VAL:H	0.59	2.05	2	7
1:A:514:LYS:O	1:A:517:GLN:HG3	0.59	1.98	10	9
1:A:488:TYR:CG	1:A:563:ASP:HB2	0.59	2.32	3	1
1:A:564:LEU:HD13	1:A:573:LYS:HG3	0.59	1.74	5	2
1:A:516:ARG:O	1:A:517:GLN:C	0.59	2.44	6	8
1:A:562:PHE:HB2	1:A:564:LEU:CG	0.59	2.27	10	10
1:A:488:TYR:CE2	1:A:548:LEU:HD23	0.59	2.32	5	1
1:A:569:ARG:O	1:A:573:LYS:HG2	0.59	1.98	5	10
1:A:603:HIS:CG	1:A:626:GLN:NE2	0.59	2.71	5	2
1:A:532:VAL:HG12	1:A:577:TRP:CE2	0.59	2.30	9	1
1:A:535:PHE:CE2	1:A:544:ASP:CB	0.59	2.85	1	2
1:A:487:HIS:CD2	1:A:545:ASN:N	0.59	2.71	4	1
1:A:493:LYS:HG2	1:A:497:VAL:HG12	0.59	1.75	9	1
1:A:488:TYR:C	1:A:488:TYR:CD2	0.58	2.78	1	1
1:A:488:TYR:CZ	1:A:563:ASP:HB3	0.58	2.32	6	4
1:A:596:ALA:C	1:A:597:ARG:CG	0.58	2.76	3	10
1:A:630:GLU:O	1:A:632:ALA:N	0.58	2.36	5	10
1:A:487:HIS:HE2	1:A:565:GLU:CB	0.58	2.10	1	1
1:A:673:ILE:O	1:A:674:SER:C	0.58	2.46	8	10
1:A:488:TYR:CE2	1:A:566:ILE:HD11	0.58	2.33	3	1
1:A:538:GLN:H	1:A:538:GLN:NE2	0.58	1.96	3	1
1:A:593:VAL:HG21	1:A:626:GLN:HB2	0.58	1.74	6	4
1:A:487:HIS:CE1	1:A:543:PHE:N	0.58	2.70	8	1
1:A:509:PHE:CZ	1:A:656:LEU:HD12	0.58	2.33	8	7
1:A:624:ILE:O	1:A:632:ALA:HA	0.58	1.98	6	9
1:A:585:LEU:HD11	1:A:604:GLN:HE21	0.58	1.57	8	1
1:A:487:HIS:HB2	1:A:541:PRO:HB3	0.58	1.74	6	4
1:A:577:TRP:CZ3	1:A:591:MET:HE1	0.58	2.33	9	3
1:A:487:HIS:CE1	1:A:545:ASN:N	0.58	2.72	5	2
1:A:535:PHE:CE2	1:A:543:PHE:CE1	0.58	2.92	3	1
1:A:490:VAL:HG11	1:A:522:LYS:NZ	0.58	2.13	1	3
1:A:561:PRO:HG2	1:A:562:PHE:CD2	0.58	2.33	8	5
1:A:600:THR:HG22	1:A:622:GLY:CA	0.58	2.28	5	9
1:A:543:PHE:CD1	1:A:543:PHE:C	0.58	2.81	6	1
1:A:493:LYS:HZ1	1:A:543:PHE:HA	0.58	1.59	9	1
1:A:562:PHE:HB2	1:A:564:LEU:HG	0.58	1.76	10	8
1:A:698:SER:OG	1:A:699:ASP:N	0.58	2.37	5	10
1:A:540:LEU:N	1:A:540:LEU:HD12	0.58	2.13	3	1
1:A:616:LEU:CD1	1:A:631:LEU:HD12	0.58	2.29	5	1
1:A:523:ARG:HE	1:A:606:PRO:CB	0.58	2.12	7	1
1:A:497:VAL:HG23	1:A:498:GLU:N	0.58	2.12	1	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:594:PHE:CE2	1:A:603:HIS:CG	0.58	2.92	1	2
1:A:673:ILE:HD13	1:A:677:ARG:HH21	0.58	1.58	9	7
1:A:593:VAL:HG11	1:A:626:GLN:HB2	0.58	1.75	6	7
1:A:487:HIS:H	1:A:546:ILE:HG21	0.58	1.59	3	1
1:A:630:GLU:HB2	1:A:643:PHE:CE1	0.58	2.34	3	2
1:A:497:VAL:HG22	1:A:499:GLN:H	0.58	1.58	5	1
1:A:615:SER:CA	1:A:631:LEU:HD11	0.58	2.28	5	1
1:A:487:HIS:CG	1:A:543:PHE:O	0.58	2.57	9	1
1:A:690:TYR:C	1:A:692:ALA:H	0.58	2.07	10	10
1:A:616:LEU:HD11	1:A:631:LEU:CG	0.57	2.28	1	7
1:A:509:PHE:CE2	1:A:516:ARG:NH1	0.57	2.72	7	3
1:A:532:VAL:HG12	1:A:577:TRP:CH2	0.57	2.32	9	1
1:A:584:GLU:HB3	1:A:659:GLU:O	0.57	1.99	3	1
1:A:542:GLN:NE2	1:A:543:PHE:CD2	0.57	2.73	5	2
1:A:541:PRO:HG3	1:A:545:ASN:HD22	0.57	1.58	3	2
1:A:661:ILE:O	1:A:662:ARG:CB	0.57	2.52	10	2
1:A:509:PHE:CZ	1:A:652:ALA:HB1	0.57	2.34	8	3
1:A:580:GLN:HA	1:A:681:VAL:HG21	0.57	1.76	1	2
1:A:582:GLN:CG	1:A:591:MET:SD	0.57	2.92	2	2
1:A:608:VAL:HG23	1:A:609:PRO:HD2	0.57	1.76	4	1
1:A:603:HIS:CE1	1:A:627:GLU:HB3	0.57	2.35	5	1
1:A:497:VAL:HG12	1:A:539:PRO:C	0.57	2.24	7	2
1:A:612:GLU:O	1:A:614:ARG:N	0.57	2.37	6	9
1:A:562:PHE:CZ	1:A:580:GLN:HB3	0.57	2.34	3	1
1:A:520:LYS:CD	1:A:608:VAL:HG21	0.57	2.30	6	1
1:A:486:PRO:HG2	1:A:548:LEU:HD11	0.57	1.77	7	1
1:A:530:ASP:OD2	1:A:594:PHE:HB2	0.57	2.00	10	1
1:A:616:LEU:CD1	1:A:631:LEU:CD1	0.57	2.81	5	1
1:A:605:GLU:O	1:A:656:LEU:CD2	0.57	2.53	5	3
1:A:530:ASP:HB3	1:A:594:PHE:O	0.57	2.00	6	1
1:A:519:GLN:HE22	1:A:540:LEU:N	0.57	1.97	8	1
1:A:532:VAL:HG21	1:A:565:GLU:OE2	0.57	1.98	1	2
1:A:578:GLN:O	1:A:582:GLN:HB2	0.57	2.00	3	8
1:A:647:LEU:O	1:A:648:ALA:C	0.57	2.47	5	10
1:A:523:ARG:HA	1:A:546:ILE:CG2	0.57	2.30	4	3
1:A:515:GLU:HG3	1:A:540:LEU:HD21	0.57	1.77	3	1
1:A:580:GLN:HE21	1:A:701:PRO:HD2	0.57	1.60	5	1
1:A:580:GLN:N	1:A:681:VAL:HG21	0.57	2.15	9	2
1:A:593:VAL:HG12	1:A:626:GLN:HB2	0.56	1.77	7	1
1:A:634:ALA:C	1:A:636:ARG:H	0.56	2.07	1	10
1:A:487:HIS:HE2	1:A:565:GLU:HG3	0.56	1.60	4	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:585:LEU:HD13	1:A:605:GLU:HG2	0.56	1.76	6	1
1:A:493:LYS:CE	1:A:542:GLN:CD	0.56	2.78	10	1
1:A:523:ARG:HB2	1:A:545:ASN:C	0.56	2.24	1	5
1:A:561:PRO:CG	1:A:562:PHE:N	0.56	2.68	6	9
1:A:536:LYS:HE2	1:A:536:LYS:H	0.56	1.60	5	2
1:A:487:HIS:CE1	1:A:546:ILE:N	0.56	2.73	4	1
1:A:497:VAL:HG12	1:A:542:GLN:CG	0.56	2.29	4	1
1:A:508:SER:HB2	1:A:653:GLN:HE22	0.56	1.60	4	3
1:A:527:LEU:CB	1:A:546:ILE:HG22	0.56	2.31	5	2
1:A:534:LYS:H	1:A:534:LYS:CD	0.56	2.13	7	2
1:A:594:PHE:HB2	1:A:601:VAL:HA	0.56	1.76	5	2
1:A:701:PRO:O	1:A:703:THR:HG23	0.56	2.00	7	3
1:A:532:VAL:CG1	1:A:577:TRP:CZ2	0.56	2.78	9	1
1:A:563:ASP:O	1:A:565:GLU:N	0.56	2.39	10	10
1:A:533:PRO:HD2	1:A:581:ILE:HG21	0.56	1.77	7	2
1:A:486:PRO:HA	1:A:522:LYS:HE2	0.56	1.77	7	1
1:A:562:PHE:CE2	1:A:580:GLN:HB3	0.56	2.34	3	1
1:A:607:PHE:CB	1:A:656:LEU:HD21	0.56	2.30	9	3
1:A:534:LYS:HZ2	1:A:608:VAL:CG2	0.56	2.14	5	1
1:A:548:LEU:HD12	1:A:548:LEU:C	0.56	2.25	5	1
1:A:492:PHE:CE2	1:A:542:GLN:O	0.56	2.59	2	1
1:A:616:LEU:HG	1:A:623:SER:HA	0.56	1.78	8	7
1:A:488:TYR:H	1:A:546:ILE:HG12	0.56	1.60	3	1
1:A:490:VAL:HG22	1:A:491:PRO:CD	0.56	2.30	3	4
1:A:523:ARG:HH12	1:A:531:GLU:HA	0.56	1.60	3	1
1:A:616:LEU:HD13	1:A:631:LEU:CD1	0.56	2.30	9	2
1:A:604:GLN:O	1:A:656:LEU:HD23	0.56	2.00	7	3
1:A:530:ASP:C	1:A:595:LYS:HE2	0.56	2.25	9	1
1:A:616:LEU:HD11	1:A:631:LEU:HG	0.56	1.75	6	8
1:A:487:HIS:CD2	1:A:487:HIS:H	0.56	2.17	2	2
1:A:509:PHE:CD2	1:A:516:ARG:NH1	0.56	2.74	7	4
1:A:533:PRO:HB2	1:A:535:PHE:CD2	0.56	2.35	3	1
1:A:573:LYS:NZ	1:A:684:ALA:HB2	0.56	2.16	6	2
1:A:523:ARG:HA	1:A:546:ILE:HG22	0.56	1.77	1	2
1:A:605:GLU:CB	1:A:606:PRO:CD	0.56	2.84	4	7
1:A:674:SER:HA	1:A:679:GLU:OE1	0.56	2.01	1	6
1:A:523:ARG:NH1	1:A:531:GLU:HA	0.56	2.16	5	3
1:A:580:GLN:CA	1:A:681:VAL:HG21	0.56	2.31	1	2
1:A:582:GLN:NE2	1:A:591:MET:SD	0.56	2.78	2	3
1:A:562:PHE:CD1	1:A:564:LEU:HB2	0.56	2.36	6	5
1:A:585:LEU:HD13	1:A:604:GLN:HG3	0.56	1.78	4	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:487:HIS:CE1	1:A:543:PHE:H	0.56	2.19	8	1
1:A:675:GLN:HE22	1:A:690:TYR:HA	0.55	1.61	5	4
1:A:507:PHE:CZ	1:A:537:ALA:O	0.55	2.58	8	2
1:A:523:ARG:HH12	1:A:530:ASP:C	0.55	2.08	5	4
1:A:585:LEU:HD13	1:A:659:GLU:HA	0.55	1.77	2	2
1:A:685:LYS:O	1:A:686:PRO:C	0.55	2.49	7	7
1:A:487:HIS:CG	1:A:545:ASN:HB3	0.55	2.35	6	1
1:A:533:PRO:CD	1:A:581:ILE:CG2	0.55	2.84	7	1
1:A:577:TRP:CE3	1:A:591:MET:SD	0.55	2.99	7	2
1:A:531:GLU:H	1:A:595:LYS:HE2	0.55	1.61	8	1
1:A:573:LYS:O	1:A:574:LEU:C	0.55	2.49	6	7
1:A:615:SER:O	1:A:617:THR:HG23	0.55	2.01	9	10
1:A:623:SER:O	1:A:625:VAL:N	0.55	2.39	7	5
1:A:603:HIS:CD2	1:A:604:GLN:OE1	0.55	2.59	4	3
1:A:704:VAL:HG22	1:A:705:PRO:CD	0.55	2.31	5	2
1:A:499:GLN:HB3	1:A:505:CYS:SG	0.55	2.42	5	1
1:A:622:GLY:O	1:A:623:SER:C	0.55	2.48	1	7
1:A:523:ARG:HB2	1:A:546:ILE:HA	0.55	1.77	3	1
1:A:598:PRO:O	1:A:599:ASN:C	0.55	2.50	9	10
1:A:481:LYS:HA	1:A:540:LEU:HD13	0.55	1.79	3	1
1:A:487:HIS:ND1	1:A:544:ASP:HA	0.55	2.17	3	1
1:A:535:PHE:CE1	1:A:544:ASP:O	0.55	2.60	5	2
1:A:508:SER:C	1:A:509:PHE:CD1	0.55	2.85	10	5
1:A:598:PRO:O	1:A:600:THR:N	0.55	2.40	6	5
1:A:603:HIS:ND1	1:A:627:GLU:O	0.55	2.38	3	3
1:A:490:VAL:HG21	1:A:522:LYS:HZ3	0.55	1.62	6	1
1:A:522:LYS:NZ	1:A:541:PRO:CB	0.55	2.70	7	1
1:A:488:TYR:CE1	1:A:562:PHE:O	0.55	2.60	8	1
1:A:487:HIS:HD2	1:A:544:ASP:C	0.55	2.05	1	2
1:A:543:PHE:O	1:A:565:GLU:CG	0.55	2.55	1	3
1:A:609:PRO:HA	1:A:613:ASN:H	0.55	1.62	3	2
1:A:497:VAL:HG12	1:A:542:GLN:HG3	0.55	1.79	4	1
1:A:546:ILE:HD12	1:A:547:ARG:H	0.55	1.62	5	1
1:A:601:VAL:O	1:A:606:PRO:HG2	0.55	2.01	6	10
1:A:531:GLU:N	1:A:595:LYS:HE2	0.55	2.17	8	3
1:A:616:LEU:HD13	1:A:631:LEU:CG	0.55	2.32	9	2
1:A:513:ASP:OD1	1:A:516:ARG:NE	0.55	2.39	7	2
1:A:522:LYS:HZ1	1:A:541:PRO:CG	0.55	2.15	7	1
1:A:532:VAL:HG12	1:A:535:PHE:CZ	0.55	2.37	7	1
1:A:480:ILE:HG22	1:A:481:LYS:N	0.55	2.16	7	8
1:A:564:LEU:HB3	1:A:570:GLY:HA2	0.55	1.77	3	5

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:570:GLY:O	1:A:573:LYS:N	0.55	2.40	3	3
1:A:535:PHE:CG	1:A:537:ALA:HB2	0.55	2.37	6	1
1:A:543:PHE:CE1	1:A:562:PHE:CZ	0.55	2.95	6	1
1:A:488:TYR:CE2	1:A:563:ASP:HA	0.55	2.37	9	1
1:A:535:PHE:CE2	1:A:538:GLN:HG2	0.54	2.38	2	1
1:A:535:PHE:CZ	1:A:544:ASP:O	0.54	2.60	6	3
1:A:616:LEU:CD1	1:A:631:LEU:CG	0.54	2.84	9	7
1:A:513:ASP:HB2	1:A:516:ARG:HH21	0.54	1.62	6	3
1:A:531:GLU:HA	1:A:595:LYS:HE2	0.54	1.78	9	1
1:A:535:PHE:H	1:A:545:ASN:HD21	0.54	1.45	9	1
1:A:577:TRP:CE2	1:A:581:ILE:HG13	0.54	2.36	7	2
1:A:486:PRO:HA	1:A:546:ILE:HD11	0.54	1.80	9	2
1:A:531:GLU:HG3	1:A:533:PRO:HA	0.54	1.79	1	4
1:A:600:THR:HG23	1:A:622:GLY:HA3	0.54	1.79	10	8
1:A:629:PHE:CD2	1:A:630:GLU:HG3	0.54	2.37	7	7
1:A:515:GLU:HG3	1:A:540:LEU:CD2	0.54	2.33	3	1
1:A:520:LYS:O	1:A:524:LEU:CD1	0.54	2.55	10	2
1:A:615:SER:HA	1:A:631:LEU:CD1	0.54	2.32	5	1
1:A:542:GLN:CD	1:A:542:GLN:H	0.54	2.10	1	2
1:A:564:LEU:HD22	1:A:570:GLY:HA2	0.54	1.79	9	9
1:A:574:LEU:O	1:A:577:TRP:HB3	0.54	2.02	7	7
1:A:670:LYS:O	1:A:673:ILE:HD12	0.54	2.03	7	8
1:A:517:GLN:O	1:A:518:LEU:C	0.54	2.48	7	2
1:A:542:GLN:HG3	1:A:543:PHE:H	0.54	1.63	3	1
1:A:535:PHE:C	1:A:537:ALA:N	0.54	2.64	6	1
1:A:509:PHE:CD2	1:A:516:ARG:CZ	0.54	2.90	7	1
1:A:487:HIS:O	1:A:490:VAL:HG12	0.54	2.01	8	2
1:A:497:VAL:HG12	1:A:539:PRO:N	0.54	2.18	2	2
1:A:522:LYS:HZ1	1:A:541:PRO:CB	0.54	2.16	7	1
1:A:480:ILE:O	1:A:481:LYS:C	0.54	2.51	9	8
1:A:487:HIS:CB	1:A:545:ASN:HB2	0.54	2.32	1	1
1:A:626:GLN:O	1:A:627:GLU:C	0.54	2.49	5	4
1:A:482:ALA:HB2	1:A:540:LEU:HD13	0.54	1.79	4	2
1:A:487:HIS:CB	1:A:541:PRO:HB3	0.54	2.33	6	1
1:A:488:TYR:O	1:A:548:LEU:HD23	0.54	2.03	9	1
1:A:535:PHE:CD1	1:A:541:PRO:HA	0.54	2.38	9	1
1:A:675:GLN:OE1	1:A:690:TYR:HA	0.54	2.02	4	6
1:A:487:HIS:CD2	1:A:546:ILE:HG23	0.54	2.38	2	2
1:A:538:GLN:HG3	1:A:700:VAL:HA	0.54	1.78	7	1
1:A:594:PHE:CG	1:A:603:HIS:HB2	0.54	2.38	2	2
1:A:643:PHE:CE2	1:A:644:ASP:OD1	0.54	2.61	6	7

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:679:GLU:HB3	1:A:681:VAL:HB	0.54	1.80	2	1
1:A:516:ARG:O	1:A:519:GLN:N	0.54	2.37	8	4
1:A:487:HIS:CE1	1:A:543:PHE:HA	0.54	2.38	9	1
1:A:535:PHE:CZ	1:A:544:ASP:C	0.54	2.85	5	3
1:A:523:ARG:NH1	1:A:532:VAL:HG22	0.54	2.17	9	1
1:A:548:LEU:HD11	1:A:553:VAL:HB	0.54	1.78	1	1
1:A:600:THR:CG2	1:A:622:GLY:CA	0.54	2.86	5	10
1:A:489:GLY:HA2	1:A:492:PHE:CZ	0.54	2.38	10	2
1:A:624:ILE:O	1:A:632:ALA:CB	0.54	2.55	6	4
1:A:671:GLU:HG2	1:A:672:GLU:N	0.54	2.18	3	4
1:A:497:VAL:HG21	1:A:539:PRO:CG	0.54	2.33	8	1
1:A:582:GLN:NE2	1:A:591:MET:HG3	0.53	2.17	3	3
1:A:602:VAL:HA	1:A:606:PRO:O	0.53	2.03	2	7
1:A:583:GLU:OE1	1:A:679:GLU:HG2	0.53	2.02	2	5
1:A:585:LEU:HD12	1:A:659:GLU:CA	0.53	2.33	6	2
1:A:487:HIS:HA	1:A:490:VAL:CB	0.53	2.33	7	1
1:A:507:PHE:CE2	1:A:519:GLN:HG3	0.53	2.38	8	1
1:A:600:THR:CG2	1:A:622:GLY:HA3	0.53	2.32	5	9
1:A:643:PHE:O	1:A:644:ASP:C	0.53	2.51	5	10
1:A:574:LEU:CD1	1:A:591:MET:HE1	0.53	2.33	4	1
1:A:488:TYR:CG	1:A:488:TYR:O	0.53	2.61	10	1
1:A:577:TRP:CH2	1:A:581:ILE:HB	0.53	2.39	8	4
1:A:486:PRO:C	1:A:490:VAL:HB	0.53	2.28	7	1
1:A:544:ASP:O	1:A:545:ASN:HB2	0.53	2.03	6	5
1:A:577:TRP:O	1:A:578:GLN:C	0.53	2.51	10	8
1:A:670:LYS:O	1:A:673:ILE:CD1	0.53	2.56	2	3
1:A:531:GLU:HG2	1:A:606:PRO:HB3	0.53	1.81	5	3
1:A:480:ILE:HG21	1:A:518:LEU:HG	0.53	1.80	7	1
1:A:536:LYS:HG3	1:A:656:LEU:CD2	0.53	2.34	9	1
1:A:482:ALA:CB	1:A:540:LEU:HD13	0.53	2.33	5	1
1:A:487:HIS:CD2	1:A:545:ASN:HB2	0.53	2.38	8	1
1:A:522:LYS:HB2	1:A:545:ASN:CG	0.53	2.29	8	1
1:A:543:PHE:CE1	1:A:562:PHE:CE1	0.53	2.96	1	1
1:A:600:THR:HG22	1:A:622:GLY:HA2	0.53	1.80	3	3
1:A:536:LYS:CB	1:A:656:LEU:HD22	0.53	2.34	4	2
1:A:585:LEU:HD13	1:A:605:GLU:HG3	0.53	1.80	6	1
1:A:480:ILE:HG13	1:A:498:GLU:N	0.53	2.18	1	1
1:A:488:TYR:CE1	1:A:548:LEU:HD22	0.53	2.38	1	1
1:A:548:LEU:HD21	1:A:553:VAL:HB	0.53	1.80	1	1
1:A:593:VAL:HG21	1:A:625:VAL:O	0.53	2.03	9	1
1:A:530:ASP:OD1	1:A:531:GLU:N	0.53	2.42	10	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:537:ALA:HB2	1:A:660:GLU:HG3	0.53	1.81	1	2
1:A:534:LYS:H	1:A:534:LYS:HD3	0.53	1.64	5	1
1:A:513:ASP:CB	1:A:516:ARG:HH21	0.53	2.17	6	2
1:A:536:LYS:HE3	1:A:536:LYS:H	0.53	1.64	8	1
1:A:543:PHE:N	1:A:543:PHE:CD1	0.53	2.75	8	1
1:A:543:PHE:CD2	1:A:544:ASP:N	0.53	2.76	10	1
1:A:615:SER:HA	1:A:631:LEU:HD11	0.52	1.81	5	1
1:A:533:PRO:HD3	1:A:605:GLU:OE1	0.52	2.03	8	1
1:A:536:LYS:HE3	1:A:537:ALA:HB2	0.52	1.81	8	1
1:A:480:ILE:HG13	1:A:498:GLU:H	0.52	1.63	1	2
1:A:509:PHE:CD2	1:A:516:ARG:NH2	0.52	2.76	6	6
1:A:639:GLU:HB3	1:A:643:PHE:HB2	0.52	1.81	8	9
1:A:595:LYS:HG2	1:A:601:VAL:HG12	0.52	1.81	8	2
1:A:487:HIS:CE1	1:A:544:ASP:C	0.52	2.87	6	2
1:A:602:VAL:HG23	1:A:624:ILE:CD1	0.52	2.34	5	1
1:A:480:ILE:CG2	1:A:492:PHE:CZ	0.52	2.92	9	1
1:A:496:LEU:HD22	1:A:698:SER:HB2	0.52	1.81	1	1
1:A:523:ARG:CB	1:A:546:ILE:HA	0.52	2.34	3	2
1:A:687:ILE:O	1:A:689:LYS:N	0.52	2.41	3	5
1:A:535:PHE:CD1	1:A:544:ASP:HB3	0.52	2.38	5	1
1:A:548:LEU:HD12	1:A:552:LYS:HB2	0.52	1.80	6	1
1:A:519:GLN:O	1:A:535:PHE:N	0.52	2.42	8	1
1:A:486:PRO:HA	1:A:546:ILE:CD1	0.52	2.34	9	1
1:A:602:VAL:C	1:A:624:ILE:CD1	0.52	2.82	9	1
1:A:683:LYS:O	1:A:684:ALA:C	0.52	2.52	2	10
1:A:593:VAL:HG12	1:A:594:PHE:N	0.52	2.19	10	6
1:A:488:TYR:CG	1:A:543:PHE:O	0.52	2.62	4	1
1:A:489:GLY:HA2	1:A:557:THR:HG23	0.52	1.80	4	1
1:A:534:LYS:HZ2	1:A:608:VAL:HG23	0.52	1.65	5	1
1:A:599:ASN:ND2	1:A:612:GLU:HA	0.52	2.20	7	3
1:A:624:ILE:HG21	1:A:627:GLU:O	0.52	2.04	5	1
1:A:486:PRO:CA	1:A:522:LYS:HE2	0.52	2.35	7	1
1:A:523:ARG:HE	1:A:606:PRO:HB2	0.52	1.64	7	1
1:A:543:PHE:CE1	1:A:581:ILE:CD1	0.52	2.93	7	1
1:A:519:GLN:HB3	1:A:534:LYS:CA	0.52	2.35	1	1
1:A:689:LYS:C	1:A:691:ARG:H	0.52	2.11	3	7
1:A:497:VAL:HG12	1:A:538:GLN:C	0.52	2.29	2	2
1:A:535:PHE:CE1	1:A:544:ASP:CB	0.52	2.92	8	1
1:A:507:PHE:CD2	1:A:516:ARG:HD2	0.52	2.39	9	1
1:A:519:GLN:HB2	1:A:541:PRO:CB	0.52	2.35	3	1
1:A:487:HIS:NE2	1:A:565:GLU:HG3	0.52	2.20	4	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:578:GLN:HG3	1:A:591:MET:SD	0.52	2.44	4	1
1:A:519:GLN:OE1	1:A:535:PHE:N	0.52	2.43	10	2
1:A:481:LYS:HA	1:A:518:LEU:CD1	0.52	2.35	3	1
1:A:532:VAL:HG21	1:A:565:GLU:HG3	0.52	1.80	3	1
1:A:582:GLN:HG2	1:A:605:GLU:OE2	0.52	2.04	4	2
1:A:536:LYS:HD2	1:A:536:LYS:C	0.52	2.30	8	1
1:A:486:PRO:O	1:A:489:GLY:C	0.52	2.53	7	2
1:A:487:HIS:HE1	1:A:543:PHE:N	0.52	2.03	8	1
1:A:531:GLU:HB3	1:A:594:PHE:CD1	0.52	2.40	9	1
1:A:583:GLU:O	1:A:585:LEU:N	0.52	2.42	4	8
1:A:536:LYS:HG3	1:A:607:PHE:N	0.52	2.20	4	1
1:A:524:LEU:CD2	1:A:612:GLU:OE2	0.52	2.58	6	2
1:A:629:PHE:CE1	1:A:654:LYS:HD3	0.52	2.40	10	2
1:A:487:HIS:NE2	1:A:488:TYR:CB	0.52	2.73	1	3
1:A:598:PRO:O	1:A:622:GLY:HA3	0.52	2.04	4	7
1:A:616:LEU:HD11	1:A:631:LEU:CD2	0.52	2.34	4	7
1:A:533:PRO:C	1:A:535:PHE:N	0.52	2.66	3	2
1:A:538:GLN:HE21	1:A:538:GLN:H	0.52	1.47	3	1
1:A:585:LEU:CB	1:A:659:GLU:HG3	0.52	2.35	8	1
1:A:522:LYS:O	1:A:546:ILE:CG2	0.51	2.58	1	1
1:A:497:VAL:HG21	1:A:538:GLN:HB3	0.51	1.82	3	1
1:A:523:ARG:O	1:A:524:LEU:C	0.51	2.51	4	6
1:A:537:ALA:HB1	1:A:542:GLN:HG2	0.51	1.80	3	1
1:A:601:VAL:O	1:A:606:PRO:O	0.51	2.28	3	2
1:A:629:PHE:CZ	1:A:654:LYS:HD3	0.51	2.41	10	4
1:A:488:TYR:CZ	1:A:562:PHE:O	0.51	2.64	4	2
1:A:603:HIS:CG	1:A:604:GLN:OE1	0.51	2.64	5	1
1:A:480:ILE:HG22	1:A:482:ALA:H	0.51	1.63	7	3
1:A:591:MET:C	1:A:593:VAL:N	0.51	2.64	1	6
1:A:546:ILE:HD12	1:A:546:ILE:C	0.51	2.29	3	1
1:A:577:TRP:CZ2	1:A:581:ILE:CG1	0.51	2.93	7	3
1:A:689:LYS:CA	1:A:703:THR:HG22	0.51	2.34	7	3
1:A:520:LYS:CG	1:A:608:VAL:HG21	0.51	2.35	6	1
1:A:599:ASN:HA	1:A:601:VAL:HG22	0.51	1.83	6	3
1:A:527:LEU:C	1:A:529:LYS:H	0.51	2.12	7	1
1:A:531:GLU:O	1:A:605:GLU:HB3	0.51	2.06	7	1
1:A:507:PHE:CD2	1:A:535:PHE:O	0.51	2.62	3	1
1:A:534:LYS:CE	1:A:607:PHE:H	0.51	2.19	7	1
1:A:488:TYR:CD2	1:A:557:THR:CG2	0.51	2.94	8	1
1:A:527:LEU:HD13	1:A:546:ILE:HG21	0.51	1.83	8	1
1:A:536:LYS:NZ	1:A:537:ALA:HB2	0.51	2.21	8	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:487:HIS:HE1	1:A:488:TYR:CE2	0.51	2.24	9	1
1:A:564:LEU:HD23	1:A:566:ILE:HD12	0.51	1.82	7	10
1:A:566:ILE:O	1:A:571:ALA:N	0.51	2.43	3	7
1:A:658:GLU:O	1:A:659:GLU:C	0.51	2.54	5	8
1:A:480:ILE:HD13	1:A:542:GLN:HA	0.51	1.81	3	1
1:A:524:LEU:O	1:A:528:ARG:HA	0.51	2.04	10	2
1:A:480:ILE:HG22	1:A:518:LEU:HD13	0.51	1.81	9	1
1:A:507:PHE:CE2	1:A:536:LYS:HA	0.51	2.39	9	1
1:A:624:ILE:HB	1:A:631:LEU:O	0.51	2.05	1	4
1:A:538:GLN:CD	1:A:538:GLN:H	0.51	2.12	2	1
1:A:480:ILE:HG21	1:A:540:LEU:O	0.51	2.06	3	1
1:A:598:PRO:C	1:A:621:SER:O	0.51	2.54	9	2
1:A:482:ALA:O	1:A:518:LEU:HD11	0.51	2.04	6	3
1:A:608:VAL:CG2	1:A:609:PRO:HD2	0.51	2.35	4	2
1:A:644:ASP:HA	1:A:648:ALA:HB2	0.51	1.83	5	1
1:A:542:GLN:OE1	1:A:543:PHE:CD2	0.51	2.63	2	1
1:A:674:SER:O	1:A:679:GLU:HB2	0.51	2.06	4	5
1:A:497:VAL:HG11	1:A:542:GLN:CB	0.51	2.34	3	2
1:A:538:GLN:NE2	1:A:699:ASP:HB2	0.51	2.20	3	1
1:A:574:LEU:HD11	1:A:591:MET:CE	0.51	2.35	8	2
1:A:539:PRO:O	1:A:542:GLN:CG	0.51	2.58	6	1
1:A:487:HIS:O	1:A:489:GLY:N	0.51	2.44	7	1
1:A:687:ILE:HD12	1:A:706:ARG:HA	0.51	1.82	10	1
1:A:675:GLN:HG3	1:A:681:VAL:HG12	0.51	1.83	3	1
1:A:487:HIS:ND1	1:A:544:ASP:C	0.51	2.69	5	2
1:A:594:PHE:HB2	1:A:601:VAL:HG12	0.51	1.82	6	1
1:A:520:LYS:O	1:A:546:ILE:CG2	0.51	2.59	9	1
1:A:624:ILE:N	1:A:631:LEU:O	0.51	2.40	5	2
1:A:535:PHE:CD1	1:A:535:PHE:N	0.51	2.78	6	1
1:A:487:HIS:CD2	1:A:541:PRO:CB	0.51	2.91	7	1
1:A:487:HIS:CD2	1:A:541:PRO:O	0.51	2.64	7	1
1:A:493:LYS:HE3	1:A:542:GLN:CD	0.51	2.31	10	1
1:A:522:LYS:HB3	1:A:546:ILE:CG2	0.51	2.36	2	1
1:A:531:GLU:CG	1:A:606:PRO:HB3	0.51	2.35	3	1
1:A:528:ARG:HA	1:A:595:LYS:NZ	0.51	2.21	4	1
1:A:487:HIS:HB2	1:A:541:PRO:CB	0.51	2.35	5	2
1:A:579:GLN:HB2	1:A:681:VAL:HG23	0.51	1.82	5	3
1:A:602:VAL:CG1	1:A:612:GLU:HB3	0.50	2.36	1	8
1:A:497:VAL:CG2	1:A:539:PRO:HB2	0.50	2.36	8	2
1:A:533:PRO:HB3	1:A:605:GLU:HB3	0.50	1.83	4	2
1:A:590:GLU:O	1:A:593:VAL:HG23	0.50	2.05	5	6

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:599:ASN:ND2	1:A:612:GLU:O	0.50	2.45	3	5
1:A:690:TYR:C	1:A:692:ALA:N	0.50	2.70	2	10
1:A:538:GLN:O	1:A:539:PRO:O	0.50	2.29	3	5
1:A:562:PHE:CE2	1:A:682:HIS:NE2	0.50	2.78	3	1
1:A:520:LYS:HA	1:A:534:LYS:HD2	0.50	1.83	5	1
1:A:704:VAL:HG21	1:A:714:PHE:CD1	0.50	2.42	9	1
1:A:602:VAL:O	1:A:607:PHE:CD1	0.50	2.64	9	5
1:A:507:PHE:CD2	1:A:516:ARG:CD	0.50	2.95	3	3
1:A:597:ARG:HB3	1:A:598:PRO:HD2	0.50	1.83	7	4
1:A:533:PRO:O	1:A:535:PHE:CD2	0.50	2.65	7	4
1:A:487:HIS:CA	1:A:522:LYS:HD3	0.50	2.37	6	2
1:A:488:TYR:CB	1:A:544:ASP:H	0.50	2.19	7	1
1:A:519:GLN:CG	1:A:534:LYS:CA	0.50	2.90	7	1
1:A:581:ILE:O	1:A:660:GLU:OE2	0.50	2.29	8	1
1:A:536:LYS:CB	1:A:656:LEU:HD13	0.50	2.37	9	1
1:A:583:GLU:O	1:A:584:GLU:C	0.50	2.53	10	8
1:A:578:GLN:CG	1:A:591:MET:SD	0.50	3.00	4	1
1:A:534:LYS:HZ1	1:A:607:PHE:H	0.50	1.49	7	1
1:A:538:GLN:HB2	1:A:542:GLN:CB	0.50	2.37	7	1
1:A:536:LYS:HE2	1:A:605:GLU:O	0.50	2.07	8	1
1:A:516:ARG:C	1:A:518:LEU:H	0.50	2.12	9	1
1:A:535:PHE:H	1:A:545:ASN:ND2	0.50	2.05	9	1
1:A:636:ARG:O	1:A:640:ARG:HG3	0.50	2.06	6	10
1:A:488:TYR:C	1:A:488:TYR:CD1	0.50	2.83	2	1
1:A:536:LYS:O	1:A:699:ASP:HB3	0.50	2.06	6	1
1:A:492:PHE:CD1	1:A:492:PHE:N	0.50	2.80	8	1
1:A:535:PHE:CE2	1:A:541:PRO:HB3	0.50	2.41	8	1
1:A:535:PHE:CE1	1:A:544:ASP:HB2	0.50	2.41	8	1
1:A:517:GLN:O	1:A:521:GLU:HG3	0.50	2.07	4	4
1:A:623:SER:O	1:A:625:VAL:HG23	0.50	2.07	7	5
1:A:530:ASP:HB3	1:A:594:PHE:CE1	0.50	2.41	3	1
1:A:531:GLU:CG	1:A:534:LYS:H	0.50	2.19	4	2
1:A:532:VAL:HG11	1:A:565:GLU:CD	0.50	2.32	4	1
1:A:536:LYS:CE	1:A:537:ALA:HB2	0.50	2.37	8	1
1:A:616:LEU:HD23	1:A:636:ARG:HH11	0.50	1.65	9	1
1:A:643:PHE:CD2	1:A:644:ASP:OD1	0.50	2.65	6	10
1:A:487:HIS:CD2	1:A:546:ILE:CG1	0.50	2.95	2	2
1:A:493:LYS:NZ	1:A:700:VAL:HG11	0.50	2.21	2	1
1:A:524:LEU:HD22	1:A:612:GLU:OE2	0.50	2.06	10	3
1:A:533:PRO:O	1:A:535:PHE:CE2	0.50	2.64	7	4
1:A:516:ARG:CZ	1:A:608:VAL:HG12	0.50	2.37	10	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:499:GLN:HA	1:A:505:CYS:SG	0.50	2.47	7	1
1:A:538:GLN:CG	1:A:700:VAL:HA	0.50	2.37	7	1
1:A:544:ASP:O	1:A:565:GLU:HG3	0.50	2.07	7	1
1:A:633:THR:HG22	1:A:634:ALA:N	0.50	2.22	8	10
1:A:521:GLU:HA	1:A:524:LEU:CD1	0.50	2.37	3	1
1:A:490:VAL:CG1	1:A:542:GLN:HA	0.50	2.37	4	1
1:A:488:TYR:O	1:A:488:TYR:CD2	0.50	2.65	7	1
1:A:490:VAL:O	1:A:491:PRO:C	0.50	2.53	2	6
1:A:534:LYS:CE	1:A:608:VAL:CG1	0.50	2.90	1	1
1:A:490:VAL:CG2	1:A:522:LYS:HZ3	0.50	2.20	10	2
1:A:691:ARG:O	1:A:691:ARG:HG2	0.50	2.07	7	1
1:A:487:HIS:CD2	1:A:544:ASP:O	0.49	2.64	1	2
1:A:564:LEU:CD2	1:A:569:ARG:HB3	0.49	2.37	2	6
1:A:507:PHE:HB3	1:A:656:LEU:CD1	0.49	2.36	5	1
1:A:507:PHE:CD2	1:A:536:LYS:C	0.49	2.90	8	1
1:A:493:LYS:HE3	1:A:542:GLN:NE2	0.49	2.21	10	1
1:A:577:TRP:CH2	1:A:591:MET:HE1	0.49	2.42	2	2
1:A:536:LYS:CG	1:A:605:GLU:O	0.49	2.60	8	1
1:A:536:LYS:CG	1:A:656:LEU:HD22	0.49	2.37	9	1
1:A:530:ASP:OD2	1:A:594:PHE:CD1	0.49	2.64	10	1
1:A:577:TRP:CZ3	1:A:591:MET:CE	0.49	2.94	9	3
1:A:580:GLN:HB2	1:A:682:HIS:NE2	0.49	2.22	1	1
1:A:627:GLU:OE2	1:A:630:GLU:HA	0.49	2.07	9	6
1:A:489:GLY:N	1:A:557:THR:HG21	0.49	2.22	3	1
1:A:487:HIS:NE2	1:A:488:TYR:HB2	0.49	2.22	8	2
1:A:530:ASP:HA	1:A:601:VAL:HG11	0.49	1.84	6	1
1:A:523:ARG:HD3	1:A:532:VAL:N	0.49	2.22	10	1
1:A:487:HIS:ND1	1:A:488:TYR:N	0.49	2.60	3	2
1:A:535:PHE:CE2	1:A:544:ASP:HB2	0.49	2.43	2	2
1:A:487:HIS:HE1	1:A:543:PHE:C	0.49	2.16	6	2
1:A:509:PHE:CD1	1:A:652:ALA:HB1	0.49	2.42	5	1
1:A:536:LYS:O	1:A:699:ASP:CG	0.49	2.55	10	1
1:A:594:PHE:CD2	1:A:603:HIS:HB2	0.49	2.42	10	1
1:A:528:ARG:C	1:A:595:LYS:HE3	0.49	2.32	1	3
1:A:505:CYS:SG	1:A:539:PRO:HA	0.49	2.47	3	1
1:A:542:GLN:O	1:A:557:THR:HG21	0.49	2.07	6	1
1:A:619:SER:O	1:A:620:LEU:CB	0.49	2.60	6	2
1:A:488:TYR:O	1:A:488:TYR:CG	0.49	2.64	2	2
1:A:497:VAL:CG1	1:A:542:GLN:HB2	0.49	2.35	3	1
1:A:671:GLU:CG	1:A:672:GLU:N	0.49	2.75	3	2
1:A:533:PRO:CD	1:A:577:TRP:CH2	0.49	2.96	4	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:535:PHE:CG	1:A:544:ASP:HB3	0.49	2.42	5	1
1:A:544:ASP:HA	1:A:565:GLU:HG3	0.49	1.83	10	1
1:A:685:LYS:O	1:A:687:ILE:HG12	0.49	2.08	3	8
1:A:516:ARG:HG3	1:A:534:LYS:HZ1	0.49	1.68	2	1
1:A:631:LEU:HD12	1:A:643:PHE:CE2	0.49	2.43	7	3
1:A:516:ARG:CZ	1:A:608:VAL:HG22	0.49	2.38	5	1
1:A:480:ILE:HG23	1:A:540:LEU:HD22	0.49	1.83	6	1
1:A:534:LYS:HA	1:A:545:ASN:HD21	0.49	1.67	3	1
1:A:543:PHE:CE2	1:A:581:ILE:CD1	0.49	2.96	3	1
1:A:607:PHE:HB3	1:A:656:LEU:HD21	0.49	1.82	3	1
1:A:669:GLU:O	1:A:673:ILE:CD1	0.49	2.61	3	2
1:A:632:ALA:HB3	1:A:635:LYS:HB2	0.49	1.85	5	1
1:A:681:VAL:O	1:A:682:HIS:ND1	0.49	2.46	7	2
1:A:562:PHE:CE1	1:A:577:TRP:CD1	0.49	3.01	2	3
1:A:488:TYR:H	1:A:546:ILE:CG1	0.49	2.21	3	1
1:A:688:ARG:O	1:A:703:THR:HA	0.49	2.06	9	3
1:A:583:GLU:O	1:A:585:LEU:O	0.49	2.31	6	3
1:A:509:PHE:CZ	1:A:656:LEU:CD1	0.49	2.96	5	2
1:A:542:GLN:O	1:A:543:PHE:HB3	0.49	2.08	6	2
1:A:482:ALA:N	1:A:518:LEU:HD22	0.49	2.23	9	1
1:A:536:LYS:CB	1:A:656:LEU:HB3	0.48	2.39	3	1
1:A:538:GLN:OE1	1:A:700:VAL:HG22	0.48	2.08	6	1
1:A:544:ASP:OD1	1:A:577:TRP:NE1	0.48	2.42	8	1
1:A:583:GLU:HB3	1:A:679:GLU:CD	0.48	2.33	1	1
1:A:536:LYS:HG3	1:A:607:PHE:H	0.48	1.68	4	1
1:A:585:LEU:HD23	1:A:586:LYS:N	0.48	2.23	9	2
1:A:508:SER:HB2	1:A:653:GLN:NE2	0.48	2.22	7	1
1:A:509:PHE:CE2	1:A:656:LEU:HD12	0.48	2.43	7	1
1:A:507:PHE:CE1	1:A:537:ALA:O	0.48	2.67	8	1
1:A:480:ILE:HG21	1:A:492:PHE:CZ	0.48	2.44	9	1
1:A:499:GLN:O	1:A:501:GLN:N	0.48	2.44	9	1
1:A:535:PHE:CE2	1:A:544:ASP:O	0.48	2.66	9	1
1:A:564:LEU:O	1:A:565:GLU:HG2	0.48	2.09	1	6
1:A:603:HIS:C	1:A:605:GLU:N	0.48	2.71	4	6
1:A:516:ARG:CG	1:A:534:LYS:NZ	0.48	2.76	2	1
1:A:523:ARG:HG3	1:A:546:ILE:HA	0.48	1.85	2	2
1:A:534:LYS:HZ3	1:A:534:LYS:HB2	0.48	1.68	2	1
1:A:531:GLU:CB	1:A:606:PRO:HB3	0.48	2.39	3	1
1:A:519:GLN:HB3	1:A:534:LYS:HA	0.48	1.85	5	1
1:A:577:TRP:CZ2	1:A:581:ILE:HG21	0.48	2.43	7	2
1:A:604:GLN:HB2	1:A:655:SER:HA	0.48	1.85	5	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:538:GLN:CD	1:A:543:PHE:CZ	0.48	2.91	8	1
1:A:623:SER:O	1:A:624:ILE:C	0.48	2.49	8	2
1:A:531:GLU:CG	1:A:533:PRO:HA	0.48	2.39	3	1
1:A:487:HIS:HB3	1:A:522:LYS:HB3	0.48	1.85	5	1
1:A:497:VAL:HB	1:A:539:PRO:HA	0.48	1.85	5	1
1:A:585:LEU:HD12	1:A:604:GLN:HE22	0.48	1.66	5	1
1:A:607:PHE:N	1:A:656:LEU:HD21	0.48	2.24	6	2
1:A:487:HIS:C	1:A:489:GLY:N	0.48	2.70	7	1
1:A:532:VAL:HG21	1:A:565:GLU:CD	0.48	2.34	1	1
1:A:487:HIS:CG	1:A:546:ILE:H	0.48	2.26	2	3
1:A:616:LEU:CD1	1:A:631:LEU:CD2	0.48	2.91	8	6
1:A:608:VAL:CG2	1:A:609:PRO:CD	0.48	2.92	9	1
1:A:685:LYS:CG	1:A:686:PRO:HD2	0.48	2.38	2	6
1:A:670:LYS:HA	1:A:673:ILE:HD12	0.48	1.84	3	1
1:A:538:GLN:HB3	1:A:539:PRO:HD2	0.48	1.85	4	3
1:A:493:LYS:HD2	1:A:558:GLN:H	0.48	1.68	5	1
1:A:487:HIS:CE1	1:A:492:PHE:CE2	0.48	3.02	7	1
1:A:518:LEU:HD13	1:A:541:PRO:CD	0.48	2.39	7	1
1:A:523:ARG:HH22	1:A:612:GLU:CD	0.48	2.17	7	1
1:A:609:PRO:HB3	1:A:613:ASN:HD22	0.48	1.68	7	1
1:A:507:PHE:CZ	1:A:519:GLN:HG3	0.48	2.44	10	2
1:A:528:ARG:C	1:A:595:LYS:HZ1	0.48	2.17	8	1
1:A:485:MET:O	1:A:546:ILE:HD11	0.48	2.08	9	1
1:A:631:LEU:CD1	1:A:643:PHE:CZ	0.48	2.96	10	4
1:A:487:HIS:CD2	1:A:487:HIS:N	0.48	2.81	2	2
1:A:519:GLN:NE2	1:A:540:LEU:HA	0.48	2.23	4	1
1:A:651:GLU:O	1:A:655:SER:N	0.48	2.41	5	1
1:A:520:LYS:HG2	1:A:524:LEU:CD1	0.48	2.38	6	1
1:A:497:VAL:HG21	1:A:539:PRO:CB	0.48	2.38	4	2
1:A:533:PRO:HB2	1:A:605:GLU:O	0.48	2.09	5	1
1:A:483:THR:O	1:A:490:VAL:HG21	0.48	2.09	7	1
1:A:555:MET:N	1:A:556:PRO:HD3	0.48	2.23	8	1
1:A:496:LEU:HD13	1:A:500:ARG:CG	0.48	2.39	1	1
1:A:530:ASP:HB2	1:A:591:MET:HB3	0.48	1.85	1	2
1:A:616:LEU:HD11	1:A:631:LEU:HD21	0.48	1.86	1	3
1:A:564:LEU:HD22	1:A:570:GLY:CA	0.48	2.39	7	7
1:A:681:VAL:HG13	1:A:682:HIS:N	0.48	2.24	7	3
1:A:540:LEU:N	1:A:540:LEU:CD1	0.48	2.76	3	1
1:A:593:VAL:CG1	1:A:594:PHE:N	0.48	2.77	10	4
1:A:600:THR:CG2	1:A:622:GLY:HA2	0.48	2.39	3	2
1:A:689:LYS:HA	1:A:703:THR:HG23	0.48	1.85	3	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:508:SER:HB3	1:A:653:GLN:HE22	0.48	1.68	5	1
1:A:533:PRO:HD2	1:A:577:TRP:CH2	0.48	2.44	8	1
1:A:482:ALA:O	1:A:518:LEU:HD21	0.48	2.09	10	3
1:A:493:LYS:HE2	1:A:542:GLN:HG2	0.48	1.84	1	1
1:A:564:LEU:HD13	1:A:573:LYS:CB	0.48	2.39	1	2
1:A:570:GLY:O	1:A:574:LEU:N	0.48	2.47	9	5
1:A:593:VAL:HG11	1:A:625:VAL:O	0.48	2.08	2	4
1:A:486:PRO:HB2	1:A:546:ILE:CD1	0.48	2.31	3	1
1:A:487:HIS:ND1	1:A:543:PHE:C	0.48	2.71	9	2
1:A:544:ASP:HB3	1:A:565:GLU:CG	0.48	2.39	9	1
1:A:513:ASP:O	1:A:514:LYS:C	0.47	2.57	7	4
1:A:487:HIS:CG	1:A:546:ILE:N	0.47	2.82	2	1
1:A:545:ASN:C	1:A:546:ILE:HG23	0.47	2.33	3	1
1:A:541:PRO:CG	1:A:545:ASN:HD22	0.47	2.22	8	2
1:A:670:LYS:HA	1:A:673:ILE:CD1	0.47	2.39	5	2
1:A:537:ALA:HB1	1:A:543:PHE:CZ	0.47	2.44	7	1
1:A:594:PHE:HB2	1:A:600:THR:O	0.47	2.08	9	1
1:A:487:HIS:HE2	1:A:565:GLU:HB2	0.47	1.69	1	1
1:A:602:VAL:HG13	1:A:612:GLU:HB3	0.47	1.86	10	6
1:A:639:GLU:O	1:A:640:ARG:C	0.47	2.57	5	10
1:A:482:ALA:O	1:A:518:LEU:HD22	0.47	2.08	3	1
1:A:615:SER:O	1:A:621:SER:OG	0.47	2.28	9	2
1:A:599:ASN:HD22	1:A:612:GLU:HA	0.47	1.68	5	1
1:A:599:ASN:CG	1:A:612:GLU:HG2	0.47	2.33	5	1
1:A:519:GLN:NE2	1:A:540:LEU:N	0.47	2.61	8	1
1:A:579:GLN:HG2	1:A:583:GLU:CD	0.47	2.34	10	2
1:A:487:HIS:HB2	1:A:544:ASP:O	0.47	2.08	1	1
1:A:585:LEU:CD2	1:A:604:GLN:HG3	0.47	2.35	2	2
1:A:634:ALA:C	1:A:636:ARG:N	0.47	2.72	8	9
1:A:519:GLN:HB2	1:A:541:PRO:HB2	0.47	1.85	3	1
1:A:520:LYS:O	1:A:524:LEU:HG	0.47	2.10	9	2
1:A:497:VAL:H	1:A:540:LEU:N	0.47	2.06	7	1
1:A:519:GLN:O	1:A:534:LYS:HA	0.47	2.10	2	2
1:A:543:PHE:CB	1:A:563:ASP:HA	0.47	2.39	6	3
1:A:590:GLU:O	1:A:593:VAL:CG2	0.47	2.62	1	4
1:A:523:ARG:HD2	1:A:545:ASN:O	0.47	2.10	2	1
1:A:534:LYS:N	1:A:605:GLU:O	0.47	2.46	3	1
1:A:605:GLU:HB2	1:A:606:PRO:HD3	0.47	1.87	4	4
1:A:493:LYS:CE	1:A:542:GLN:HA	0.47	2.39	7	1
1:A:604:GLN:O	1:A:659:GLU:OE1	0.47	2.31	8	1
1:A:542:GLN:NE2	1:A:543:PHE:HB3	0.47	2.24	10	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:487:HIS:ND1	1:A:546:ILE:N	0.47	2.62	2	2
1:A:533:PRO:CG	1:A:581:ILE:CG2	0.47	2.93	2	3
1:A:562:PHE:CD2	1:A:682:HIS:NE2	0.47	2.82	2	1
1:A:532:VAL:HB	1:A:544:ASP:O	0.47	2.09	3	1
1:A:537:ALA:C	1:A:538:GLN:O	0.47	2.54	3	3
1:A:547:ARG:HA	1:A:565:GLU:O	0.47	2.09	4	2
1:A:602:VAL:C	1:A:624:ILE:HD11	0.47	2.35	9	1
1:A:488:TYR:HB2	1:A:543:PHE:C	0.47	2.34	10	1
1:A:507:PHE:HA	1:A:516:ARG:HD3	0.47	1.86	10	1
1:A:543:PHE:O	1:A:565:GLU:HG3	0.47	2.10	1	1
1:A:582:GLN:HG3	1:A:591:MET:SD	0.47	2.50	1	2
1:A:533:PRO:O	1:A:535:PHE:N	0.47	2.47	3	1
1:A:493:LYS:NZ	1:A:497:VAL:HG13	0.47	2.24	4	1
1:A:585:LEU:HD13	1:A:604:GLN:CG	0.47	2.39	4	1
1:A:535:PHE:CE1	1:A:544:ASP:C	0.47	2.93	5	1
1:A:542:GLN:N	1:A:542:GLN:CD	0.47	2.72	5	1
1:A:577:TRP:CZ3	1:A:582:GLN:HG3	0.47	2.44	5	1
1:A:578:GLN:HE21	1:A:595:LYS:CE	0.47	2.22	5	1
1:A:654:LYS:O	1:A:655:SER:C	0.47	2.57	6	3
1:A:545:ASN:C	1:A:545:ASN:ND2	0.47	2.72	7	1
1:A:519:GLN:HB3	1:A:535:PHE:C	0.47	2.34	8	1
1:A:516:ARG:HD2	1:A:535:PHE:O	0.47	2.10	9	1
1:A:585:LEU:HD23	1:A:586:LYS:H	0.47	1.70	9	1
1:A:630:GLU:HB2	1:A:643:PHE:CZ	0.47	2.44	9	1
1:A:538:GLN:HB2	1:A:543:PHE:CE2	0.47	2.45	10	1
1:A:579:GLN:OE1	1:A:681:VAL:HA	0.47	2.09	10	1
1:A:483:THR:O	1:A:519:GLN:NE2	0.47	2.47	3	1
1:A:487:HIS:CE1	1:A:488:TYR:H	0.47	2.27	4	1
1:A:531:GLU:CB	1:A:606:PRO:HG3	0.47	2.40	5	1
1:A:675:GLN:OE1	1:A:689:LYS:O	0.47	2.33	6	2
1:A:487:HIS:CG	1:A:545:ASN:HB2	0.47	2.45	6	1
1:A:492:PHE:CD2	1:A:542:GLN:HA	0.47	2.45	6	2
1:A:493:LYS:HG2	1:A:497:VAL:HA	0.47	1.87	8	1
1:A:593:VAL:O	1:A:596:ALA:N	0.47	2.48	9	1
1:A:482:ALA:O	1:A:518:LEU:CD2	0.47	2.63	1	2
1:A:594:PHE:CD2	1:A:603:HIS:CB	0.47	2.97	9	3
1:A:633:THR:CG2	1:A:634:ALA:N	0.47	2.77	8	7
1:A:578:GLN:HG2	1:A:591:MET:SD	0.47	2.50	3	1
1:A:660:GLU:HB3	1:A:699:ASP:O	0.47	2.10	5	1
1:A:487:HIS:H	1:A:522:LYS:CE	0.47	2.23	7	1
1:A:508:SER:O	1:A:509:PHE:CD2	0.47	2.68	7	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:509:PHE:CE2	1:A:656:LEU:CD1	0.47	2.98	7	1
1:A:485:MET:HB2	1:A:486:PRO:HD2	0.47	1.85	8	1
1:A:578:GLN:O	1:A:582:GLN:HG3	0.47	2.10	9	1
1:A:585:LEU:CD1	1:A:659:GLU:CD	0.47	2.88	3	1
1:A:673:ILE:O	1:A:676:LEU:N	0.47	2.48	9	2
1:A:534:LYS:CG	1:A:534:LYS:O	0.47	2.63	4	1
1:A:538:GLN:HG3	1:A:699:ASP:CG	0.47	2.34	4	1
1:A:542:GLN:NE2	1:A:543:PHE:CE2	0.47	2.82	6	1
1:A:578:GLN:O	1:A:582:GLN:CG	0.47	2.63	9	1
1:A:630:GLU:OE1	1:A:643:PHE:CE1	0.47	2.68	9	1
1:A:624:ILE:CD1	1:A:628:GLY:HA3	0.46	2.40	8	3
1:A:490:VAL:CG1	1:A:541:PRO:O	0.46	2.63	2	1
1:A:672:GLU:O	1:A:674:SER:N	0.46	2.48	2	2
1:A:543:PHE:CD1	1:A:543:PHE:N	0.46	2.69	9	2
1:A:492:PHE:CE1	1:A:542:GLN:O	0.46	2.68	4	1
1:A:562:PHE:CD2	1:A:682:HIS:CD2	0.46	3.03	4	2
1:A:530:ASP:HB3	1:A:595:LYS:HG2	0.46	1.87	5	1
1:A:614:ARG:O	1:A:631:LEU:HD21	0.46	2.10	5	1
1:A:507:PHE:CD1	1:A:536:LYS:CE	0.46	2.99	6	1
1:A:531:GLU:HB3	1:A:606:PRO:CB	0.46	2.41	6	1
1:A:537:ALA:CB	1:A:660:GLU:HG3	0.46	2.39	1	1
1:A:598:PRO:HB2	1:A:620:LEU:O	0.46	2.11	8	3
1:A:538:GLN:HB2	1:A:542:GLN:HB2	0.46	1.85	7	1
1:A:577:TRP:CE3	1:A:591:MET:HE1	0.46	2.45	8	1
1:A:498:GLU:C	1:A:500:ARG:H	0.46	2.18	6	2
1:A:647:LEU:HA	1:A:650:THR:CG2	0.46	2.41	5	1
1:A:488:TYR:HB3	1:A:544:ASP:CG	0.46	2.36	7	1
1:A:523:ARG:HD2	1:A:531:GLU:OE2	0.46	2.10	7	1
1:A:531:GLU:OE1	1:A:605:GLU:O	0.46	2.32	7	1
1:A:531:GLU:HB2	1:A:606:PRO:HB3	0.46	1.87	7	1
1:A:601:VAL:HG23	1:A:612:GLU:CG	0.46	2.41	8	1
1:A:513:ASP:OD1	1:A:520:LYS:NZ	0.46	2.48	3	2
1:A:487:HIS:NE2	1:A:488:TYR:HB3	0.46	2.25	6	2
1:A:534:LYS:NZ	1:A:608:VAL:CG2	0.46	2.78	5	1
1:A:583:GLU:CG	1:A:591:MET:HE1	0.46	2.40	5	1
1:A:616:LEU:HA	1:A:623:SER:OG	0.46	2.10	5	1
1:A:518:LEU:HD22	1:A:522:LYS:HE3	0.46	1.87	6	1
1:A:607:PHE:HB3	1:A:656:LEU:CG	0.46	2.39	9	1
1:A:579:GLN:HB3	1:A:679:GLU:HA	0.46	1.87	4	1
1:A:535:PHE:HB3	1:A:537:ALA:CB	0.46	2.39	5	2
1:A:629:PHE:CZ	1:A:648:ALA:HB1	0.46	2.45	5	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:522:LYS:CB	1:A:545:ASN:HB3	0.46	2.40	7	1
1:A:594:PHE:CE1	1:A:606:PRO:HD3	0.46	2.46	8	1
1:A:520:LYS:HD2	1:A:534:LYS:HB3	0.46	1.88	9	1
1:A:535:PHE:CD1	1:A:544:ASP:CG	0.46	2.93	1	1
1:A:581:ILE:HA	1:A:660:GLU:OE2	0.46	2.10	4	3
1:A:604:GLN:HB2	1:A:655:SER:CA	0.46	2.40	5	1
1:A:490:VAL:HG21	1:A:541:PRO:HB2	0.46	1.88	1	1
1:A:519:GLN:NE2	1:A:540:LEU:CA	0.46	2.79	4	1
1:A:532:VAL:HG11	1:A:565:GLU:OE1	0.46	2.10	4	1
1:A:540:LEU:HD12	1:A:542:GLN:NE2	0.46	2.19	4	1
1:A:585:LEU:HD22	1:A:604:GLN:HG3	0.46	1.87	4	1
1:A:532:VAL:HG12	1:A:577:TRP:NE1	0.46	2.26	8	1
1:A:639:GLU:O	1:A:643:PHE:CB	0.46	2.64	2	6
1:A:481:LYS:C	1:A:518:LEU:HD13	0.46	2.35	3	1
1:A:528:ARG:HA	1:A:595:LYS:HZ2	0.46	1.69	4	1
1:A:533:PRO:O	1:A:545:ASN:HA	0.46	2.10	4	1
1:A:579:GLN:HG2	1:A:583:GLU:OE2	0.46	2.11	4	1
1:A:564:LEU:HD13	1:A:573:LYS:CG	0.46	2.41	6	2
1:A:624:ILE:CG2	1:A:626:GLN:HB3	0.46	2.41	5	1
1:A:487:HIS:CB	1:A:545:ASN:HB3	0.46	2.41	2	2
1:A:534:LYS:HE3	1:A:608:VAL:HG11	0.46	1.88	2	1
1:A:488:TYR:CE2	1:A:566:ILE:CD1	0.46	2.99	3	1
1:A:544:ASP:CB	1:A:565:GLU:OE2	0.46	2.64	9	1
1:A:538:GLN:N	1:A:538:GLN:NE2	0.46	2.62	3	1
1:A:533:PRO:CD	1:A:577:TRP:CZ2	0.46	2.98	4	2
1:A:522:LYS:HB2	1:A:545:ASN:ND2	0.46	2.25	5	1
1:A:530:ASP:CG	1:A:595:LYS:HG2	0.46	2.36	5	1
1:A:527:LEU:HD22	1:A:546:ILE:HG22	0.46	1.87	8	1
1:A:535:PHE:CZ	1:A:543:PHE:HD1	0.46	2.29	9	1
1:A:546:ILE:HG13	1:A:547:ARG:N	0.45	2.26	2	1
1:A:488:TYR:O	1:A:546:ILE:HD11	0.45	2.11	3	1
1:A:597:ARG:HB2	1:A:600:THR:CG2	0.45	2.41	3	1
1:A:627:GLU:CG	1:A:628:GLY:O	0.45	2.64	3	1
1:A:480:ILE:HG23	1:A:540:LEU:HB3	0.45	1.87	4	1
1:A:548:LEU:HD22	1:A:553:VAL:HB	0.45	1.88	5	1
1:A:649:GLU:O	1:A:652:ALA:HB3	0.45	2.11	8	2
1:A:564:LEU:CD1	1:A:573:LYS:HG3	0.45	2.41	6	1
1:A:624:ILE:HD12	1:A:628:GLY:HA3	0.45	1.87	6	1
1:A:531:GLU:O	1:A:605:GLU:OE1	0.45	2.34	7	1
1:A:492:PHE:CZ	1:A:541:PRO:O	0.45	2.70	9	1
1:A:659:GLU:HG2	1:A:660:GLU:HG2	0.45	1.87	9	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:492:PHE:CE1	1:A:555:MET:O	0.45	2.69	10	1
1:A:605:GLU:HG2	1:A:659:GLU:CG	0.45	2.41	10	1
1:A:520:LYS:HA	1:A:534:LYS:HB3	0.45	1.87	2	1
1:A:531:GLU:HG3	1:A:534:LYS:H	0.45	1.71	4	1
1:A:497:VAL:HG21	1:A:535:PHE:O	0.45	2.10	7	1
1:A:603:HIS:HA	1:A:624:ILE:HG21	0.45	1.88	8	2
1:A:519:GLN:O	1:A:546:ILE:HD13	0.45	2.11	9	1
1:A:639:GLU:O	1:A:643:PHE:HB3	0.45	2.11	9	1
1:A:530:ASP:OD1	1:A:601:VAL:HB	0.45	2.10	10	1
1:A:480:ILE:HD13	1:A:519:GLN:NE2	0.45	2.26	2	2
1:A:599:ASN:ND2	1:A:611:LYS:O	0.45	2.45	9	3
1:A:530:ASP:CG	1:A:595:LYS:HE2	0.45	2.36	3	1
1:A:493:LYS:HE3	1:A:542:GLN:HE21	0.45	1.70	5	1
1:A:644:ASP:O	1:A:645:LYS:C	0.45	2.52	5	1
1:A:516:ARG:CZ	1:A:608:VAL:CG1	0.45	2.95	6	1
1:A:524:LEU:O	1:A:528:ARG:CA	0.45	2.64	6	1
1:A:596:ALA:HB1	1:A:597:ARG:NH1	0.45	2.26	10	2
1:A:517:GLN:CG	1:A:521:GLU:OE2	0.45	2.65	3	1
1:A:504:VAL:O	1:A:506:PRO:HD3	0.45	2.11	4	1
1:A:548:LEU:HD21	1:A:553:VAL:HG11	0.45	1.88	4	1
1:A:594:PHE:CB	1:A:601:VAL:HA	0.45	2.41	5	2
1:A:594:PHE:HB3	1:A:600:THR:O	0.45	2.11	5	1
1:A:624:ILE:O	1:A:632:ALA:CA	0.45	2.64	6	1
1:A:488:TYR:HA	1:A:492:PHE:CE2	0.45	2.46	7	1
1:A:544:ASP:OD1	1:A:565:GLU:CB	0.45	2.65	7	1
1:A:482:ALA:HB2	1:A:540:LEU:CD2	0.45	2.42	10	1
1:A:487:HIS:CG	1:A:546:ILE:HG13	0.45	2.45	10	1
1:A:490:VAL:HG11	1:A:522:LYS:HZ1	0.45	1.69	1	1
1:A:583:GLU:C	1:A:585:LEU:N	0.45	2.71	8	4
1:A:488:TYR:HA	1:A:542:GLN:O	0.45	2.11	2	1
1:A:490:VAL:HB	1:A:519:GLN:OE1	0.45	2.12	3	1
1:A:487:HIS:ND1	1:A:546:ILE:HG13	0.45	2.26	4	1
1:A:494:PRO:O	1:A:495:LYS:CB	0.45	2.64	4	1
1:A:577:TRP:CE3	1:A:591:MET:HE3	0.45	2.46	4	1
1:A:543:PHE:O	1:A:565:GLU:HG2	0.45	2.11	6	1
1:A:575:GLN:HA	1:A:595:LYS:HZ1	0.45	1.72	6	1
1:A:532:VAL:O	1:A:545:ASN:HB2	0.45	2.12	7	1
1:A:576:ARG:HB3	1:A:681:VAL:O	0.45	2.12	7	1
1:A:543:PHE:HB2	1:A:563:ASP:HA	0.45	1.87	1	2
1:A:493:LYS:CE	1:A:542:GLN:NE2	0.45	2.78	5	1
1:A:543:PHE:CD2	1:A:700:VAL:HG12	0.45	2.46	8	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:480:ILE:HG13	1:A:499:GLN:H	0.45	1.71	9	1
1:A:488:TYR:CD1	1:A:563:ASP:HB3	0.45	2.47	10	1
1:A:643:PHE:CG	1:A:644:ASP:N	0.45	2.85	1	8
1:A:541:PRO:HG3	1:A:545:ASN:ND2	0.45	2.27	3	2
1:A:579:GLN:HB3	1:A:681:VAL:HG23	0.45	1.88	3	1
1:A:535:PHE:CE1	1:A:544:ASP:HB3	0.45	2.47	5	1
1:A:691:ARG:HD2	1:A:691:ARG:C	0.45	2.36	6	2
1:A:585:LEU:HB2	1:A:659:GLU:HG3	0.45	1.89	8	1
1:A:594:PHE:CE1	1:A:606:PRO:CD	0.45	3.00	8	1
1:A:490:VAL:CG2	1:A:541:PRO:O	0.45	2.65	1	1
1:A:545:ASN:C	1:A:546:ILE:CG2	0.45	2.90	3	1
1:A:524:LEU:O	1:A:525:ASP:C	0.45	2.55	5	3
1:A:533:PRO:HG3	1:A:581:ILE:HG23	0.45	1.88	7	1
1:A:480:ILE:HD13	1:A:540:LEU:O	0.45	2.12	9	1
1:A:607:PHE:H	1:A:656:LEU:HD21	0.45	1.70	10	1
1:A:488:TYR:O	1:A:548:LEU:HD12	0.45	2.12	2	1
1:A:490:VAL:HG13	1:A:491:PRO:N	0.45	2.27	10	2
1:A:497:VAL:CG2	1:A:498:GLU:N	0.45	2.80	2	1
1:A:518:LEU:HD12	1:A:540:LEU:HD22	0.45	1.89	3	1
1:A:521:GLU:HA	1:A:524:LEU:HD12	0.45	1.88	3	1
1:A:582:GLN:HA	1:A:605:GLU:OE1	0.45	2.11	6	1
1:A:487:HIS:NE2	1:A:543:PHE:C	0.45	2.75	7	1
1:A:603:HIS:HA	1:A:624:ILE:HD13	0.45	1.88	7	1
1:A:493:LYS:CE	1:A:497:VAL:HG12	0.45	2.42	8	1
1:A:490:VAL:CG2	1:A:522:LYS:NZ	0.45	2.80	10	1
1:A:523:ARG:NH2	1:A:612:GLU:OE2	0.45	2.48	7	1
1:A:484:ARG:O	1:A:485:MET:HB3	0.45	2.11	8	1
1:A:601:VAL:CG2	1:A:612:GLU:HG2	0.45	2.42	8	1
1:A:625:VAL:HG22	1:A:633:THR:OG1	0.45	2.12	8	1
1:A:487:HIS:O	1:A:541:PRO:O	0.44	2.35	2	1
1:A:577:TRP:HA	1:A:682:HIS:HE1	0.44	1.71	8	3
1:A:509:PHE:CD1	1:A:649:GLU:OE2	0.44	2.70	3	1
1:A:535:PHE:CE1	1:A:543:PHE:CZ	0.44	3.05	4	1
1:A:538:GLN:HG3	1:A:699:ASP:CB	0.44	2.43	4	1
1:A:635:LYS:O	1:A:636:ARG:C	0.44	2.60	5	1
1:A:536:LYS:HD3	1:A:604:GLN:O	0.44	2.12	8	1
1:A:523:ARG:HH12	1:A:531:GLU:CA	0.44	2.25	3	1
1:A:523:ARG:CA	1:A:546:ILE:CG2	0.44	2.96	4	1
1:A:579:GLN:OE1	1:A:680:LEU:O	0.44	2.35	4	3
1:A:579:GLN:OE1	1:A:679:GLU:HA	0.44	2.13	5	1
1:A:585:LEU:C	1:A:585:LEU:HD23	0.44	2.37	5	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:616:LEU:HD12	1:A:631:LEU:HD11	0.44	1.86	5	1
1:A:497:VAL:HG13	1:A:542:GLN:CD	0.44	2.37	9	1
1:A:675:GLN:CD	1:A:689:LYS:HG3	0.44	2.38	7	5
1:A:485:MET:CB	1:A:486:PRO:HD2	0.44	2.43	2	4
1:A:488:TYR:HB2	1:A:543:PHE:O	0.44	2.12	2	1
1:A:482:ALA:O	1:A:518:LEU:HB3	0.44	2.13	3	1
1:A:507:PHE:CE2	1:A:535:PHE:C	0.44	2.96	3	1
1:A:521:GLU:O	1:A:522:LYS:C	0.44	2.57	6	2
1:A:536:LYS:HG2	1:A:656:LEU:CD2	0.44	2.43	3	1
1:A:487:HIS:CD2	1:A:546:ILE:C	0.44	2.94	5	1
1:A:533:PRO:O	1:A:535:PHE:CZ	0.44	2.69	5	1
1:A:513:ASP:O	1:A:516:ARG:N	0.44	2.51	7	1
1:A:594:PHE:HE2	1:A:603:HIS:CD2	0.44	2.31	10	2
1:A:523:ARG:NH2	1:A:530:ASP:H	0.44	2.02	8	1
1:A:561:PRO:HD3	1:A:703:THR:HG21	0.44	1.87	9	1
1:A:705:PRO:HB3	1:A:713:ARG:HE	0.44	1.71	10	1
1:A:493:LYS:HZ3	1:A:700:VAL:HG11	0.44	1.73	2	1
1:A:542:GLN:CG	1:A:543:PHE:N	0.44	2.80	9	2
1:A:535:PHE:CE1	1:A:543:PHE:CE1	0.44	3.05	4	1
1:A:609:PRO:HB3	1:A:613:ASN:HB2	0.44	1.90	4	1
1:A:487:HIS:NE2	1:A:546:ILE:O	0.44	2.50	6	1
1:A:507:PHE:O	1:A:656:LEU:HD12	0.44	2.13	7	1
1:A:487:HIS:N	1:A:546:ILE:HG12	0.44	2.28	3	1
1:A:487:HIS:NE2	1:A:545:ASN:N	0.44	2.66	4	1
1:A:520:LYS:HB2	1:A:534:LYS:NZ	0.44	2.26	5	1
1:A:485:MET:HB2	1:A:490:VAL:HG23	0.44	1.90	7	1
1:A:492:PHE:HB3	1:A:541:PRO:O	0.44	2.12	8	1
1:A:536:LYS:HD2	1:A:656:LEU:HD22	0.44	1.89	8	1
1:A:527:LEU:HD23	1:A:547:ARG:HE	0.44	1.72	9	1
1:A:480:ILE:HD11	1:A:497:VAL:CG2	0.44	2.43	2	1
1:A:694:GLU:C	1:A:696:LYS:H	0.44	2.21	3	3
1:A:487:HIS:HA	1:A:519:GLN:OE1	0.44	2.11	3	1
1:A:514:LYS:HG3	1:A:517:GLN:NE2	0.44	2.28	3	1
1:A:487:HIS:CD2	1:A:546:ILE:O	0.44	2.70	6	1
1:A:624:ILE:C	1:A:626:GLN:N	0.44	2.75	6	2
1:A:537:ALA:C	1:A:660:GLU:HB2	0.44	2.37	9	1
1:A:487:HIS:CA	1:A:541:PRO:HB3	0.44	2.43	10	1
1:A:543:PHE:CG	1:A:544:ASP:N	0.44	2.85	10	1
1:A:519:GLN:NE2	1:A:541:PRO:HD3	0.44	2.27	2	2
1:A:542:GLN:CG	1:A:543:PHE:H	0.44	2.25	3	1
1:A:531:GLU:HG3	1:A:534:LYS:N	0.44	2.27	4	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:580:GLN:HG2	1:A:674:SER:OG	0.44	2.12	7	2
1:A:629:PHE:CE1	1:A:648:ALA:HB1	0.44	2.48	5	1
1:A:579:GLN:O	1:A:583:GLU:HB2	0.44	2.12	7	1
1:A:602:VAL:CG1	1:A:613:ASN:OD1	0.44	2.65	8	2
1:A:577:TRP:HZ3	1:A:591:MET:CE	0.44	2.25	9	1
1:A:487:HIS:ND1	1:A:546:ILE:CG1	0.44	2.80	1	1
1:A:616:LEU:CD1	1:A:631:LEU:HD11	0.44	2.42	2	2
1:A:508:SER:O	1:A:516:ARG:NH1	0.44	2.51	2	1
1:A:513:ASP:OD1	1:A:608:VAL:HG21	0.44	2.13	2	1
1:A:533:PRO:CG	1:A:581:ILE:HG21	0.44	2.42	3	2
1:A:546:ILE:CG1	1:A:547:ARG:N	0.44	2.81	2	1
1:A:488:TYR:CD1	1:A:563:ASP:CG	0.44	2.96	3	1
1:A:536:LYS:HB3	1:A:656:LEU:HB3	0.44	1.90	3	1
1:A:546:ILE:HG13	1:A:547:ARG:H	0.44	1.73	4	1
1:A:527:LEU:C	1:A:529:LYS:N	0.44	2.76	7	1
1:A:536:LYS:HD3	1:A:656:LEU:O	0.44	2.13	7	1
1:A:627:GLU:OE2	1:A:629:PHE:O	0.44	2.35	9	3
1:A:543:PHE:HD1	1:A:543:PHE:H	0.44	1.51	9	1
1:A:675:GLN:NE2	1:A:682:HIS:O	0.44	2.50	9	1
1:A:594:PHE:O	1:A:600:THR:C	0.44	2.60	1	3
1:A:523:ARG:HH12	1:A:530:ASP:H	0.44	1.54	2	2
1:A:534:LYS:HE2	1:A:608:VAL:HG22	0.44	1.90	3	1
1:A:530:ASP:CB	1:A:594:PHE:O	0.44	2.66	6	1
1:A:656:LEU:O	1:A:657:LEU:C	0.44	2.61	6	3
1:A:689:LYS:O	1:A:691:ARG:N	0.44	2.37	8	1
1:A:480:ILE:HD11	1:A:542:GLN:HB3	0.43	1.90	3	1
1:A:509:PHE:CB	1:A:513:ASP:HB2	0.43	2.42	3	1
1:A:523:ARG:HD3	1:A:532:VAL:HG23	0.43	1.88	3	1
1:A:598:PRO:O	1:A:600:THR:HG23	0.43	2.13	5	1
1:A:487:HIS:CB	1:A:541:PRO:HB2	0.43	2.43	7	1
1:A:488:TYR:N	1:A:544:ASP:HB3	0.43	2.27	7	1
1:A:499:GLN:O	1:A:500:ARG:CB	0.43	2.66	10	1
1:A:528:ARG:O	1:A:529:LYS:C	0.43	2.60	3	1
1:A:533:PRO:C	1:A:535:PHE:H	0.43	2.21	6	1
1:A:487:HIS:CE1	1:A:541:PRO:O	0.43	2.70	7	1
1:A:536:LYS:HG3	1:A:656:LEU:HD22	0.43	1.88	9	1
1:A:542:GLN:HE21	1:A:542:GLN:C	0.43	2.20	10	1
1:A:536:LYS:CB	1:A:656:LEU:CD2	0.43	2.96	4	1
1:A:615:SER:C	1:A:631:LEU:HD11	0.43	2.37	5	1
1:A:520:LYS:HA	1:A:534:LYS:CD	0.43	2.43	6	1
1:A:608:VAL:C	1:A:613:ASN:ND2	0.43	2.76	10	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:497:VAL:HG21	1:A:539:PRO:HG2	0.43	1.90	8	1
1:A:577:TRP:HA	1:A:682:HIS:CE1	0.43	2.48	8	2
1:A:485:MET:HE3	1:A:552:LYS:O	0.43	2.14	9	1
1:A:519:GLN:HB2	1:A:541:PRO:HB3	0.43	1.89	9	1
1:A:544:ASP:OD1	1:A:565:GLU:HG3	0.43	2.13	3	1
1:A:492:PHE:CD1	1:A:557:THR:CG2	0.43	3.00	4	1
1:A:540:LEU:N	1:A:540:LEU:CD2	0.43	2.80	4	2
1:A:689:LYS:HA	1:A:703:THR:CB	0.43	2.44	4	1
1:A:539:PRO:O	1:A:542:GLN:HG3	0.43	2.12	6	1
1:A:603:HIS:ND1	1:A:604:GLN:OE1	0.43	2.51	6	1
1:A:661:ILE:HA	1:A:699:ASP:OD1	0.43	2.13	10	2
1:A:579:GLN:O	1:A:583:GLU:HG3	0.43	2.13	3	2
1:A:603:HIS:C	1:A:605:GLU:H	0.43	2.22	4	1
1:A:546:ILE:HD12	1:A:547:ARG:O	0.43	2.12	5	1
1:A:616:LEU:HG	1:A:623:SER:CB	0.43	2.42	5	1
1:A:487:HIS:HA	1:A:490:VAL:HB	0.43	1.89	8	1
1:A:536:LYS:HZ1	1:A:537:ALA:HB2	0.43	1.74	8	1
1:A:594:PHE:CZ	1:A:605:GLU:HB2	0.43	2.49	8	1
1:A:538:GLN:CG	1:A:660:GLU:HB3	0.43	2.42	9	1
1:A:639:GLU:HB3	1:A:643:PHE:CB	0.43	2.43	9	1
1:A:488:TYR:HB3	1:A:544:ASP:OD2	0.43	2.14	3	1
1:A:496:LEU:HD12	1:A:496:LEU:N	0.43	2.27	3	1
1:A:652:ALA:O	1:A:655:SER:HB3	0.43	2.13	6	2
1:A:593:VAL:HB	1:A:626:GLN:OE1	0.43	2.14	10	2
1:A:603:HIS:CE1	1:A:626:GLN:NE2	0.43	2.86	9	1
1:A:630:GLU:N	1:A:651:GLU:OE2	0.43	2.50	10	1
1:A:523:ARG:CG	1:A:546:ILE:HA	0.43	2.43	2	1
1:A:490:VAL:CB	1:A:519:GLN:OE1	0.43	2.67	3	1
1:A:533:PRO:O	1:A:535:PHE:CG	0.43	2.72	5	1
1:A:531:GLU:HB3	1:A:606:PRO:HB3	0.43	1.91	10	2
1:A:534:LYS:HG2	1:A:606:PRO:HA	0.43	1.88	6	1
1:A:519:GLN:O	1:A:520:LYS:C	0.43	2.59	7	1
1:A:493:LYS:HG3	1:A:542:GLN:HB2	0.43	1.91	8	1
1:A:604:GLN:OE1	1:A:627:GLU:O	0.43	2.36	9	1
1:A:519:GLN:C	1:A:534:LYS:HA	0.43	2.39	1	1
1:A:694:GLU:C	1:A:696:LYS:N	0.43	2.77	2	3
1:A:516:ARG:NH2	1:A:608:VAL:CG2	0.43	2.82	4	1
1:A:522:LYS:HB3	1:A:545:ASN:HB3	0.43	1.89	7	1
1:A:543:PHE:CZ	1:A:581:ILE:CD1	0.43	3.01	7	1
1:A:523:ARG:HB2	1:A:545:ASN:CA	0.43	2.43	1	1
1:A:580:GLN:CA	1:A:681:VAL:CG2	0.43	2.97	1	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:691:ARG:O	1:A:691:ARG:CG	0.43	2.66	4	2
1:A:487:HIS:N	1:A:490:VAL:HB	0.43	2.29	7	1
1:A:561:PRO:HG2	1:A:562:PHE:N	0.43	2.23	7	1
1:A:582:GLN:CG	1:A:605:GLU:OE2	0.43	2.67	7	2
1:A:487:HIS:HE1	1:A:488:TYR:CD2	0.43	2.32	9	2
1:A:603:HIS:HB3	1:A:606:PRO:HD2	0.43	1.90	8	1
1:A:487:HIS:CD2	1:A:488:TYR:CB	0.43	3.02	1	1
1:A:573:LYS:O	1:A:575:GLN:N	0.43	2.52	1	2
1:A:520:LYS:HD3	1:A:608:VAL:HG22	0.43	1.90	2	1
1:A:507:PHE:CD2	1:A:516:ARG:HD3	0.43	2.49	3	1
1:A:530:ASP:N	1:A:595:LYS:HD3	0.43	2.29	3	1
1:A:538:GLN:NE2	1:A:542:GLN:OE1	0.43	2.52	3	1
1:A:543:PHE:CD1	1:A:543:PHE:O	0.43	2.72	6	2
1:A:602:VAL:HG12	1:A:606:PRO:O	0.43	2.14	5	1
1:A:624:ILE:HG22	1:A:626:GLN:HB3	0.43	1.90	5	1
1:A:542:GLN:CD	1:A:543:PHE:CD1	0.42	2.97	3	1
1:A:560:GLU:HB3	1:A:561:PRO:HD2	0.42	1.90	3	2
1:A:671:GLU:OE2	1:A:698:SER:C	0.42	2.62	3	1
1:A:604:GLN:HB2	1:A:655:SER:OG	0.42	2.14	6	1
1:A:480:ILE:CD1	1:A:497:VAL:HG23	0.42	2.43	7	1
1:A:493:LYS:HE2	1:A:497:VAL:HG12	0.42	1.89	8	1
1:A:548:LEU:C	1:A:548:LEU:HD23	0.42	2.39	3	2
1:A:585:LEU:HD23	1:A:589:LYS:HB3	0.42	1.90	3	1
1:A:675:GLN:NE2	1:A:689:LYS:HG3	0.42	2.30	6	2
1:A:675:GLN:HE22	1:A:690:TYR:CA	0.42	2.27	5	1
1:A:697:ALA:C	1:A:702:LEU:HD23	0.42	2.39	5	1
1:A:520:LYS:HG3	1:A:608:VAL:HG21	0.42	1.91	6	1
1:A:538:GLN:CG	1:A:539:PRO:HD2	0.42	2.43	6	1
1:A:487:HIS:NE2	1:A:543:PHE:N	0.42	2.67	7	1
1:A:584:GLU:C	1:A:659:GLU:O	0.42	2.62	9	1
1:A:509:PHE:CB	1:A:516:ARG:HH22	0.42	2.27	6	1
1:A:602:VAL:HG11	1:A:613:ASN:OD1	0.42	2.15	8	2
1:A:607:PHE:HB3	1:A:656:LEU:HD11	0.42	1.90	9	1
1:A:603:HIS:CE1	1:A:604:GLN:CD	0.42	2.97	1	1
1:A:616:LEU:CB	1:A:636:ARG:HD3	0.42	2.44	9	2
1:A:535:PHE:CZ	1:A:543:PHE:CE1	0.42	3.07	4	1
1:A:605:GLU:HG2	1:A:659:GLU:OE2	0.42	2.14	4	1
1:A:496:LEU:HA	1:A:539:PRO:HG3	0.42	1.90	5	1
1:A:520:LYS:CB	1:A:534:LYS:HZ3	0.42	2.26	5	1
1:A:533:PRO:O	1:A:535:PHE:CE1	0.42	2.72	5	1
1:A:624:ILE:HD12	1:A:628:GLY:CA	0.42	2.43	5	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:539:PRO:O	1:A:540:LEU:O	0.42	2.37	6	1
1:A:516:ARG:HD2	1:A:534:LYS:NZ	0.42	2.29	7	1
1:A:543:PHE:CD2	1:A:562:PHE:CE1	0.42	3.06	7	1
1:A:577:TRP:CE2	1:A:581:ILE:CG1	0.42	3.03	7	1
1:A:493:LYS:NZ	1:A:543:PHE:HA	0.42	2.28	9	1
1:A:544:ASP:HA	1:A:565:GLU:CG	0.42	2.44	10	1
1:A:704:VAL:CG2	1:A:705:PRO:HD2	0.42	2.44	1	1
1:A:520:LYS:HD2	1:A:534:LYS:CB	0.42	2.44	3	1
1:A:531:GLU:HG3	1:A:533:PRO:CA	0.42	2.44	3	1
1:A:585:LEU:CD1	1:A:604:GLN:HG3	0.42	2.44	4	1
1:A:639:GLU:O	1:A:643:PHE:HB2	0.42	2.15	5	1
1:A:600:THR:HG23	1:A:622:GLY:CA	0.42	2.44	6	2
1:A:486:PRO:CG	1:A:548:LEU:HD11	0.42	2.43	7	1
1:A:533:PRO:CG	1:A:581:ILE:HG23	0.42	2.45	7	1
1:A:691:ARG:HB2	1:A:702:LEU:N	0.42	2.30	7	1
1:A:585:LEU:CD1	1:A:604:GLN:HE21	0.42	2.26	8	1
1:A:595:LYS:CG	1:A:601:VAL:HG12	0.42	2.44	8	1
1:A:488:TYR:CG	1:A:543:PHE:HA	0.42	2.50	1	1
1:A:493:LYS:HG3	1:A:542:GLN:HB3	0.42	1.92	1	1
1:A:496:LEU:HD13	1:A:500:ARG:HG3	0.42	1.90	1	1
1:A:593:VAL:O	1:A:595:LYS:N	0.42	2.53	10	3
1:A:537:ALA:HB1	1:A:538:GLN:NE2	0.42	2.29	2	1
1:A:538:GLN:OE1	1:A:700:VAL:HG13	0.42	2.14	2	1
1:A:523:ARG:O	1:A:527:LEU:C	0.42	2.62	3	1
1:A:543:PHE:CE2	1:A:700:VAL:CG1	0.42	3.02	3	1
1:A:580:GLN:CB	1:A:681:VAL:HG21	0.42	2.44	4	1
1:A:487:HIS:HB3	1:A:541:PRO:HB2	0.42	1.90	7	1
1:A:585:LEU:HB2	1:A:659:GLU:HA	0.42	1.91	8	1
1:A:627:GLU:C	1:A:628:GLY:O	0.42	2.62	9	2
1:A:527:LEU:O	1:A:529:LYS:N	0.42	2.51	6	3
1:A:602:VAL:HG23	1:A:624:ILE:CG1	0.42	2.45	5	1
1:A:593:VAL:CG2	1:A:626:GLN:HB2	0.42	2.43	6	1
1:A:523:ARG:HA	1:A:545:ASN:OD1	0.42	2.14	7	1
1:A:490:VAL:HG21	1:A:519:GLN:NE2	0.42	2.30	9	1
1:A:627:GLU:HA	1:A:632:ALA:HB2	0.42	1.92	1	3
1:A:609:PRO:O	1:A:610:LYS:CB	0.42	2.68	2	1
1:A:488:TYR:HB2	1:A:565:GLU:HG3	0.42	1.90	4	1
1:A:690:TYR:O	1:A:692:ALA:N	0.42	2.50	5	1
1:A:534:LYS:HE3	1:A:608:VAL:HG22	0.42	1.92	6	1
1:A:681:VAL:CG1	1:A:682:HIS:N	0.42	2.83	7	1
1:A:607:PHE:O	1:A:613:ASN:OD1	0.42	2.37	3	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:508:SER:O	1:A:509:PHE:CB	0.42	2.65	4	1
1:A:488:TYR:HB3	1:A:544:ASP:CB	0.42	2.45	7	1
1:A:480:ILE:HG13	1:A:499:GLN:HB2	0.42	1.91	9	1
1:A:487:HIS:CE1	1:A:543:PHE:CA	0.42	3.03	9	1
1:A:605:GLU:HA	1:A:659:GLU:OE1	0.42	2.15	9	1
1:A:582:GLN:HA	1:A:605:GLU:CD	0.42	2.39	10	1
1:A:480:ILE:HG12	1:A:540:LEU:HB3	0.42	1.91	1	1
1:A:507:PHE:CE2	1:A:534:LYS:NZ	0.42	2.88	2	1
1:A:557:THR:HG22	1:A:560:GLU:CD	0.42	2.40	2	1
1:A:616:LEU:HD13	1:A:631:LEU:HD21	0.42	1.90	3	1
1:A:488:TYR:HE2	1:A:548:LEU:HD23	0.42	1.72	5	1
1:A:538:GLN:CD	1:A:700:VAL:HG22	0.42	2.40	6	1
1:A:560:GLU:C	1:A:703:THR:OG1	0.42	2.63	8	2
1:A:505:CYS:SG	1:A:507:PHE:CE1	0.42	3.13	9	2
1:A:518:LEU:O	1:A:521:GLU:HB2	0.42	2.14	7	1
1:A:612:GLU:C	1:A:614:ARG:N	0.42	2.78	7	1
1:A:562:PHE:C	1:A:564:LEU:H	0.42	2.22	8	1
1:A:535:PHE:CE1	1:A:543:PHE:HD1	0.42	2.33	9	1
1:A:577:TRP:O	1:A:580:GLN:N	0.42	2.53	9	1
1:A:538:GLN:HA	1:A:700:VAL:HG22	0.41	1.91	2	1
1:A:562:PHE:CE1	1:A:577:TRP:HD1	0.41	2.33	2	1
1:A:486:PRO:O	1:A:490:VAL:HB	0.41	2.15	3	2
1:A:584:GLU:CB	1:A:659:GLU:O	0.41	2.66	3	1
1:A:552:LYS:O	1:A:554:LYS:N	0.41	2.48	8	2
1:A:488:TYR:CZ	1:A:566:ILE:HG12	0.41	2.50	7	1
1:A:480:ILE:HG13	1:A:499:GLN:CD	0.41	2.40	8	1
1:A:516:ARG:C	1:A:518:LEU:N	0.41	2.78	9	1
1:A:631:LEU:HD12	1:A:643:PHE:CZ	0.41	2.51	1	1
1:A:661:ILE:HG12	1:A:699:ASP:OD1	0.41	2.16	1	1
1:A:533:PRO:O	1:A:545:ASN:CG	0.41	2.63	3	1
1:A:615:SER:O	1:A:617:THR:N	0.41	2.53	5	1
1:A:633:THR:C	1:A:635:LYS:N	0.41	2.78	7	1
1:A:487:HIS:HE1	1:A:488:TYR:CZ	0.41	2.32	9	1
1:A:534:LYS:HE2	1:A:606:PRO:HA	0.41	1.91	10	1
1:A:564:LEU:HD22	1:A:570:GLY:N	0.41	2.30	10	1
1:A:631:LEU:HD13	1:A:643:PHE:CZ	0.41	2.50	10	1
1:A:487:HIS:HB2	1:A:545:ASN:HB2	0.41	1.92	1	1
1:A:488:TYR:CD2	1:A:542:GLN:O	0.41	2.72	1	1
1:A:535:PHE:CE1	1:A:544:ASP:CG	0.41	2.98	1	1
1:A:675:GLN:HG3	1:A:689:LYS:HE3	0.41	1.91	1	1
1:A:597:ARG:HB3	1:A:598:PRO:CD	0.41	2.45	9	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:537:ALA:HB1	1:A:543:PHE:CE1	0.41	2.50	7	1
1:A:493:LYS:HE2	1:A:542:GLN:CD	0.41	2.39	10	1
1:A:530:ASP:CG	1:A:531:GLU:N	0.41	2.78	10	1
1:A:579:GLN:HG2	1:A:583:GLU:OE1	0.41	2.14	6	3
1:A:497:VAL:HG13	1:A:499:GLN:CG	0.41	2.44	7	1
1:A:523:ARG:NH2	1:A:612:GLU:CD	0.41	2.78	7	1
1:A:487:HIS:NE2	1:A:544:ASP:C	0.41	2.78	8	1
1:A:580:GLN:H	1:A:681:VAL:CG2	0.41	2.26	8	1
1:A:609:PRO:HG3	1:A:613:ASN:HD22	0.41	1.74	9	1
1:A:487:HIS:HE1	1:A:565:GLU:CB	0.41	2.28	10	1
1:A:535:PHE:CD1	1:A:537:ALA:CB	0.41	3.03	1	2
1:A:520:LYS:HD3	1:A:608:VAL:CG2	0.41	2.46	2	1
1:A:538:GLN:HB3	1:A:700:VAL:HG22	0.41	1.91	2	1
1:A:542:GLN:CD	1:A:542:GLN:N	0.41	2.77	2	1
1:A:630:GLU:OE1	1:A:639:GLU:OE2	0.41	2.37	3	1
1:A:577:TRP:CZ2	1:A:581:ILE:CG2	0.41	3.04	5	1
1:A:654:LYS:O	1:A:658:GLU:CB	0.41	2.68	5	1
1:A:620:LEU:C	1:A:622:GLY:H	0.41	2.22	6	1
1:A:599:ASN:CB	1:A:621:SER:O	0.41	2.68	9	1
1:A:582:GLN:O	1:A:585:LEU:HB3	0.41	2.15	10	1
1:A:534:LYS:HE3	1:A:608:VAL:CG1	0.41	2.45	1	1
1:A:488:TYR:CZ	1:A:557:THR:HG22	0.41	2.50	3	1
1:A:576:ARG:O	1:A:577:TRP:C	0.41	2.63	3	1
1:A:643:PHE:HA	1:A:647:LEU:HD12	0.41	1.92	3	2
1:A:502:VAL:HG13	1:A:661:ILE:HG21	0.41	1.91	6	1
1:A:616:LEU:HB3	1:A:636:ARG:HD3	0.41	1.92	7	1
1:A:536:LYS:HE3	1:A:537:ALA:N	0.41	2.30	8	1
1:A:509:PHE:HD2	1:A:516:ARG:HH22	0.41	1.59	9	1
1:A:542:GLN:HG3	1:A:543:PHE:N	0.41	2.29	9	1
1:A:534:LYS:HD2	1:A:656:LEU:HD22	0.41	1.92	1	1
1:A:579:GLN:CB	1:A:681:VAL:HG23	0.41	2.46	3	1
1:A:509:PHE:CE1	1:A:609:PRO:CD	0.41	3.03	4	1
1:A:493:LYS:CE	1:A:542:GLN:HB3	0.41	2.45	6	1
1:A:575:GLN:HA	1:A:595:LYS:NZ	0.41	2.30	6	1
1:A:670:LYS:HA	1:A:673:ILE:HD11	0.41	1.92	8	1
1:A:584:GLU:HG3	1:A:660:GLU:OE1	0.41	2.15	9	1
1:A:544:ASP:OD1	1:A:544:ASP:N	0.41	2.53	4	1
1:A:500:ARG:HA	1:A:699:ASP:OD1	0.41	2.16	5	1
1:A:563:ASP:H	1:A:706:ARG:HD3	0.41	1.74	5	1
1:A:631:LEU:CD1	1:A:643:PHE:CE2	0.41	3.03	7	1
1:A:493:LYS:CE	1:A:497:VAL:CG1	0.41	2.99	8	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:585:LEU:CD1	1:A:587:GLN:H	0.41	2.29	8	1
1:A:487:HIS:CE1	1:A:488:TYR:CD1	0.41	3.09	9	1
1:A:585:LEU:HD21	1:A:604:GLN:CD	0.41	2.40	10	1
1:A:520:LYS:HG3	1:A:524:LEU:CD1	0.41	2.46	2	1
1:A:524:LEU:HA	1:A:595:LYS:NZ	0.41	2.31	2	1
1:A:480:ILE:CD1	1:A:542:GLN:HB3	0.41	2.45	3	1
1:A:623:SER:HB3	1:A:633:THR:HA	0.41	1.93	3	1
1:A:524:LEU:HD23	1:A:531:GLU:CD	0.41	2.41	4	1
1:A:480:ILE:CG2	1:A:518:LEU:HD12	0.41	2.44	6	1
1:A:493:LYS:HE3	1:A:542:GLN:CB	0.41	2.46	6	1
1:A:605:GLU:HG2	1:A:659:GLU:HG3	0.41	1.92	6	1
1:A:544:ASP:N	1:A:565:GLU:HG3	0.41	2.30	7	1
1:A:487:HIS:CD2	1:A:545:ASN:CB	0.41	3.04	8	1
1:A:523:ARG:HB2	1:A:546:ILE:HB	0.41	1.92	9	1
1:A:523:ARG:CZ	1:A:532:VAL:HG22	0.41	2.45	9	1
1:A:523:ARG:H	1:A:546:ILE:CG2	0.41	2.29	9	1
1:A:544:ASP:CG	1:A:577:TRP:HE1	0.41	2.22	9	1
1:A:616:LEU:HD23	1:A:623:SER:OG	0.41	2.15	9	1
1:A:493:LYS:N	1:A:494:PRO:HD3	0.41	2.31	10	1
1:A:639:GLU:C	1:A:643:PHE:HB2	0.41	2.40	10	1
1:A:509:PHE:O	1:A:510:CYS:CB	0.41	2.69	2	1
1:A:615:SER:HB3	1:A:616:LEU:H	0.41	1.39	2	1
1:A:516:ARG:HA	1:A:540:LEU:HD23	0.41	1.93	3	1
1:A:603:HIS:CD2	1:A:605:GLU:HG3	0.41	2.51	3	1
1:A:533:PRO:CB	1:A:605:GLU:HB3	0.41	2.46	5	1
1:A:497:VAL:H	1:A:539:PRO:HA	0.41	1.76	6	1
1:A:697:ALA:HB1	1:A:698:SER:H	0.41	1.33	6	1
1:A:487:HIS:ND1	1:A:492:PHE:CD2	0.41	2.89	7	1
1:A:544:ASP:OD1	1:A:565:GLU:HB3	0.41	2.16	7	1
1:A:513:ASP:CG	1:A:516:ARG:HH21	0.41	2.23	9	1
1:A:546:ILE:O	1:A:565:GLU:HB3	0.40	2.16	2	1
1:A:546:ILE:C	1:A:546:ILE:CD1	0.40	2.93	3	1
1:A:594:PHE:CE2	1:A:626:GLN:NE2	0.40	2.82	3	1
1:A:498:GLU:C	1:A:500:ARG:N	0.40	2.78	6	1
1:A:534:LYS:HE2	1:A:607:PHE:H	0.40	1.76	7	1
1:A:490:VAL:O	1:A:557:THR:HB	0.40	2.16	9	1
1:A:544:ASP:OD2	1:A:581:ILE:CG1	0.40	2.69	10	1
1:A:585:LEU:CD2	1:A:604:GLN:CG	0.40	2.99	2	1
1:A:517:GLN:CD	1:A:521:GLU:OE2	0.40	2.64	3	1
1:A:523:ARG:HB2	1:A:546:ILE:CA	0.40	2.45	3	1
1:A:537:ALA:HB1	1:A:542:GLN:CG	0.40	2.45	3	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:617:THR:OG1	1:A:618:GLU:N	0.40	2.53	4	1
1:A:689:LYS:HA	1:A:703:THR:CG2	0.40	2.46	4	1
1:A:593:VAL:HG22	1:A:625:VAL:O	0.40	2.15	6	1
1:A:534:LYS:O	1:A:534:LYS:HG3	0.40	2.16	8	1
1:A:574:LEU:HD11	1:A:591:MET:HE1	0.40	1.92	8	1
1:A:482:ALA:CB	1:A:540:LEU:HD22	0.40	2.43	10	1
1:A:488:TYR:CD1	1:A:488:TYR:C	0.40	2.99	10	1
1:A:480:ILE:H	1:A:498:GLU:HA	0.40	1.76	1	1
1:A:538:GLN:HG3	1:A:543:PHE:CZ	0.40	2.50	1	1
1:A:480:ILE:CD1	1:A:542:GLN:HA	0.40	2.47	3	1
1:A:534:LYS:HB2	1:A:606:PRO:HA	0.40	1.92	3	1
1:A:533:PRO:O	1:A:535:PHE:CD1	0.40	2.75	5	1
1:A:612:GLU:C	1:A:614:ARG:H	0.40	2.25	5	1
1:A:603:HIS:HB2	1:A:626:GLN:CD	0.40	2.40	6	1
1:A:629:PHE:CD1	1:A:655:SER:HA	0.40	2.51	7	1
1:A:493:LYS:CE	1:A:542:GLN:HG3	0.40	2.45	9	1
1:A:538:GLN:HE22	1:A:700:VAL:CB	0.40	2.29	9	1
1:A:713:ARG:HD3	1:A:714:PHE:H	0.40	1.75	9	1
1:A:675:GLN:NE2	1:A:690:TYR:HA	0.40	2.32	10	1
1:A:492:PHE:HD1	1:A:493:LYS:H	0.40	1.60	3	1
1:A:675:GLN:HG3	1:A:681:VAL:CG1	0.40	2.46	3	1
1:A:492:PHE:HA	1:A:542:GLN:HB3	0.40	1.93	4	1
1:A:487:HIS:CB	1:A:522:LYS:HD3	0.40	2.46	6	1
1:A:497:VAL:CG1	1:A:542:GLN:HA	0.40	2.39	9	1
1:A:543:PHE:CD1	1:A:562:PHE:O	0.40	2.74	2	1
1:A:533:PRO:HB3	1:A:605:GLU:O	0.40	2.16	3	1
1:A:487:HIS:CE1	1:A:546:ILE:H	0.40	2.35	4	1
1:A:574:LEU:CD1	1:A:591:MET:CE	0.40	3.00	4	1
1:A:586:LYS:O	1:A:587:GLN:HB2	0.40	2.16	5	1
1:A:493:LYS:HE3	1:A:540:LEU:O	0.40	2.17	7	1

6.3 Torsion angles

6.3.1 Protein backbone

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

Mol	Chain	Analysed	Favoured	Allowed	Outliers	Percentiles	
1	A	232/240 (97%)	148±4 (64±2%)	44±4 (19±2%)	40±1 (17±1%)	0	3
All	All	2320/2400 (97%)	1476 (64%)	444 (19%)	400 (17%)	0	3

All 71 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	480	ILE	10
1	A	485	MET	10
1	A	524	LEU	10
1	A	525	ASP	10
1	A	539	PRO	10
1	A	568	LYS	10
1	A	569	ARG	10
1	A	570	GLY	10
1	A	571	ALA	10
1	A	592	VAL	10
1	A	594	PHE	10
1	A	599	ASN	10
1	A	615	SER	10
1	A	617	THR	10
1	A	633	THR	10
1	A	643	PHE	10
1	A	644	ASP	10
1	A	655	SER	10
1	A	659	GLU	10
1	A	671	GLU	10
1	A	672	GLU	10
1	A	679	GLU	10
1	A	684	ALA	10
1	A	691	ARG	10
1	A	528	ARG	9
1	A	561	PRO	9
1	A	610	LYS	9
1	A	541	PRO	8
1	A	696	LYS	8
1	A	620	LEU	8
1	A	545	ASN	7
1	A	511	ASP	6
1	A	546	ILE	6
1	A	530	ASP	6
1	A	500	ARG	5
1	A	533	PRO	5

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	609	PRO	5
1	A	695	VAL	5
1	A	481	LYS	4
1	A	593	VAL	4
1	A	662	ARG	4
1	A	495	LYS	3
1	A	501	GLN	3
1	A	540	LEU	3
1	A	549	PRO	3
1	A	634	ALA	3
1	A	543	PHE	3
1	A	667	GLU	2
1	A	666	GLU	2
1	A	587	GLN	2
1	A	590	GLU	2
1	A	531	GLU	2
1	A	550	GLU	2
1	A	558	GLN	2
1	A	499	GLN	2
1	A	622	GLY	2
1	A	542	GLN	2
1	A	489	GLY	1
1	A	497	VAL	1
1	A	509	PHE	1
1	A	602	VAL	1
1	A	713	ARG	1
1	A	664	ARG	1
1	A	498	GLU	1
1	A	665	ARG	1
1	A	669	GLU	1
1	A	556	PRO	1
1	A	559	GLN	1
1	A	588	GLN	1
1	A	494	PRO	1
1	A	668	GLU	1

6.3.2 Protein sidechains ⓘ

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

Mol	Chain	Analysed	Rotameric	Outliers	Percentiles
1	A	217/224 (97%)	200±1 (92±1%)	17±1 (8±1%)	14 61
All	All	2170/2240 (97%)	2002 (92%)	168 (8%)	14 61

All 48 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	509	PHE	10
1	A	536	LYS	10
1	A	542	GLN	9
1	A	540	LEU	7
1	A	541	PRO	7
1	A	497	VAL	6
1	A	527	LEU	6
1	A	702	LEU	6
1	A	490	VAL	6
1	A	543	PHE	6
1	A	585	LEU	6
1	A	534	LYS	5
1	A	608	VAL	5
1	A	496	LEU	5
1	A	538	GLN	4
1	A	557	THR	4
1	A	560	GLU	4
1	A	546	ILE	4
1	A	703	THR	4
1	A	493	LYS	4
1	A	532	VAL	4
1	A	544	ASP	3
1	A	700	VAL	3
1	A	492	PHE	3
1	A	587	GLN	3
1	A	588	GLN	3
1	A	713	ARG	3
1	A	488	TYR	3
1	A	499	GLN	2
1	A	704	VAL	2
1	A	530	ASP	2
1	A	545	ASN	2
1	A	715	LYS	2
1	A	664	ARG	1
1	A	716	CYS	1
1	A	695	VAL	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	500	ARG	1
1	A	714	PHE	1
1	A	662	ARG	1
1	A	696	LYS	1
1	A	535	PHE	1
1	A	487	HIS	1
1	A	620	LEU	1
1	A	498	GLU	1
1	A	531	GLU	1
1	A	547	ARG	1
1	A	589	LYS	1
1	A	485	MET	1

6.3.3 RNA [i](#)

There are no RNA molecules in this entry.

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

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

6.5 Carbohydrates [i](#)

There are no oligosaccharides in this entry.

6.6 Ligand geometry [i](#)

There are no ligands in this entry.

6.7 Other polymers [i](#)

There are no such molecules in this entry.

6.8 Polymer linkage issues [i](#)

The following chains have linkage breaks:

Mol	Chain	Number of breaks
1	6-A	1
1	10-A	1
1	5-A	1

All chain breaks are listed below:

Model	Chain	Residue-1	Atom-1	Residue-2	Atom-2	Distance (Å)
6	A	626:GLN	C	627:GLU	N	1.20
10	A	626:GLN	C	627:GLU	N	1.20
5	A	623:SER	C	624:ILE	N	1.17

7 Chemical shift validation [i](#)

The completeness of assignment taking into account all chemical shift lists is 24% for the well-defined parts and 24% for the entire structure.

7.1 Chemical shift list 1

File name: `working_cs.cif`

Chemical shift list name: *starch_output*

7.1.1 Bookkeeping [i](#)

The following table shows the results of parsing the chemical shift list and reports the number of nuclei with statistically unusual chemical shifts.

Total number of shifts	851
Number of shifts mapped to atoms	851
Number of unparsed shifts	0
Number of shifts with mapping errors	0
Number of shifts with mapping warnings	0
Number of shift outliers (ShiftChecker)	0

7.1.2 Chemical shift referencing [i](#)

The following table shows the suggested chemical shift referencing corrections.

Nucleus	# values	Correction $\pm$ precision, ppm	Suggested action
$^{13}\text{C}_\alpha$	195	-0.81 ± 0.19	Should be checked
$^{13}\text{C}_\beta$	74	0.21 ± 0.28	None needed (< 0.5 ppm)
$^{13}\text{C}'$	132	-0.39 ± 0.23	None needed (< 0.5 ppm)
^{15}N	173	-0.03 ± 0.32	None needed (< 0.5 ppm)

7.1.3 Completeness of resonance assignments [i](#)

The following table shows the completeness of the chemical shift assignments for the well-defined regions of the structure. The overall completeness is 24%, i.e. 835 atoms were assigned a chemical shift out of a possible 3430. 0 out of 36 assigned methyl groups (LEU and VAL) were assigned stereospecifically.

	Total	^1H	^{13}C	^{15}N
Backbone	669/1137 (59%)	171/454 (38%)	325/466 (70%)	173/217 (80%)
Sidechain	131/2134 (6%)	0/1358 (0%)	131/659 (20%)	0/117 (0%)

Continued on next page...

Continued from previous page...

	Total	¹H	¹³C	¹⁵N
Aromatic	35/159 (22%)	0/81 (0%)	35/76 (46%)	0/2 (0%)
Overall	835/3430 (24%)	171/1893 (9%)	491/1201 (41%)	173/336 (51%)

Note: This is a solid-state NMR structure, where hydrogen atoms are typically not assigned a chemical shift value, which may lead to lower completeness of assignment measure.

The following table shows the completeness of the chemical shift assignments for the full structure. The overall completeness is 24%, i.e. 837 atoms were assigned a chemical shift out of a possible 3516. 0 out of 37 assigned methyl groups (LEU and VAL) were assigned stereospecifically.

	Total	¹H	¹³C	¹⁵N
Backbone	671/1168 (57%)	171/466 (37%)	327/480 (68%)	173/222 (78%)
Sidechain	131/2179 (6%)	0/1387 (0%)	131/674 (19%)	0/118 (0%)
Aromatic	35/169 (21%)	0/86 (0%)	35/81 (43%)	0/2 (0%)
Overall	837/3516 (24%)	171/1939 (9%)	493/1235 (40%)	173/342 (51%)

Note: This is a solid-state NMR structure, where hydrogen atoms are typically not assigned a chemical shift value, which may lead to lower completeness of assignment measure.

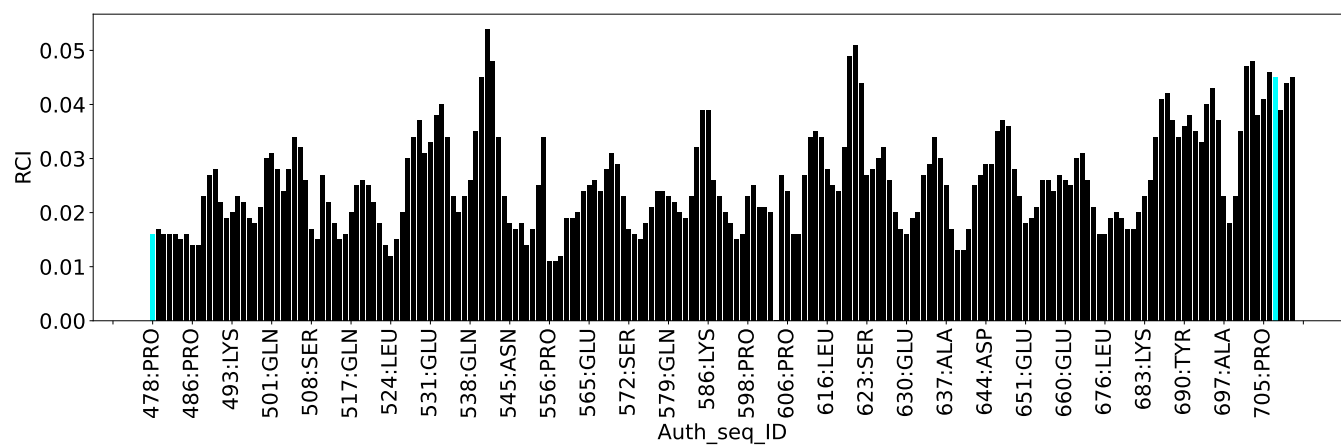
7.1.4 Statistically unusual chemical shifts ⓘ

There are no statistically unusual chemical shifts.

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	339
Intra-residue ($ i-j =0$)	172
Sequential ($ i-j =1$)	32
Medium range ($ i-j >1$ and $ i-j <5$)	35
Long range ($ i-j \geq 5$)	100
Inter-chain	0
Hydrogen bond restraints	0
Disulfide bond restraints	0
Total dihedral-angle restraints	288
Number of unmapped restraints	0
Number of restraints per residue	2.6
Number of long range restraints per residue ¹	0.4

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)	20.3	0.2
0.2-0.5 (Medium)	9.1	0.5
>0.5 (Large)	84.7	5.68

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)	45.9	10.0
10.0-20.0 (Medium)	23.5	19.91
>20.0 (Large)	61.0	108.94

9 Distance violation analysis ⓘ

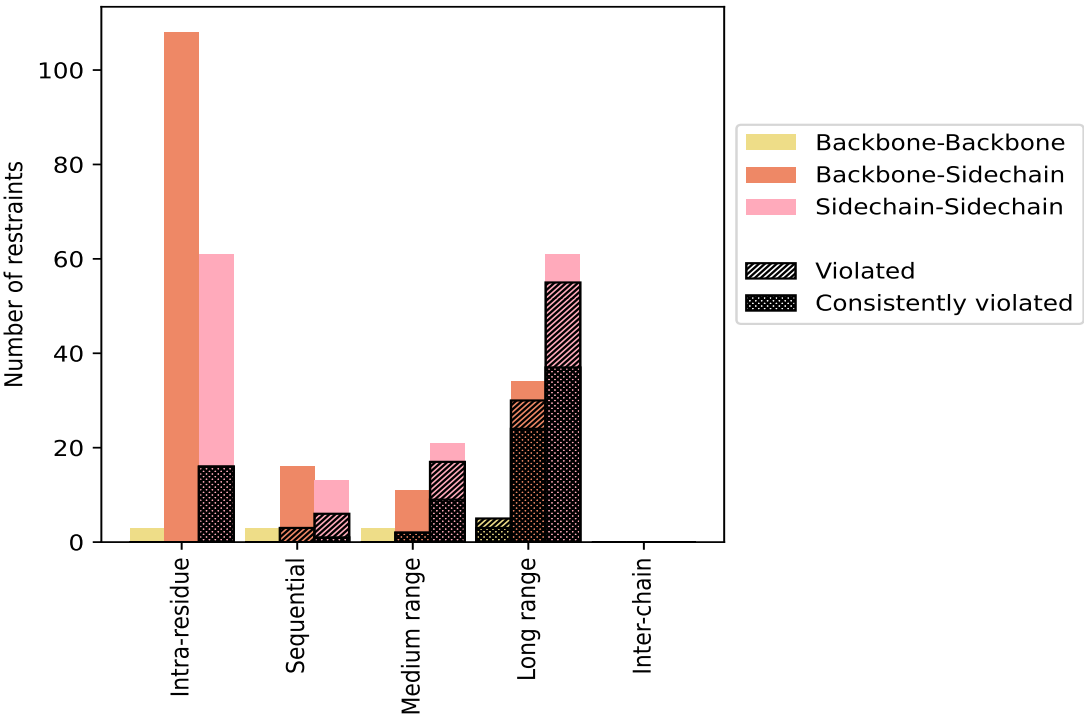
9.1 Summary of distance violations ⓘ

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)	172	50.7	16	9.3	4.7	16	9.3	4.7
Backbone-Backbone	3	0.9	0	0.0	0.0	0	0.0	0.0
Backbone-Sidechain	108	31.9	0	0.0	0.0	0	0.0	0.0
Sidechain-Sidechain	61	18.0	16	26.2	4.7	16	26.2	4.7
Sequential (i-j =1)	32	9.4	9	28.1	2.7	1	3.1	0.3
Backbone-Backbone	3	0.9	0	0.0	0.0	0	0.0	0.0
Backbone-Sidechain	16	4.7	3	18.8	0.9	0	0.0	0.0
Sidechain-Sidechain	13	3.8	6	46.2	1.8	1	7.7	0.3
Medium range (i-j >1 & i-j <5)	35	10.3	19	54.3	5.6	11	31.4	3.2
Backbone-Backbone	3	0.9	0	0.0	0.0	0	0.0	0.0
Backbone-Sidechain	11	3.2	2	18.2	0.6	2	18.2	0.6
Sidechain-Sidechain	21	6.2	17	81.0	5.0	9	42.9	2.7
Long range (i-j ≥5)	100	29.5	90	90.0	26.5	64	64.0	18.9
Backbone-Backbone	5	1.5	5	100.0	1.5	3	60.0	0.9
Backbone-Sidechain	34	10.0	30	88.2	8.8	24	70.6	7.1
Sidechain-Sidechain	61	18.0	55	90.2	16.2	37	60.7	10.9
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	0	0.0	0	0.0	0.0	0	0.0	0.0
Total	339	100.0	134	39.5	39.5	92	27.1	27.1
Backbone-Backbone	14	4.1	5	35.7	1.5	3	21.4	0.9
Backbone-Sidechain	169	49.9	35	20.7	10.3	26	15.4	7.7
Sidechain-Sidechain	156	46.0	94	60.3	27.7	63	40.4	18.6

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

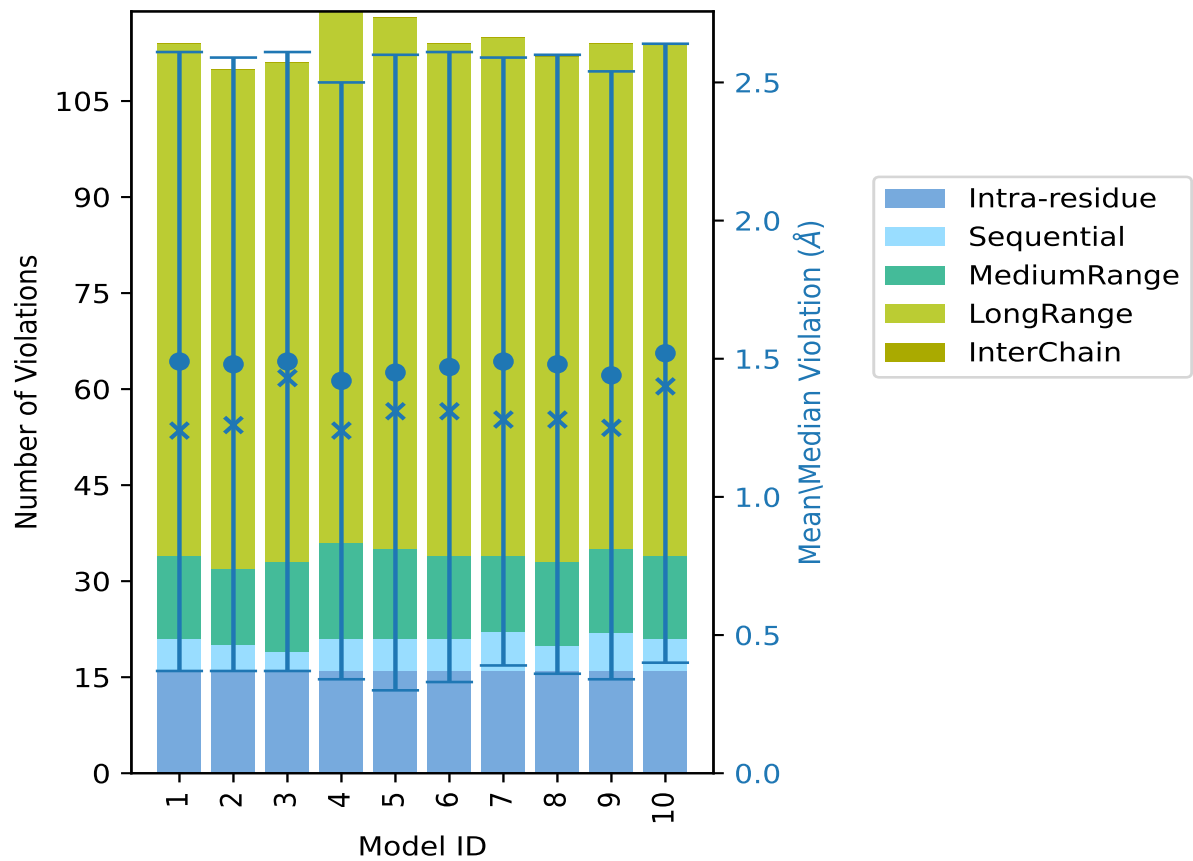
9.2 Distance violation statistics for each model [i](#)

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	16	5	13	80	0	114	1.49	4.94	1.12	1.24
2	16	4	12	78	0	110	1.48	4.94	1.11	1.26
3	16	3	14	78	0	111	1.49	5.52	1.12	1.43
4	16	5	15	83	0	119	1.42	4.96	1.08	1.24
5	16	5	14	83	0	118	1.45	5.68	1.15	1.31
6	16	5	13	80	0	114	1.47	5.49	1.14	1.31
7	16	6	12	81	0	115	1.49	4.76	1.1	1.28
8	16	4	13	79	0	112	1.48	4.95	1.12	1.28
9	16	6	13	79	0	114	1.44	5.26	1.1	1.25
10	16	5	13	80	0	114	1.52	5.33	1.12	1.4

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, 205(IR:156, SQ:23, MR:16, LR:10, IC:0) restraints are not violated in the ensemble.

Number of violated restraints						Fraction of the ensemble	
IR ¹	SQ ²	MR ³	LR ⁴	IC ⁵	Total	Count ⁶	%
0	2	3	3	0	8	1	10.0
0	0	3	1	0	4	2	20.0
0	1	0	1	0	2	3	30.0

Continued on next page...

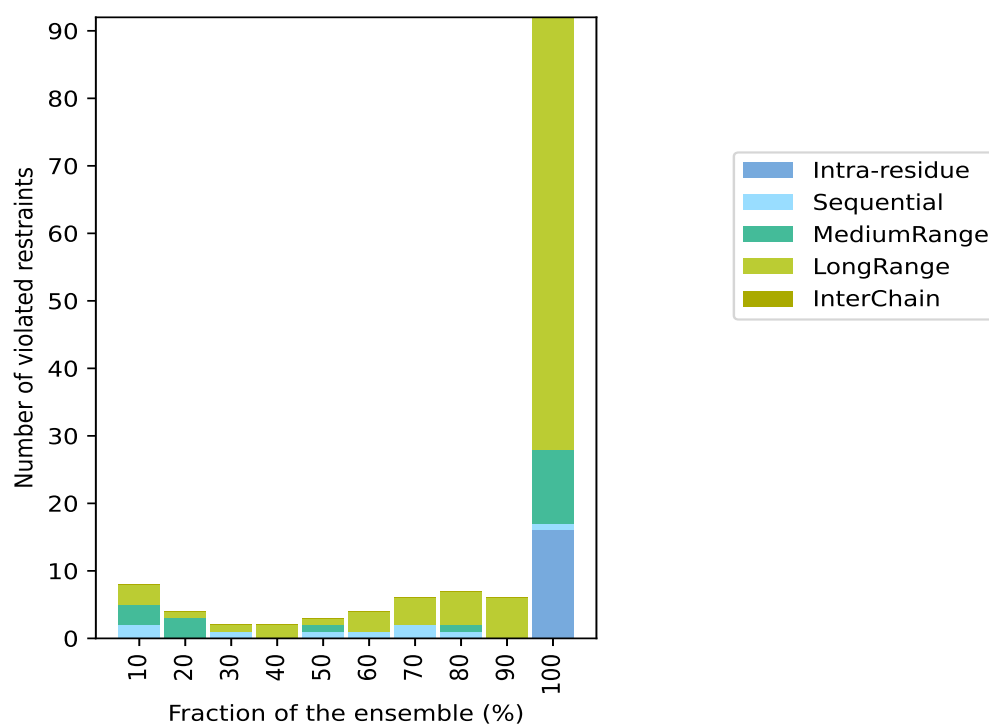
Continued from previous page...

Number of violated restraints						Fraction of the ensemble	
IR ¹	SQ ²	MR ³	LR ⁴	IC ⁵	Total	Count ⁶	%
0	0	0	2	0	2	4	40.0
0	1	1	1	0	3	5	50.0
0	1	0	3	0	4	6	60.0
0	2	0	4	0	6	7	70.0
0	1	1	5	0	7	8	80.0
0	0	0	6	0	6	9	90.0
16	1	11	64	0	92	10	100.0

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

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

9.3.1 Bar graph : Distance violation statistics for the ensemble ⓘ

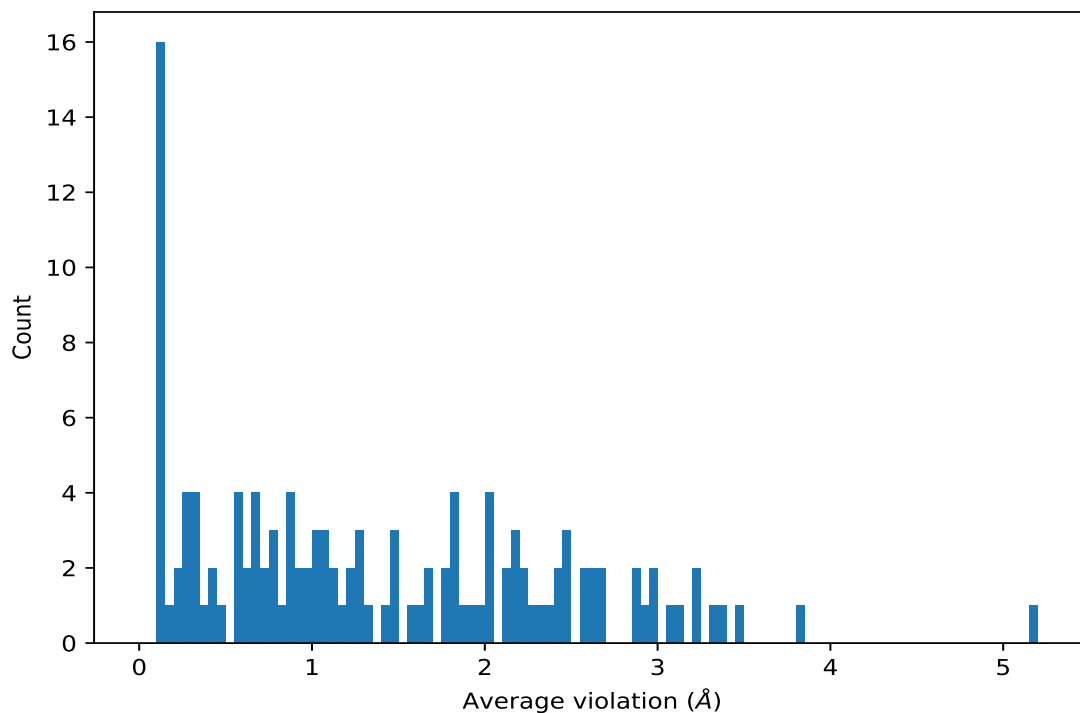


9.4 Most violated distance restraints in the ensemble ⓘ

9.4.1 Histogram : Distribution of mean distance 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



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)
(1,285)	1:627:A:GLU:CB	1:622:A:GLY:CA	10	5.18	0.3	5.11
(1,236)	1:594:A:PHE:CE1	1:627:A:GLU:CB	10	3.82	0.22	3.84
(1,227)	1:507:A:PHE:CD1	1:699:A:ASP:CA	10	3.46	0.4	3.49
(1,336)	1:624:A:ILE:CD1	1:531:A:GLU:CB	10	3.35	0.29	3.31
(1,290)	1:689:A:LYS:CB	1:684:A:ALA:CA	10	3.34	0.27	3.26
(1,250)	1:682:A:HIS:CG	1:577:A:TRP:CZ3	10	3.24	0.12	3.22
(1,338)	1:624:A:ILE:CD1	1:635:A:LYS:CA	10	3.21	0.12	3.27
(1,201)	1:482:A:ALA:CA	1:517:A:GLN:CG	10	3.12	0.72	3.28
(1,300)	1:606:A:PRO:CA	1:599:A:ASN:CA	10	3.06	0.2	3.05
(1,258)	1:507:A:PHE:CG	1:518:A:LEU:CB	10	2.95	0.51	3.1
(1,319)	1:488:A:TYR:CB	1:581:A:ILE:CG1	10	2.95	0.55	3.02
(1,190)	1:630:A:GLU:CA	1:616:A:LEU:CB	10	2.93	0.19	2.99
(1,235)	1:607:A:PHE:CE1	1:601:A:VAL:CB	10	2.87	0.26	2.95
(1,263)	1:594:A:PHE:CG	1:577:A:TRP:CD2	10	2.86	0.46	2.95
(1,145)	1:566:A:ILE:CD1	1:561:A:PRO:CG	10	2.69	0.22	2.76

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)	Median (Å)
(1,188)	1:593:A:VAL:CB	1:622:A:GLY:CA	10	2.68	0.77	2.65
(1,174)	1:507:A:PHE:CD1	1:509:A:PHE:CB	10	2.63	0.24	2.74
(1,197)	1:537:A:ALA:CB	1:531:A:GLU:CG	10	2.63	0.52	2.73
(1,210)	1:581:A:ILE:CD1	1:497:A:VAL:CG1	10	2.59	0.24	2.56
(1,245)	1:535:A:PHE:CE1	1:480:A:ILE:CG1	10	2.56	0.75	2.29
(1,187)	1:625:A:VAL:CB	1:631:A:LEU:CB	10	2.47	0.34	2.46
(1,233)	1:577:A:TRP:CD2	1:660:A:GLU:CG	10	2.46	0.14	2.46
(1,183)	1:607:A:PHE:CB	1:649:A:GLU:CA	10	2.46	0.3	2.37
(1,123)	1:507:A:PHE:CG	1:607:A:PHE:CG	10	2.43	0.31	2.35
(1,228)	1:492:A:PHE:CD1	1:544:A:ASP:CA	10	2.41	0.9	2.7
(1,12)	1:655:A:SER:CB	1:624:A:ILE:CG1	10	2.38	0.4	2.22
(1,193)	1:607:A:PHE:CA	1:513:A:ASP:CB	10	2.34	0.21	2.35
(1,237)	1:607:A:PHE:CZ	1:627:A:GLU:CB	10	2.28	0.54	2.44
(1,204)	1:621:A:SER:CB	1:624:A:ILE:CG1	10	2.22	0.25	2.33
(1,337)	1:535:A:PHE:CE1	1:577:A:TRP:CE3	10	2.19	0.94	2.58
(1,198)	1:622:A:GLY:CA	1:612:A:GLU:CG	10	2.18	0.42	2.3
(1,339)	1:565:A:GLU:CB	1:581:A:ILE:CD1	10	2.17	0.25	2.15
(1,202)	1:632:A:ALA:CB	1:593:A:VAL:CB	10	2.14	0.27	2.16
(1,313)	1:594:A:PHE:CE1	1:607:A:PHE:CB	10	2.14	0.61	1.96
(1,242)	1:607:A:PHE:CZ	1:606:A:PRO:CB	10	2.03	0.07	2.02
(1,292)	1:545:A:ASN:CA	1:521:A:GLU:CB	10	2.01	0.24	2.04
(1,286)	1:532:A:VAL:CG1	1:562:A:PHE:CB	10	2.01	0.35	2.02
(1,271)	1:565:A:GLU:CA	1:489:A:GLY:CA	10	2.0	0.38	2.01
(1,303)	1:497:A:VAL:CB	1:482:A:ALA:CA	10	1.98	0.33	1.94
(1,244)	1:594:A:PHE:CE1	1:624:A:ILE:CG1	10	1.93	0.59	1.8
(1,326)	1:525:A:ASP:CA	1:531:A:GLU:CG	10	1.9	0.46	1.84
(1,243)	1:562:A:PHE:CE1	1:706:A:ARG:CB	10	1.84	0.36	1.87
(1,275)	1:535:A:PHE:CE1	1:659:A:GLU:CG	10	1.81	0.96	1.76
(1,302)	1:541:A:PRO:CD	1:521:A:GLU:CB	10	1.81	0.37	1.86
(1,208)	1:599:A:ASN:CA	1:617:A:THR:CG2	10	1.8	0.12	1.76
(1,320)	1:606:A:PRO:CA	1:581:A:ILE:CG2	10	1.75	0.45	1.88
(1,196)	1:545:A:ASN:CA	1:581:A:ILE:CB	10	1.7	0.22	1.7
(1,284)	1:674:A:SER:CB	1:581:A:ILE:CB	10	1.65	0.25	1.67
(1,226)	1:535:A:PHE:CE1	1:531:A:GLU:CA	10	1.56	1.0	1.25
(1,191)	1:701:A:PRO:CA	1:689:A:LYS:CE	10	1.48	0.19	1.53
(1,214)	1:490:A:VAL:CB	1:480:A:ILE:CG2	10	1.47	0.25	1.52
(1,264)	1:493:A:LYS:CE	1:537:A:ALA:CB	10	1.42	0.31	1.42
(1,317)	1:616:A:LEU:CB	1:624:A:ILE:CD1	10	1.28	0.7	1.18
(1,276)	1:562:A:PHE:CG	1:566:A:ILE:CB	10	1.28	0.18	1.18
(1,184)	1:624:A:ILE:CD1	1:599:A:ASN:CA	10	1.26	0.31	1.34
(1,333)	1:624:A:ILE:CG2	1:607:A:PHE:CB	10	1.21	0.31	1.15
(1,330)	1:624:A:ILE:CG2	1:601:A:VAL:CB	10	1.18	0.22	1.16

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)	Median (Å)
(1,241)	1:509:A:PHE:CG	1:506:A:PRO:CB	10	1.12	0.38	1.05
(1,310)	1:689:A:LYS:CB	1:674:A:SER:CB	10	1.12	0.19	1.08
(1,2)	1:544:A:ASP:CA	1:557:A:THR:CG2	10	1.06	0.25	1.08
(1,231)	1:543:A:PHE:CE1	1:545:A:ASN:CB	10	1.03	0.46	1.15
(1,185)	1:601:A:VAL:CA	1:596:A:ALA:CA	10	1.01	0.25	0.94
(1,218)	1:577:A:TRP:CD2	1:573:A:LYS:CA	10	0.99	0.28	1.07
(1,247)	1:509:A:PHE:CZ	1:507:A:PHE:CD1	10	0.98	0.48	0.86
(1,189)	1:490:A:VAL:CB	1:518:A:LEU:CB	10	0.93	0.29	1.03
(1,297)	1:603:A:HIS:CE1	1:607:A:PHE:CE1	10	0.89	0.1	0.86
(1,160)	1:488:A:TYR:CG	1:490:A:VAL:CB	10	0.88	0.21	0.87
(1,195)	1:599:A:ASN:CA	1:613:A:ASN:CB	10	0.88	0.24	0.85
(1,312)	1:594:A:PHE:CG	1:577:A:TRP:CH2	10	0.87	0.35	0.97
(1,270)	1:561:A:PRO:CG	1:674:A:SER:CB	10	0.79	0.31	0.74
(1,269)	1:546:A:ILE:CG2	1:532:A:VAL:CA	10	0.78	0.35	0.82
(1,280)	1:573:A:LYS:CA	1:562:A:PHE:CB	10	0.67	0.09	0.66
(1,141)	1:509:A:PHE:CG	1:507:A:PHE:CG	10	0.62	0.1	0.6
(1,223)	1:487:A:HIS:CE1	1:564:A:LEU:CA	10	0.59	0.22	0.55
(1,232)	1:682:A:HIS:CG	1:687:A:ILE:CB	10	0.58	0.16	0.56
(1,335)	1:687:A:ILE:CG2	1:682:A:HIS:CB	10	0.3	0.13	0.26
(1,171)	1:682:A:HIS:CG	1:682:A:HIS:CD2	10	0.15	0.0	0.15
(1,134)	1:487:A:HIS:CG	1:487:A:HIS:CD2	10	0.15	0.01	0.15
(1,83)	1:562:A:PHE:CE1	1:562:A:PHE:CZ	10	0.14	0.0	0.14
(1,129)	1:507:A:PHE:CG	1:507:A:PHE:CD1	10	0.14	0.0	0.14
(1,147)	1:603:A:HIS:CG	1:603:A:HIS:CD2	10	0.14	0.01	0.14
(1,175)	1:509:A:PHE:CZ	1:509:A:PHE:CE1	10	0.14	0.01	0.14
(1,28)	1:492:A:PHE:CE1	1:492:A:PHE:CZ	10	0.14	0.0	0.14
(1,25)	1:492:A:PHE:CD1	1:492:A:PHE:CE1	10	0.13	0.0	0.13
(1,78)	1:594:A:PHE:CE1	1:594:A:PHE:CZ	10	0.13	0.0	0.13
(1,165)	1:562:A:PHE:CG	1:562:A:PHE:CD1	10	0.13	0.0	0.13
(1,30)	1:562:A:PHE:CD1	1:562:A:PHE:CE1	10	0.13	0.0	0.13
(1,122)	1:488:A:TYR:CD1	1:488:A:TYR:CE1	10	0.13	0.01	0.12
(1,66)	1:607:A:PHE:CE1	1:607:A:PHE:CZ	10	0.12	0.0	0.12
(1,101)	1:607:A:PHE:CD1	1:607:A:PHE:CE1	10	0.12	0.0	0.12
(1,248)	1:535:A:PHE:CE1	1:535:A:PHE:CZ	10	0.12	0.01	0.12
(1,93)	1:690:A:TYR:CD1	1:690:A:TYR:CG	10	0.11	0.0	0.11
(1,259)	1:488:A:TYR:CD1	1:493:A:LYS:CE	9	1.3	0.54	1.27
(1,215)	1:675:A:GLN:CG	1:687:A:ILE:CG2	9	1.23	0.32	1.37
(1,318)	1:577:A:TRP:CE2	1:594:A:PHE:CE1	9	1.07	0.5	1.28
(1,316)	1:607:A:PHE:CA	1:612:A:GLU:CG	9	0.62	0.2	0.59
(1,278)	1:535:A:PHE:CG	1:487:A:HIS:CB	9	0.57	0.35	0.51
(1,13)	1:562:A:PHE:CZ	1:682:A:HIS:CB	9	0.18	0.06	0.17
(1,246)	1:543:A:PHE:CE1	1:541:A:PRO:CG	8	1.76	0.41	1.7

Continued on next page...

Continued from previous page...

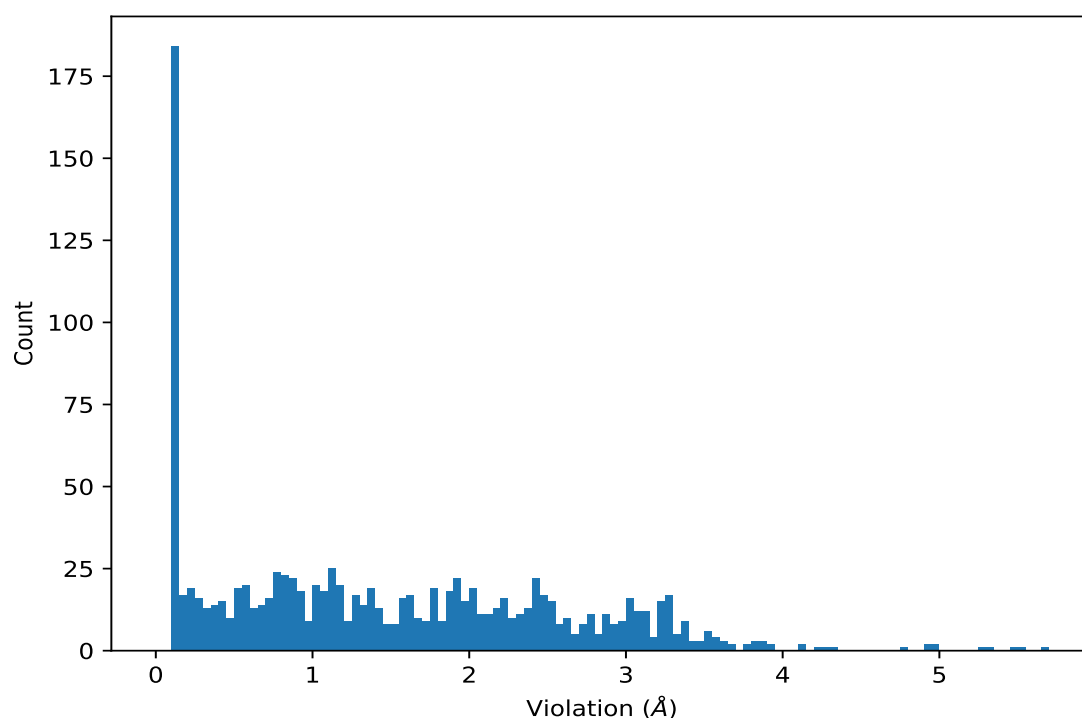
Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)	Median (Å)
(1,265)	1:492:A:PHE:CE1	1:487:A:HIS:CB	8	1.67	0.99	2.0
(1,283)	1:492:A:PHE:CE1	1:543:A:PHE:CB	8	1.48	0.7	1.48
(1,19)	1:535:A:PHE:CE1	1:534:A:LYS:CG	8	1.07	0.67	0.64
(1,331)	1:513:A:ASP:CB	1:506:A:PRO:CB	8	0.76	0.24	0.77
(1,209)	1:675:A:GLN:CA	1:703:A:THR:CG2	8	0.41	0.15	0.45
(1,305)	1:687:A:ILE:CG2	1:713:A:ARG:CD	8	0.24	0.22	0.15
(1,230)	1:535:A:PHE:CE1	1:536:A:LYS:CE	7	1.0	0.59	0.81
(1,261)	1:593:A:VAL:CB	1:530:A:ASP:CB	7	0.92	0.45	0.88
(1,113)	1:535:A:PHE:CD1	1:577:A:TRP:CZ2	7	0.68	0.27	0.74
(1,115)	1:487:A:HIS:CG	1:486:A:PRO:CG	7	0.33	0.17	0.25
(1,151)	1:546:A:ILE:CD1	1:552:A:LYS:CG	7	0.29	0.16	0.21
(1,332)	1:714:A:PHE:CB	1:706:A:ARG:CB	7	0.2	0.09	0.16
(1,251)	1:492:A:PHE:CE1	1:487:A:HIS:CD2	6	2.24	0.5	2.3
(1,164)	1:492:A:PHE:CZ	1:493:A:LYS:CA	6	0.84	0.33	0.95
(1,274)	1:544:A:ASP:CA	1:535:A:PHE:CA	6	0.73	0.38	0.78
(1,329)	1:682:A:HIS:CG	1:689:A:LYS:CD	6	0.55	0.29	0.4
(1,262)	1:515:A:GLU:CG	1:518:A:LEU:CB	5	0.46	0.24	0.41
(1,315)	1:603:A:HIS:CG	1:593:A:VAL:CB	5	0.35	0.07	0.35
(1,325)	1:487:A:HIS:CG	1:488:A:TYR:CE1	5	0.26	0.05	0.25
(1,311)	1:535:A:PHE:CA	1:540:A:LEU:CA	4	0.68	0.33	0.62
(1,328)	1:628:A:GLY:CA	1:602:A:VAL:CB	4	0.29	0.14	0.26
(1,199)	1:542:A:GLN:CG	1:541:A:PRO:CD	3	0.66	0.11	0.66
(1,314)	1:493:A:LYS:CE	1:541:A:PRO:CA	3	0.32	0.11	0.25
(1,239)	1:535:A:PHE:CE1	1:532:A:VAL:CB	2	0.74	0.63	0.74
(1,234)	1:492:A:PHE:CE1	1:490:A:VAL:CB	2	0.42	0.22	0.42
(1,206)	1:607:A:PHE:CB	1:534:A:LYS:CG	2	0.36	0.01	0.36
(1,238)	1:562:A:PHE:CE1	1:565:A:GLU:CB	2	0.33	0.15	0.33

¹Number of violated models, ²Standard deviation

9.5 All violated distance restraints [i](#)

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

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



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

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

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,285)	1:627:A:GLU:CB	1:622:A:GLY:CA	5	5.68
(1,285)	1:627:A:GLU:CB	1:622:A:GLY:CA	3	5.52
(1,285)	1:627:A:GLU:CB	1:622:A:GLY:CA	6	5.49
(1,285)	1:627:A:GLU:CB	1:622:A:GLY:CA	10	5.33
(1,285)	1:627:A:GLU:CB	1:622:A:GLY:CA	9	5.26
(1,285)	1:627:A:GLU:CB	1:622:A:GLY:CA	4	4.96
(1,285)	1:627:A:GLU:CB	1:622:A:GLY:CA	8	4.95
(1,285)	1:627:A:GLU:CB	1:622:A:GLY:CA	1	4.94
(1,285)	1:627:A:GLU:CB	1:622:A:GLY:CA	2	4.94
(1,285)	1:627:A:GLU:CB	1:622:A:GLY:CA	7	4.76
(1,227)	1:507:A:PHE:CD1	1:699:A:ASP:CA	3	4.35
(1,201)	1:482:A:ALA:CA	1:517:A:GLN:CG	3	4.29
(1,236)	1:594:A:PHE:CE1	1:627:A:GLU:CB	10	4.21
(1,245)	1:535:A:PHE:CE1	1:480:A:ILE:CG1	8	4.13
(1,236)	1:594:A:PHE:CE1	1:627:A:GLU:CB	9	4.12
(1,236)	1:594:A:PHE:CE1	1:627:A:GLU:CB	5	3.92

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,236)	1:594:A:PHE:CE1	1:627:A:GLU:CB	7	3.91
(1,236)	1:594:A:PHE:CE1	1:627:A:GLU:CB	3	3.89
(1,319)	1:488:A:TYR:CB	1:581:A:ILE:CG1	1	3.86
(1,336)	1:624:A:ILE:CD1	1:531:A:GLU:CB	7	3.85
(1,290)	1:689:A:LYS:CB	1:684:A:ALA:CA	6	3.84
(1,290)	1:689:A:LYS:CB	1:684:A:ALA:CA	5	3.83
(1,188)	1:593:A:VAL:CB	1:622:A:GLY:CA	7	3.81
(1,236)	1:594:A:PHE:CE1	1:627:A:GLU:CB	6	3.78
(1,226)	1:535:A:PHE:CE1	1:531:A:GLU:CA	4	3.78
(1,227)	1:507:A:PHE:CD1	1:699:A:ASP:CA	7	3.69
(1,236)	1:594:A:PHE:CE1	1:627:A:GLU:CB	8	3.68
(1,336)	1:624:A:ILE:CD1	1:531:A:GLU:CB	3	3.62
(1,336)	1:624:A:ILE:CD1	1:531:A:GLU:CB	8	3.62
(1,236)	1:594:A:PHE:CE1	1:627:A:GLU:CB	2	3.61
(1,236)	1:594:A:PHE:CE1	1:627:A:GLU:CB	4	3.57
(1,227)	1:507:A:PHE:CD1	1:699:A:ASP:CA	4	3.57
(1,228)	1:492:A:PHE:CD1	1:544:A:ASP:CA	10	3.56
(1,227)	1:507:A:PHE:CD1	1:699:A:ASP:CA	10	3.56
(1,236)	1:594:A:PHE:CE1	1:627:A:GLU:CB	1	3.54
(1,275)	1:535:A:PHE:CE1	1:659:A:GLU:CG	7	3.53
(1,336)	1:624:A:ILE:CD1	1:531:A:GLU:CB	10	3.52
(1,319)	1:488:A:TYR:CB	1:581:A:ILE:CG1	2	3.52
(1,227)	1:507:A:PHE:CD1	1:699:A:ASP:CA	8	3.52
(1,201)	1:482:A:ALA:CA	1:517:A:GLN:CG	9	3.52
(1,188)	1:593:A:VAL:CB	1:622:A:GLY:CA	8	3.49
(1,250)	1:682:A:HIS:CG	1:577:A:TRP:CZ3	3	3.46
(1,227)	1:507:A:PHE:CD1	1:699:A:ASP:CA	5	3.45
(1,227)	1:507:A:PHE:CD1	1:699:A:ASP:CA	2	3.42
(1,290)	1:689:A:LYS:CB	1:684:A:ALA:CA	10	3.41
(1,250)	1:682:A:HIS:CG	1:577:A:TRP:CZ3	7	3.41
(1,263)	1:594:A:PHE:CG	1:577:A:TRP:CD2	2	3.4
(1,336)	1:624:A:ILE:CD1	1:531:A:GLU:CB	6	3.38
(1,263)	1:594:A:PHE:CG	1:577:A:TRP:CD2	1	3.38
(1,201)	1:482:A:ALA:CA	1:517:A:GLN:CG	8	3.38
(1,258)	1:507:A:PHE:CG	1:518:A:LEU:CB	9	3.36
(1,197)	1:537:A:ALA:CB	1:531:A:GLU:CG	7	3.36
(1,338)	1:624:A:ILE:CD1	1:635:A:LYS:CA	3	3.35
(1,338)	1:624:A:ILE:CD1	1:635:A:LYS:CA	4	3.35
(1,300)	1:606:A:PRO:CA	1:599:A:ASN:CA	4	3.35
(1,188)	1:593:A:VAL:CB	1:622:A:GLY:CA	4	3.34
(1,319)	1:488:A:TYR:CB	1:581:A:ILE:CG1	7	3.33
(1,245)	1:535:A:PHE:CE1	1:480:A:ILE:CG1	1	3.33

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,201)	1:482:A:ALA:CA	1:517:A:GLN:CG	2	3.33
(1,250)	1:682:A:HIS:CG	1:577:A:TRP:CZ3	9	3.32
(1,317)	1:616:A:LEU:CB	1:624:A:ILE:CD1	5	3.3
(1,258)	1:507:A:PHE:CG	1:518:A:LEU:CB	4	3.3
(1,258)	1:507:A:PHE:CG	1:518:A:LEU:CB	5	3.29
(1,245)	1:535:A:PHE:CE1	1:480:A:ILE:CG1	2	3.29
(1,201)	1:482:A:ALA:CA	1:517:A:GLN:CG	1	3.29
(1,338)	1:624:A:ILE:CD1	1:635:A:LYS:CA	2	3.28
(1,338)	1:624:A:ILE:CD1	1:635:A:LYS:CA	6	3.28
(1,338)	1:624:A:ILE:CD1	1:635:A:LYS:CA	10	3.28
(1,300)	1:606:A:PRO:CA	1:599:A:ASN:CA	2	3.28
(1,290)	1:689:A:LYS:CB	1:684:A:ALA:CA	8	3.28
(1,228)	1:492:A:PHE:CD1	1:544:A:ASP:CA	1	3.28
(1,201)	1:482:A:ALA:CA	1:517:A:GLN:CG	10	3.28
(1,250)	1:682:A:HIS:CG	1:577:A:TRP:CZ3	2	3.27
(1,338)	1:624:A:ILE:CD1	1:635:A:LYS:CA	7	3.26
(1,290)	1:689:A:LYS:CB	1:684:A:ALA:CA	7	3.26
(1,290)	1:689:A:LYS:CB	1:684:A:ALA:CA	4	3.25
(1,263)	1:594:A:PHE:CG	1:577:A:TRP:CD2	7	3.25
(1,336)	1:624:A:ILE:CD1	1:531:A:GLU:CB	5	3.24
(1,313)	1:594:A:PHE:CE1	1:607:A:PHE:CB	5	3.24
(1,258)	1:507:A:PHE:CG	1:518:A:LEU:CB	6	3.24
(1,250)	1:682:A:HIS:CG	1:577:A:TRP:CZ3	5	3.24
(1,188)	1:593:A:VAL:CB	1:622:A:GLY:CA	1	3.24
(1,300)	1:606:A:PRO:CA	1:599:A:ASN:CA	1	3.23
(1,300)	1:606:A:PRO:CA	1:599:A:ASN:CA	10	3.23
(1,290)	1:689:A:LYS:CB	1:684:A:ALA:CA	9	3.23
(1,188)	1:593:A:VAL:CB	1:622:A:GLY:CA	2	3.23
(1,336)	1:624:A:ILE:CD1	1:531:A:GLU:CB	1	3.22
(1,123)	1:507:A:PHE:CG	1:607:A:PHE:CG	9	3.22
(1,250)	1:682:A:HIS:CG	1:577:A:TRP:CZ3	1	3.21
(1,338)	1:624:A:ILE:CD1	1:635:A:LYS:CA	1	3.2
(1,250)	1:682:A:HIS:CG	1:577:A:TRP:CZ3	10	3.2
(1,235)	1:607:A:PHE:CE1	1:601:A:VAL:CB	5	3.2
(1,337)	1:535:A:PHE:CE1	1:577:A:TRP:CE3	6	3.19
(1,210)	1:581:A:ILE:CD1	1:497:A:VAL:CG1	6	3.18
(1,290)	1:689:A:LYS:CB	1:684:A:ALA:CA	3	3.17
(1,227)	1:507:A:PHE:CD1	1:699:A:ASP:CA	6	3.16
(1,290)	1:689:A:LYS:CB	1:684:A:ALA:CA	2	3.15
(1,263)	1:594:A:PHE:CG	1:577:A:TRP:CD2	9	3.15
(1,226)	1:535:A:PHE:CE1	1:531:A:GLU:CA	9	3.15
(1,187)	1:625:A:VAL:CB	1:631:A:LEU:CB	9	3.15

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,336)	1:624:A:ILE:CD1	1:531:A:GLU:CB	2	3.14
(1,250)	1:682:A:HIS:CG	1:577:A:TRP:CZ3	4	3.13
(1,228)	1:492:A:PHE:CD1	1:544:A:ASP:CA	5	3.13
(1,338)	1:624:A:ILE:CD1	1:635:A:LYS:CA	8	3.12
(1,227)	1:507:A:PHE:CD1	1:699:A:ASP:CA	9	3.12
(1,258)	1:507:A:PHE:CG	1:518:A:LEU:CB	3	3.11
(1,235)	1:607:A:PHE:CE1	1:601:A:VAL:CB	10	3.11
(1,12)	1:655:A:SER:CB	1:624:A:ILE:CG1	9	3.11
(1,258)	1:507:A:PHE:CG	1:518:A:LEU:CB	1	3.09
(1,250)	1:682:A:HIS:CG	1:577:A:TRP:CZ3	6	3.09
(1,235)	1:607:A:PHE:CE1	1:601:A:VAL:CB	6	3.09
(1,197)	1:537:A:ALA:CB	1:531:A:GLU:CG	10	3.09
(1,190)	1:630:A:GLU:CA	1:616:A:LEU:CB	1	3.09
(1,258)	1:507:A:PHE:CG	1:518:A:LEU:CB	8	3.08
(1,250)	1:682:A:HIS:CG	1:577:A:TRP:CZ3	8	3.08
(1,183)	1:607:A:PHE:CB	1:649:A:GLU:CA	5	3.08
(1,190)	1:630:A:GLU:CA	1:616:A:LEU:CB	9	3.07
(1,300)	1:606:A:PRO:CA	1:599:A:ASN:CA	6	3.06
(1,197)	1:537:A:ALA:CB	1:531:A:GLU:CG	5	3.06
(1,190)	1:630:A:GLU:CA	1:616:A:LEU:CB	2	3.06
(1,319)	1:488:A:TYR:CB	1:581:A:ILE:CG1	5	3.05
(1,197)	1:537:A:ALA:CB	1:531:A:GLU:CG	6	3.05
(1,338)	1:624:A:ILE:CD1	1:635:A:LYS:CA	5	3.04
(1,319)	1:488:A:TYR:CB	1:581:A:ILE:CG1	3	3.04
(1,300)	1:606:A:PRO:CA	1:599:A:ASN:CA	9	3.04
(1,265)	1:492:A:PHE:CE1	1:487:A:HIS:CB	1	3.04
(1,197)	1:537:A:ALA:CB	1:531:A:GLU:CG	3	3.04
(1,190)	1:630:A:GLU:CA	1:616:A:LEU:CB	8	3.04
(1,263)	1:594:A:PHE:CG	1:577:A:TRP:CD2	3	3.03
(1,12)	1:655:A:SER:CB	1:624:A:ILE:CG1	5	3.02
(1,235)	1:607:A:PHE:CE1	1:601:A:VAL:CB	4	3.01
(1,336)	1:624:A:ILE:CD1	1:531:A:GLU:CB	9	3.0
(1,319)	1:488:A:TYR:CB	1:581:A:ILE:CG1	10	3.0
(1,235)	1:607:A:PHE:CE1	1:601:A:VAL:CB	2	3.0
(1,201)	1:482:A:ALA:CA	1:517:A:GLN:CG	5	3.0
(1,190)	1:630:A:GLU:CA	1:616:A:LEU:CB	6	3.0
(1,338)	1:624:A:ILE:CD1	1:635:A:LYS:CA	9	2.98
(1,337)	1:535:A:PHE:CE1	1:577:A:TRP:CE3	9	2.97
(1,290)	1:689:A:LYS:CB	1:684:A:ALA:CA	1	2.97
(1,190)	1:630:A:GLU:CA	1:616:A:LEU:CB	4	2.97
(1,201)	1:482:A:ALA:CA	1:517:A:GLN:CG	4	2.96
(1,258)	1:507:A:PHE:CG	1:518:A:LEU:CB	2	2.95

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,228)	1:492:A:PHE:CD1	1:544:A:ASP:CA	8	2.95
(1,190)	1:630:A:GLU:CA	1:616:A:LEU:CB	7	2.95
(1,190)	1:630:A:GLU:CA	1:616:A:LEU:CB	10	2.95
(1,319)	1:488:A:TYR:CB	1:581:A:ILE:CG1	6	2.94
(1,337)	1:535:A:PHE:CE1	1:577:A:TRP:CE3	4	2.93
(1,251)	1:492:A:PHE:CE1	1:487:A:HIS:CD2	6	2.93
(1,300)	1:606:A:PRO:CA	1:599:A:ASN:CA	7	2.92
(1,228)	1:492:A:PHE:CD1	1:544:A:ASP:CA	6	2.92
(1,174)	1:507:A:PHE:CD1	1:509:A:PHE:CB	10	2.92
(1,336)	1:624:A:ILE:CD1	1:531:A:GLU:CB	4	2.91
(1,300)	1:606:A:PRO:CA	1:599:A:ASN:CA	8	2.91
(1,235)	1:607:A:PHE:CE1	1:601:A:VAL:CB	1	2.9
(1,145)	1:566:A:ILE:CD1	1:561:A:PRO:CG	8	2.9
(1,326)	1:525:A:ASP:CA	1:531:A:GLU:CG	7	2.89
(1,174)	1:507:A:PHE:CD1	1:509:A:PHE:CB	5	2.89
(1,337)	1:535:A:PHE:CE1	1:577:A:TRP:CE3	7	2.88
(1,244)	1:594:A:PHE:CE1	1:624:A:ILE:CG1	6	2.88
(1,313)	1:594:A:PHE:CE1	1:607:A:PHE:CB	6	2.87
(1,263)	1:594:A:PHE:CG	1:577:A:TRP:CD2	4	2.87
(1,300)	1:606:A:PRO:CA	1:599:A:ASN:CA	3	2.86
(1,145)	1:566:A:ILE:CD1	1:561:A:PRO:CG	5	2.86
(1,275)	1:535:A:PHE:CE1	1:659:A:GLU:CG	3	2.85
(1,237)	1:607:A:PHE:CZ	1:627:A:GLU:CB	7	2.84
(1,145)	1:566:A:ILE:CD1	1:561:A:PRO:CG	2	2.83
(1,145)	1:566:A:ILE:CD1	1:561:A:PRO:CG	4	2.83
(1,263)	1:594:A:PHE:CG	1:577:A:TRP:CD2	8	2.82
(1,201)	1:482:A:ALA:CA	1:517:A:GLN:CG	6	2.81
(1,283)	1:492:A:PHE:CE1	1:543:A:PHE:CB	7	2.8
(1,235)	1:607:A:PHE:CE1	1:601:A:VAL:CB	7	2.8
(1,174)	1:507:A:PHE:CD1	1:509:A:PHE:CB	8	2.79
(1,190)	1:630:A:GLU:CA	1:616:A:LEU:CB	3	2.78
(1,145)	1:566:A:ILE:CD1	1:561:A:PRO:CG	6	2.78
(1,193)	1:607:A:PHE:CA	1:513:A:ASP:CB	7	2.77
(1,183)	1:607:A:PHE:CB	1:649:A:GLU:CA	8	2.77
(1,174)	1:507:A:PHE:CD1	1:509:A:PHE:CB	6	2.77
(1,227)	1:507:A:PHE:CD1	1:699:A:ASP:CA	1	2.75
(1,210)	1:581:A:ILE:CD1	1:497:A:VAL:CG1	5	2.75
(1,174)	1:507:A:PHE:CD1	1:509:A:PHE:CB	1	2.75
(1,237)	1:607:A:PHE:CZ	1:627:A:GLU:CB	8	2.74
(1,145)	1:566:A:ILE:CD1	1:561:A:PRO:CG	1	2.74
(1,235)	1:607:A:PHE:CE1	1:601:A:VAL:CB	8	2.73
(1,233)	1:577:A:TRP:CD2	1:660:A:GLU:CG	9	2.73

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,187)	1:625:A:VAL:CB	1:631:A:LEU:CB	3	2.73
(1,174)	1:507:A:PHE:CD1	1:509:A:PHE:CB	2	2.73
(1,145)	1:566:A:ILE:CD1	1:561:A:PRO:CG	10	2.72
(1,339)	1:565:A:GLU:CB	1:581:A:ILE:CD1	9	2.7
(1,337)	1:535:A:PHE:CE1	1:577:A:TRP:CE3	5	2.69
(1,300)	1:606:A:PRO:CA	1:599:A:ASN:CA	5	2.68
(1,244)	1:594:A:PHE:CE1	1:624:A:ILE:CG1	3	2.67
(1,245)	1:535:A:PHE:CE1	1:480:A:ILE:CG1	4	2.66
(1,243)	1:562:A:PHE:CE1	1:706:A:ARG:CB	10	2.66
(1,183)	1:607:A:PHE:CB	1:649:A:GLU:CA	10	2.65
(1,251)	1:492:A:PHE:CE1	1:487:A:HIS:CD2	1	2.64
(1,246)	1:543:A:PHE:CE1	1:541:A:PRO:CG	10	2.64
(1,313)	1:594:A:PHE:CE1	1:607:A:PHE:CB	10	2.63
(1,237)	1:607:A:PHE:CZ	1:627:A:GLU:CB	4	2.63
(1,123)	1:507:A:PHE:CG	1:607:A:PHE:CG	10	2.62
(1,210)	1:581:A:ILE:CD1	1:497:A:VAL:CG1	9	2.6
(1,198)	1:622:A:GLY:CA	1:612:A:GLU:CG	8	2.6
(1,183)	1:607:A:PHE:CB	1:649:A:GLU:CA	6	2.6
(1,12)	1:655:A:SER:CB	1:624:A:ILE:CG1	3	2.6
(1,286)	1:532:A:VAL:CG1	1:562:A:PHE:CB	6	2.59
(1,233)	1:577:A:TRP:CD2	1:660:A:GLU:CG	1	2.59
(1,233)	1:577:A:TRP:CD2	1:660:A:GLU:CG	2	2.59
(1,210)	1:581:A:ILE:CD1	1:497:A:VAL:CG1	3	2.59
(1,145)	1:566:A:ILE:CD1	1:561:A:PRO:CG	7	2.59
(1,123)	1:507:A:PHE:CG	1:607:A:PHE:CG	4	2.58
(1,275)	1:535:A:PHE:CE1	1:659:A:GLU:CG	10	2.57
(1,210)	1:581:A:ILE:CD1	1:497:A:VAL:CG1	7	2.57
(1,210)	1:581:A:ILE:CD1	1:497:A:VAL:CG1	8	2.55
(1,12)	1:655:A:SER:CB	1:624:A:ILE:CG1	6	2.55
(1,210)	1:581:A:ILE:CD1	1:497:A:VAL:CG1	4	2.54
(1,258)	1:507:A:PHE:CG	1:518:A:LEU:CB	10	2.53
(1,187)	1:625:A:VAL:CB	1:631:A:LEU:CB	6	2.53
(1,319)	1:488:A:TYR:CB	1:581:A:ILE:CG1	8	2.52
(1,174)	1:507:A:PHE:CD1	1:509:A:PHE:CB	7	2.52
(1,292)	1:545:A:ASN:CA	1:521:A:GLU:CB	2	2.51
(1,193)	1:607:A:PHE:CA	1:513:A:ASP:CB	4	2.51
(1,145)	1:566:A:ILE:CD1	1:561:A:PRO:CG	9	2.51
(1,271)	1:565:A:GLU:CA	1:489:A:GLY:CA	1	2.5
(1,265)	1:492:A:PHE:CE1	1:487:A:HIS:CB	6	2.5
(1,233)	1:577:A:TRP:CD2	1:660:A:GLU:CG	3	2.5
(1,233)	1:577:A:TRP:CD2	1:660:A:GLU:CG	10	2.5
(1,187)	1:625:A:VAL:CB	1:631:A:LEU:CB	10	2.5

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,235)	1:607:A:PHE:CE1	1:601:A:VAL:CB	3	2.49
(1,187)	1:625:A:VAL:CB	1:631:A:LEU:CB	8	2.49
(1,337)	1:535:A:PHE:CE1	1:577:A:TRP:CE3	10	2.48
(1,319)	1:488:A:TYR:CB	1:581:A:ILE:CG1	9	2.48
(1,244)	1:594:A:PHE:CE1	1:624:A:ILE:CG1	5	2.48
(1,237)	1:607:A:PHE:CZ	1:627:A:GLU:CB	9	2.48
(1,204)	1:621:A:SER:CB	1:624:A:ILE:CG1	1	2.48
(1,204)	1:621:A:SER:CB	1:624:A:ILE:CG1	2	2.48
(1,313)	1:594:A:PHE:CE1	1:607:A:PHE:CB	3	2.47
(1,228)	1:492:A:PHE:CD1	1:544:A:ASP:CA	2	2.47
(1,303)	1:497:A:VAL:CB	1:482:A:ALA:CA	1	2.46
(1,303)	1:497:A:VAL:CB	1:482:A:ALA:CA	3	2.46
(1,286)	1:532:A:VAL:CG1	1:562:A:PHE:CB	10	2.46
(1,202)	1:632:A:ALA:CB	1:593:A:VAL:CB	2	2.46
(1,210)	1:581:A:ILE:CD1	1:497:A:VAL:CG1	1	2.45
(1,198)	1:622:A:GLY:CA	1:612:A:GLU:CG	4	2.45
(1,193)	1:607:A:PHE:CA	1:513:A:ASP:CB	6	2.45
(1,237)	1:607:A:PHE:CZ	1:627:A:GLU:CB	1	2.44
(1,202)	1:632:A:ALA:CB	1:593:A:VAL:CB	8	2.44
(1,174)	1:507:A:PHE:CD1	1:509:A:PHE:CB	9	2.44
(1,263)	1:594:A:PHE:CG	1:577:A:TRP:CD2	5	2.43
(1,245)	1:535:A:PHE:CE1	1:480:A:ILE:CG1	5	2.43
(1,237)	1:607:A:PHE:CZ	1:627:A:GLU:CB	2	2.43
(1,210)	1:581:A:ILE:CD1	1:497:A:VAL:CG1	2	2.43
(1,202)	1:632:A:ALA:CB	1:593:A:VAL:CB	1	2.43
(1,193)	1:607:A:PHE:CA	1:513:A:ASP:CB	5	2.43
(1,193)	1:607:A:PHE:CA	1:513:A:ASP:CB	8	2.43
(1,339)	1:565:A:GLU:CB	1:581:A:ILE:CD1	6	2.42
(1,202)	1:632:A:ALA:CB	1:593:A:VAL:CB	4	2.42
(1,197)	1:537:A:ALA:CB	1:531:A:GLU:CG	1	2.42
(1,187)	1:625:A:VAL:CB	1:631:A:LEU:CB	1	2.42
(1,265)	1:492:A:PHE:CE1	1:487:A:HIS:CB	5	2.41
(1,244)	1:594:A:PHE:CE1	1:624:A:ILE:CG1	10	2.41
(1,233)	1:577:A:TRP:CD2	1:660:A:GLU:CG	4	2.41
(1,204)	1:621:A:SER:CB	1:624:A:ILE:CG1	8	2.41
(1,198)	1:622:A:GLY:CA	1:612:A:GLU:CG	1	2.41
(1,198)	1:622:A:GLY:CA	1:612:A:GLU:CG	2	2.41
(1,190)	1:630:A:GLU:CA	1:616:A:LEU:CB	5	2.41
(1,187)	1:625:A:VAL:CB	1:631:A:LEU:CB	2	2.41
(1,233)	1:577:A:TRP:CD2	1:660:A:GLU:CG	8	2.4
(1,183)	1:607:A:PHE:CB	1:649:A:GLU:CA	2	2.4
(1,123)	1:507:A:PHE:CG	1:607:A:PHE:CG	2	2.4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,233)	1:577:A:TRP:CD2	1:660:A:GLU:CG	6	2.39
(1,187)	1:625:A:VAL:CB	1:631:A:LEU:CB	7	2.38
(1,251)	1:492:A:PHE:CE1	1:487:A:HIS:CD2	10	2.37
(1,235)	1:607:A:PHE:CE1	1:601:A:VAL:CB	9	2.37
(1,204)	1:621:A:SER:CB	1:624:A:ILE:CG1	4	2.37
(1,187)	1:625:A:VAL:CB	1:631:A:LEU:CB	4	2.37
(1,198)	1:622:A:GLY:CA	1:612:A:GLU:CG	7	2.36
(1,339)	1:565:A:GLU:CB	1:581:A:ILE:CD1	2	2.35
(1,123)	1:507:A:PHE:CG	1:607:A:PHE:CG	3	2.35
(1,123)	1:507:A:PHE:CG	1:607:A:PHE:CG	8	2.35
(1,183)	1:607:A:PHE:CB	1:649:A:GLU:CA	1	2.34
(1,204)	1:621:A:SER:CB	1:624:A:ILE:CG1	10	2.33
(1,123)	1:507:A:PHE:CG	1:607:A:PHE:CG	1	2.33
(1,337)	1:535:A:PHE:CE1	1:577:A:TRP:CE3	3	2.32
(1,204)	1:621:A:SER:CB	1:624:A:ILE:CG1	7	2.32
(1,12)	1:655:A:SER:CB	1:624:A:ILE:CG1	10	2.32
(1,320)	1:606:A:PRO:CA	1:581:A:ILE:CG2	8	2.31
(1,275)	1:535:A:PHE:CE1	1:659:A:GLU:CG	5	2.31
(1,271)	1:565:A:GLU:CA	1:489:A:GLY:CA	2	2.31
(1,233)	1:577:A:TRP:CD2	1:660:A:GLU:CG	5	2.31
(1,183)	1:607:A:PHE:CB	1:649:A:GLU:CA	7	2.31
(1,197)	1:537:A:ALA:CB	1:531:A:GLU:CG	2	2.3
(1,320)	1:606:A:PRO:CA	1:581:A:ILE:CG2	7	2.29
(1,237)	1:607:A:PHE:CZ	1:627:A:GLU:CB	10	2.28
(1,174)	1:507:A:PHE:CD1	1:509:A:PHE:CB	3	2.28
(1,326)	1:525:A:ASP:CA	1:531:A:GLU:CG	5	2.27
(1,271)	1:565:A:GLU:CA	1:489:A:GLY:CA	3	2.27
(1,265)	1:492:A:PHE:CE1	1:487:A:HIS:CB	10	2.27
(1,193)	1:607:A:PHE:CA	1:513:A:ASP:CB	2	2.27
(1,123)	1:507:A:PHE:CG	1:607:A:PHE:CG	5	2.26
(1,198)	1:622:A:GLY:CA	1:612:A:GLU:CG	3	2.25
(1,193)	1:607:A:PHE:CA	1:513:A:ASP:CB	9	2.24
(1,303)	1:497:A:VAL:CB	1:482:A:ALA:CA	8	2.23
(1,263)	1:594:A:PHE:CG	1:577:A:TRP:CD2	10	2.23
(1,259)	1:488:A:TYR:CD1	1:493:A:LYS:CE	8	2.23
(1,251)	1:492:A:PHE:CE1	1:487:A:HIS:CD2	5	2.23
(1,237)	1:607:A:PHE:CZ	1:627:A:GLU:CB	3	2.23
(1,19)	1:535:A:PHE:CE1	1:534:A:LYS:CG	9	2.23
(1,259)	1:488:A:TYR:CD1	1:493:A:LYS:CE	1	2.22
(1,233)	1:577:A:TRP:CD2	1:660:A:GLU:CG	7	2.22
(1,198)	1:622:A:GLY:CA	1:612:A:GLU:CG	9	2.22
(1,183)	1:607:A:PHE:CB	1:649:A:GLU:CA	4	2.22

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,174)	1:507:A:PHE:CD1	1:509:A:PHE:CB	4	2.22
(1,242)	1:607:A:PHE:CZ	1:606:A:PRO:CB	5	2.21
(1,202)	1:632:A:ALA:CB	1:593:A:VAL:CB	7	2.21
(1,183)	1:607:A:PHE:CB	1:649:A:GLU:CA	3	2.21
(1,210)	1:581:A:ILE:CD1	1:497:A:VAL:CG1	10	2.2
(1,271)	1:565:A:GLU:CA	1:489:A:GLY:CA	10	2.19
(1,339)	1:565:A:GLU:CB	1:581:A:ILE:CD1	4	2.18
(1,303)	1:497:A:VAL:CB	1:482:A:ALA:CA	2	2.18
(1,198)	1:622:A:GLY:CA	1:612:A:GLU:CG	10	2.18
(1,123)	1:507:A:PHE:CG	1:607:A:PHE:CG	7	2.18
(1,339)	1:565:A:GLU:CB	1:581:A:ILE:CD1	10	2.17
(1,326)	1:525:A:ASP:CA	1:531:A:GLU:CG	10	2.17
(1,197)	1:537:A:ALA:CB	1:531:A:GLU:CG	8	2.17
(1,193)	1:607:A:PHE:CA	1:513:A:ASP:CB	10	2.17
(1,302)	1:541:A:PRO:CD	1:521:A:GLU:CB	6	2.15
(1,292)	1:545:A:ASN:CA	1:521:A:GLU:CB	4	2.15
(1,245)	1:535:A:PHE:CE1	1:480:A:ILE:CG1	7	2.15
(1,245)	1:535:A:PHE:CE1	1:480:A:ILE:CG1	9	2.15
(1,292)	1:545:A:ASN:CA	1:521:A:GLU:CB	6	2.14
(1,204)	1:621:A:SER:CB	1:624:A:ILE:CG1	5	2.14
(1,339)	1:565:A:GLU:CB	1:581:A:ILE:CD1	8	2.13
(1,193)	1:607:A:PHE:CA	1:513:A:ASP:CB	1	2.13
(1,145)	1:566:A:ILE:CD1	1:561:A:PRO:CG	3	2.13
(1,12)	1:655:A:SER:CB	1:624:A:ILE:CG1	4	2.13
(1,302)	1:541:A:PRO:CD	1:521:A:GLU:CB	8	2.12
(1,286)	1:532:A:VAL:CG1	1:562:A:PHE:CB	2	2.12
(1,202)	1:632:A:ALA:CB	1:593:A:VAL:CB	3	2.12
(1,204)	1:621:A:SER:CB	1:624:A:ILE:CG1	6	2.1
(1,12)	1:655:A:SER:CB	1:624:A:ILE:CG1	8	2.1
(1,286)	1:532:A:VAL:CG1	1:562:A:PHE:CB	4	2.09
(1,196)	1:545:A:ASN:CA	1:581:A:ILE:CB	1	2.09
(1,286)	1:532:A:VAL:CG1	1:562:A:PHE:CB	9	2.08
(1,242)	1:607:A:PHE:CZ	1:606:A:PRO:CB	7	2.08
(1,292)	1:545:A:ASN:CA	1:521:A:GLU:CB	1	2.07
(1,292)	1:545:A:ASN:CA	1:521:A:GLU:CB	5	2.07
(1,188)	1:593:A:VAL:CB	1:622:A:GLY:CA	5	2.07
(1,326)	1:525:A:ASP:CA	1:531:A:GLU:CG	6	2.06
(1,188)	1:593:A:VAL:CB	1:622:A:GLY:CA	9	2.06
(1,12)	1:655:A:SER:CB	1:624:A:ILE:CG1	1	2.06
(1,12)	1:655:A:SER:CB	1:624:A:ILE:CG1	2	2.06
(1,242)	1:607:A:PHE:CZ	1:606:A:PRO:CB	4	2.05
(1,242)	1:607:A:PHE:CZ	1:606:A:PRO:CB	10	2.05

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,123)	1:507:A:PHE:CG	1:607:A:PHE:CG	6	2.05
(1,275)	1:535:A:PHE:CE1	1:659:A:GLU:CG	9	2.04
(1,263)	1:594:A:PHE:CG	1:577:A:TRP:CD2	6	2.04
(1,339)	1:565:A:GLU:CB	1:581:A:ILE:CD1	5	2.03
(1,303)	1:497:A:VAL:CB	1:482:A:ALA:CA	4	2.03
(1,302)	1:541:A:PRO:CD	1:521:A:GLU:CB	7	2.03
(1,271)	1:565:A:GLU:CA	1:489:A:GLY:CA	4	2.03
(1,243)	1:562:A:PHE:CE1	1:706:A:ARG:CB	6	2.03
(1,242)	1:607:A:PHE:CZ	1:606:A:PRO:CB	2	2.03
(1,193)	1:607:A:PHE:CA	1:513:A:ASP:CB	3	2.03
(1,242)	1:607:A:PHE:CZ	1:606:A:PRO:CB	8	2.02
(1,228)	1:492:A:PHE:CD1	1:544:A:ASP:CA	7	2.02
(1,320)	1:606:A:PRO:CA	1:581:A:ILE:CG2	1	2.01
(1,292)	1:545:A:ASN:CA	1:521:A:GLU:CB	10	2.01
(1,339)	1:565:A:GLU:CB	1:581:A:ILE:CD1	1	2.0
(1,284)	1:674:A:SER:CB	1:581:A:ILE:CB	1	2.0
(1,242)	1:607:A:PHE:CZ	1:606:A:PRO:CB	1	2.0
(1,302)	1:541:A:PRO:CD	1:521:A:GLU:CB	9	1.99
(1,271)	1:565:A:GLU:CA	1:489:A:GLY:CA	8	1.99
(1,243)	1:562:A:PHE:CE1	1:706:A:ARG:CB	5	1.99
(1,208)	1:599:A:ASN:CA	1:617:A:THR:CG2	6	1.99
(1,19)	1:535:A:PHE:CE1	1:534:A:LYS:CG	4	1.99
(1,242)	1:607:A:PHE:CZ	1:606:A:PRO:CB	6	1.98
(1,183)	1:607:A:PHE:CB	1:649:A:GLU:CA	9	1.98
(1,320)	1:606:A:PRO:CA	1:581:A:ILE:CG2	4	1.97
(1,313)	1:594:A:PHE:CE1	1:607:A:PHE:CB	4	1.97
(1,246)	1:543:A:PHE:CE1	1:541:A:PRO:CG	2	1.97
(1,243)	1:562:A:PHE:CE1	1:706:A:ARG:CB	7	1.97
(1,242)	1:607:A:PHE:CZ	1:606:A:PRO:CB	3	1.97
(1,188)	1:593:A:VAL:CB	1:622:A:GLY:CA	3	1.97
(1,286)	1:532:A:VAL:CG1	1:562:A:PHE:CB	1	1.96
(1,242)	1:607:A:PHE:CZ	1:606:A:PRO:CB	9	1.96
(1,313)	1:594:A:PHE:CE1	1:607:A:PHE:CB	7	1.95
(1,271)	1:565:A:GLU:CA	1:489:A:GLY:CA	7	1.95
(1,264)	1:493:A:LYS:CE	1:537:A:ALA:CB	10	1.95
(1,286)	1:532:A:VAL:CG1	1:562:A:PHE:CB	5	1.94
(1,245)	1:535:A:PHE:CE1	1:480:A:ILE:CG1	3	1.94
(1,243)	1:562:A:PHE:CE1	1:706:A:ARG:CB	9	1.94
(1,302)	1:541:A:PRO:CD	1:521:A:GLU:CB	1	1.93
(1,292)	1:545:A:ASN:CA	1:521:A:GLU:CB	3	1.93
(1,237)	1:607:A:PHE:CZ	1:627:A:GLU:CB	6	1.93
(1,208)	1:599:A:ASN:CA	1:617:A:THR:CG2	9	1.93

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,326)	1:525:A:ASP:CA	1:531:A:GLU:CG	8	1.92
(1,292)	1:545:A:ASN:CA	1:521:A:GLU:CB	8	1.92
(1,286)	1:532:A:VAL:CG1	1:562:A:PHE:CB	7	1.92
(1,283)	1:492:A:PHE:CE1	1:543:A:PHE:CB	8	1.92
(1,247)	1:509:A:PHE:CZ	1:507:A:PHE:CD1	4	1.92
(1,228)	1:492:A:PHE:CD1	1:544:A:ASP:CA	3	1.92
(1,208)	1:599:A:ASN:CA	1:617:A:THR:CG2	5	1.92
(1,197)	1:537:A:ALA:CB	1:531:A:GLU:CG	9	1.92
(1,196)	1:545:A:ASN:CA	1:581:A:ILE:CB	8	1.92
(1,284)	1:674:A:SER:CB	1:581:A:ILE:CB	7	1.91
(1,271)	1:565:A:GLU:CA	1:489:A:GLY:CA	6	1.91
(1,202)	1:632:A:ALA:CB	1:593:A:VAL:CB	10	1.91
(1,208)	1:599:A:ASN:CA	1:617:A:THR:CG2	3	1.9
(1,198)	1:622:A:GLY:CA	1:612:A:GLU:CG	6	1.9
(1,320)	1:606:A:PRO:CA	1:581:A:ILE:CG2	2	1.89
(1,339)	1:565:A:GLU:CB	1:581:A:ILE:CD1	7	1.88
(1,320)	1:606:A:PRO:CA	1:581:A:ILE:CG2	5	1.88
(1,244)	1:594:A:PHE:CE1	1:624:A:ILE:CG1	7	1.88
(1,197)	1:537:A:ALA:CB	1:531:A:GLU:CG	4	1.88
(1,188)	1:593:A:VAL:CB	1:622:A:GLY:CA	10	1.88
(1,246)	1:543:A:PHE:CE1	1:541:A:PRO:CG	6	1.87
(1,12)	1:655:A:SER:CB	1:624:A:ILE:CG1	7	1.87
(1,303)	1:497:A:VAL:CB	1:482:A:ALA:CA	9	1.86
(1,214)	1:490:A:VAL:CB	1:480:A:ILE:CG2	4	1.86
(1,339)	1:565:A:GLU:CB	1:581:A:ILE:CD1	3	1.85
(1,284)	1:674:A:SER:CB	1:581:A:ILE:CB	5	1.85
(1,271)	1:565:A:GLU:CA	1:489:A:GLY:CA	5	1.85
(1,264)	1:493:A:LYS:CE	1:537:A:ALA:CB	9	1.85
(1,251)	1:492:A:PHE:CE1	1:487:A:HIS:CD2	2	1.85
(1,202)	1:632:A:ALA:CB	1:593:A:VAL:CB	9	1.85
(1,230)	1:535:A:PHE:CE1	1:536:A:LYS:CE	4	1.83
(1,196)	1:545:A:ASN:CA	1:581:A:ILE:CB	3	1.83
(1,245)	1:535:A:PHE:CE1	1:480:A:ILE:CG1	10	1.82
(1,333)	1:624:A:ILE:CG2	1:607:A:PHE:CB	9	1.81
(1,303)	1:497:A:VAL:CB	1:482:A:ALA:CA	5	1.81
(1,196)	1:545:A:ASN:CA	1:581:A:ILE:CB	9	1.81
(1,302)	1:541:A:PRO:CD	1:521:A:GLU:CB	2	1.8
(1,243)	1:562:A:PHE:CE1	1:706:A:ARG:CB	8	1.8
(1,202)	1:632:A:ALA:CB	1:593:A:VAL:CB	5	1.8
(1,319)	1:488:A:TYR:CB	1:581:A:ILE:CG1	4	1.79
(1,313)	1:594:A:PHE:CE1	1:607:A:PHE:CB	2	1.79
(1,302)	1:541:A:PRO:CD	1:521:A:GLU:CB	5	1.79

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,302)	1:541:A:PRO:CD	1:521:A:GLU:CB	10	1.79
(1,230)	1:535:A:PHE:CE1	1:536:A:LYS:CE	9	1.79
(1,202)	1:632:A:ALA:CB	1:593:A:VAL:CB	6	1.79
(1,204)	1:621:A:SER:CB	1:624:A:ILE:CG1	9	1.78
(1,191)	1:701:A:PRO:CA	1:689:A:LYS:CE	9	1.78
(1,243)	1:562:A:PHE:CE1	1:706:A:ARG:CB	1	1.77
(1,284)	1:674:A:SER:CB	1:581:A:ILE:CB	6	1.76
(1,247)	1:509:A:PHE:CZ	1:507:A:PHE:CD1	3	1.76
(1,246)	1:543:A:PHE:CE1	1:541:A:PRO:CG	5	1.76
(1,208)	1:599:A:ASN:CA	1:617:A:THR:CG2	1	1.76
(1,208)	1:599:A:ASN:CA	1:617:A:THR:CG2	2	1.76
(1,208)	1:599:A:ASN:CA	1:617:A:THR:CG2	4	1.76
(1,204)	1:621:A:SER:CB	1:624:A:ILE:CG1	3	1.76
(1,326)	1:525:A:ASP:CA	1:531:A:GLU:CG	1	1.75
(1,241)	1:509:A:PHE:CG	1:506:A:PRO:CB	6	1.75
(1,196)	1:545:A:ASN:CA	1:581:A:ILE:CB	4	1.75
(1,320)	1:606:A:PRO:CA	1:581:A:ILE:CG2	3	1.74
(1,292)	1:545:A:ASN:CA	1:521:A:GLU:CB	9	1.74
(1,184)	1:624:A:ILE:CD1	1:599:A:ASN:CA	8	1.74
(1,244)	1:594:A:PHE:CE1	1:624:A:ILE:CG1	9	1.73
(1,302)	1:541:A:PRO:CD	1:521:A:GLU:CB	3	1.72
(1,265)	1:492:A:PHE:CE1	1:487:A:HIS:CB	2	1.72
(1,276)	1:562:A:PHE:CG	1:566:A:ILE:CB	3	1.71
(1,214)	1:490:A:VAL:CB	1:480:A:ILE:CG2	6	1.71
(1,187)	1:625:A:VAL:CB	1:631:A:LEU:CB	5	1.71
(1,303)	1:497:A:VAL:CB	1:482:A:ALA:CA	7	1.69
(1,284)	1:674:A:SER:CB	1:581:A:ILE:CB	3	1.69
(1,188)	1:593:A:VAL:CB	1:622:A:GLY:CA	6	1.69
(1,245)	1:535:A:PHE:CE1	1:480:A:ILE:CG1	6	1.68
(1,208)	1:599:A:ASN:CA	1:617:A:THR:CG2	7	1.68
(1,313)	1:594:A:PHE:CE1	1:607:A:PHE:CB	1	1.67
(1,261)	1:593:A:VAL:CB	1:530:A:ASP:CB	10	1.67
(1,330)	1:624:A:ILE:CG2	1:601:A:VAL:CB	3	1.66
(1,214)	1:490:A:VAL:CB	1:480:A:ILE:CG2	7	1.66
(1,208)	1:599:A:ASN:CA	1:617:A:THR:CG2	10	1.66
(1,303)	1:497:A:VAL:CB	1:482:A:ALA:CA	10	1.65
(1,284)	1:674:A:SER:CB	1:581:A:ILE:CB	4	1.65
(1,264)	1:493:A:LYS:CE	1:537:A:ALA:CB	4	1.65
(1,241)	1:509:A:PHE:CG	1:506:A:PRO:CB	5	1.65
(1,196)	1:545:A:ASN:CA	1:581:A:ILE:CB	7	1.65
(1,191)	1:701:A:PRO:CA	1:689:A:LYS:CE	10	1.65
(1,246)	1:543:A:PHE:CE1	1:541:A:PRO:CG	4	1.64

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,196)	1:545:A:ASN:CA	1:581:A:ILE:CB	2	1.64
(1,208)	1:599:A:ASN:CA	1:617:A:THR:CG2	8	1.63
(1,326)	1:525:A:ASP:CA	1:531:A:GLU:CG	4	1.62
(1,284)	1:674:A:SER:CB	1:581:A:ILE:CB	10	1.62
(1,283)	1:492:A:PHE:CE1	1:543:A:PHE:CB	10	1.62
(1,191)	1:701:A:PRO:CA	1:689:A:LYS:CE	3	1.62
(1,214)	1:490:A:VAL:CB	1:480:A:ILE:CG2	5	1.61
(1,313)	1:594:A:PHE:CE1	1:607:A:PHE:CB	9	1.6
(1,286)	1:532:A:VAL:CG1	1:562:A:PHE:CB	8	1.6
(1,283)	1:492:A:PHE:CE1	1:543:A:PHE:CB	6	1.6
(1,326)	1:525:A:ASP:CA	1:531:A:GLU:CG	2	1.59
(1,326)	1:525:A:ASP:CA	1:531:A:GLU:CG	3	1.59
(1,258)	1:507:A:PHE:CG	1:518:A:LEU:CB	7	1.59
(1,231)	1:543:A:PHE:CE1	1:545:A:ASN:CB	10	1.59
(1,318)	1:577:A:TRP:CE2	1:594:A:PHE:CE1	1	1.57
(1,284)	1:674:A:SER:CB	1:581:A:ILE:CB	2	1.57
(1,231)	1:543:A:PHE:CE1	1:545:A:ASN:CB	5	1.57
(1,196)	1:545:A:ASN:CA	1:581:A:ILE:CB	10	1.57
(1,184)	1:624:A:ILE:CD1	1:599:A:ASN:CA	7	1.57
(1,292)	1:545:A:ASN:CA	1:521:A:GLU:CB	7	1.56
(1,214)	1:490:A:VAL:CB	1:480:A:ILE:CG2	10	1.56
(1,191)	1:701:A:PRO:CA	1:689:A:LYS:CE	7	1.56
(1,191)	1:701:A:PRO:CA	1:689:A:LYS:CE	8	1.56
(1,333)	1:624:A:ILE:CG2	1:607:A:PHE:CB	5	1.55
(1,310)	1:689:A:LYS:CB	1:674:A:SER:CB	3	1.55
(1,246)	1:543:A:PHE:CE1	1:541:A:PRO:CG	1	1.55
(1,226)	1:535:A:PHE:CE1	1:531:A:GLU:CA	8	1.53
(1,318)	1:577:A:TRP:CE2	1:594:A:PHE:CE1	2	1.52
(1,318)	1:577:A:TRP:CE2	1:594:A:PHE:CE1	7	1.52
(1,226)	1:535:A:PHE:CE1	1:531:A:GLU:CA	3	1.52
(1,215)	1:675:A:GLN:CG	1:687:A:ILE:CG2	5	1.52
(1,246)	1:543:A:PHE:CE1	1:541:A:PRO:CG	9	1.51
(1,270)	1:561:A:PRO:CG	1:674:A:SER:CB	3	1.5
(1,191)	1:701:A:PRO:CA	1:689:A:LYS:CE	1	1.5
(1,264)	1:493:A:LYS:CE	1:537:A:ALA:CB	7	1.49
(1,185)	1:601:A:VAL:CA	1:596:A:ALA:CA	5	1.49
(1,275)	1:535:A:PHE:CE1	1:659:A:GLU:CG	6	1.48
(1,2)	1:544:A:ASP:CA	1:557:A:THR:CG2	7	1.48
(1,243)	1:562:A:PHE:CE1	1:706:A:ARG:CB	4	1.47
(1,214)	1:490:A:VAL:CB	1:480:A:ILE:CG2	8	1.47
(1,333)	1:624:A:ILE:CG2	1:607:A:PHE:CB	3	1.46
(1,264)	1:493:A:LYS:CE	1:537:A:ALA:CB	3	1.46

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,303)	1:497:A:VAL:CB	1:482:A:ALA:CA	6	1.45
(1,215)	1:675:A:GLN:CG	1:687:A:ILE:CG2	10	1.45
(1,184)	1:624:A:ILE:CD1	1:599:A:ASN:CA	1	1.45
(1,215)	1:675:A:GLN:CG	1:687:A:ILE:CG2	6	1.44
(1,241)	1:509:A:PHE:CG	1:506:A:PRO:CB	8	1.43
(1,184)	1:624:A:ILE:CD1	1:599:A:ASN:CA	4	1.43
(1,19)	1:535:A:PHE:CE1	1:534:A:LYS:CG	3	1.43
(1,330)	1:624:A:ILE:CG2	1:601:A:VAL:CB	9	1.42
(1,276)	1:562:A:PHE:CG	1:566:A:ILE:CB	9	1.42
(1,195)	1:599:A:ASN:CA	1:613:A:ASN:CB	5	1.42
(1,184)	1:624:A:ILE:CD1	1:599:A:ASN:CA	2	1.42
(1,243)	1:562:A:PHE:CE1	1:706:A:ARG:CB	2	1.41
(1,226)	1:535:A:PHE:CE1	1:531:A:GLU:CA	6	1.41
(1,276)	1:562:A:PHE:CG	1:566:A:ILE:CB	7	1.4
(1,251)	1:492:A:PHE:CE1	1:487:A:HIS:CD2	8	1.4
(1,191)	1:701:A:PRO:CA	1:689:A:LYS:CE	2	1.4
(1,318)	1:577:A:TRP:CE2	1:594:A:PHE:CE1	8	1.39
(1,231)	1:543:A:PHE:CE1	1:545:A:ASN:CB	6	1.38
(1,215)	1:675:A:GLN:CG	1:687:A:ILE:CG2	7	1.38
(1,264)	1:493:A:LYS:CE	1:537:A:ALA:CB	5	1.37
(1,244)	1:594:A:PHE:CE1	1:624:A:ILE:CG1	8	1.37
(1,215)	1:675:A:GLN:CG	1:687:A:ILE:CG2	4	1.37
(1,191)	1:701:A:PRO:CA	1:689:A:LYS:CE	5	1.37
(1,283)	1:492:A:PHE:CE1	1:543:A:PHE:CB	1	1.36
(1,275)	1:535:A:PHE:CE1	1:659:A:GLU:CG	4	1.36
(1,243)	1:562:A:PHE:CE1	1:706:A:ARG:CB	3	1.36
(1,239)	1:535:A:PHE:CE1	1:532:A:VAL:CB	4	1.36
(1,214)	1:490:A:VAL:CB	1:480:A:ILE:CG2	9	1.36
(1,196)	1:545:A:ASN:CA	1:581:A:ILE:CB	6	1.36
(1,185)	1:601:A:VAL:CA	1:596:A:ALA:CA	6	1.36
(1,310)	1:689:A:LYS:CB	1:674:A:SER:CB	9	1.35
(1,196)	1:545:A:ASN:CA	1:581:A:ILE:CB	5	1.35
(1,259)	1:488:A:TYR:CD1	1:493:A:LYS:CE	10	1.34
(1,320)	1:606:A:PRO:CA	1:581:A:ILE:CG2	9	1.33
(1,284)	1:674:A:SER:CB	1:581:A:ILE:CB	8	1.33
(1,244)	1:594:A:PHE:CE1	1:624:A:ILE:CG1	2	1.33
(1,218)	1:577:A:TRP:CD2	1:573:A:LYS:CA	8	1.33
(1,259)	1:488:A:TYR:CD1	1:493:A:LYS:CE	2	1.32
(1,244)	1:594:A:PHE:CE1	1:624:A:ILE:CG1	4	1.32
(1,286)	1:532:A:VAL:CG1	1:562:A:PHE:CB	3	1.31
(1,276)	1:562:A:PHE:CG	1:566:A:ILE:CB	1	1.31
(1,330)	1:624:A:ILE:CG2	1:601:A:VAL:CB	4	1.3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,269)	1:546:A:ILE:CG2	1:532:A:VAL:CA	1	1.3
(1,230)	1:535:A:PHE:CE1	1:536:A:LYS:CE	10	1.3
(1,201)	1:482:A:ALA:CA	1:517:A:GLN:CG	7	1.3
(1,2)	1:544:A:ASP:CA	1:557:A:THR:CG2	8	1.3
(1,283)	1:492:A:PHE:CE1	1:543:A:PHE:CB	9	1.29
(1,241)	1:509:A:PHE:CG	1:506:A:PRO:CB	9	1.29
(1,318)	1:577:A:TRP:CE2	1:594:A:PHE:CE1	4	1.28
(1,317)	1:616:A:LEU:CB	1:624:A:ILE:CD1	2	1.28
(1,218)	1:577:A:TRP:CD2	1:573:A:LYS:CA	7	1.28
(1,189)	1:490:A:VAL:CB	1:518:A:LEU:CB	7	1.28
(1,317)	1:616:A:LEU:CB	1:624:A:ILE:CD1	8	1.27
(1,259)	1:488:A:TYR:CD1	1:493:A:LYS:CE	4	1.27
(1,244)	1:594:A:PHE:CE1	1:624:A:ILE:CG1	1	1.27
(1,184)	1:624:A:ILE:CD1	1:599:A:ASN:CA	5	1.27
(1,317)	1:616:A:LEU:CB	1:624:A:ILE:CD1	1	1.26
(1,312)	1:594:A:PHE:CG	1:577:A:TRP:CH2	8	1.26
(1,264)	1:493:A:LYS:CE	1:537:A:ALA:CB	2	1.26
(1,215)	1:675:A:GLN:CG	1:687:A:ILE:CG2	2	1.26
(1,189)	1:490:A:VAL:CB	1:518:A:LEU:CB	3	1.26
(1,278)	1:535:A:PHE:CG	1:487:A:HIS:CB	6	1.25
(1,274)	1:544:A:ASP:CA	1:535:A:PHE:CA	3	1.25
(1,317)	1:616:A:LEU:CB	1:624:A:ILE:CD1	4	1.24
(1,218)	1:577:A:TRP:CD2	1:573:A:LYS:CA	4	1.24
(1,330)	1:624:A:ILE:CG2	1:601:A:VAL:CB	8	1.23
(1,333)	1:624:A:ILE:CG2	1:607:A:PHE:CB	10	1.22
(1,331)	1:513:A:ASP:CB	1:506:A:PRO:CB	7	1.22
(1,312)	1:594:A:PHE:CG	1:577:A:TRP:CH2	1	1.22
(1,184)	1:624:A:ILE:CD1	1:599:A:ASN:CA	3	1.22
(1,231)	1:543:A:PHE:CE1	1:545:A:ASN:CB	8	1.21
(1,214)	1:490:A:VAL:CB	1:480:A:ILE:CG2	2	1.21
(1,276)	1:562:A:PHE:CG	1:566:A:ILE:CB	2	1.2
(1,270)	1:561:A:PRO:CG	1:674:A:SER:CB	9	1.2
(1,160)	1:488:A:TYR:CG	1:490:A:VAL:CB	7	1.2
(1,330)	1:624:A:ILE:CG2	1:601:A:VAL:CB	2	1.19
(1,311)	1:535:A:PHE:CA	1:540:A:LEU:CA	6	1.19
(1,215)	1:675:A:GLN:CG	1:687:A:ILE:CG2	8	1.19
(1,214)	1:490:A:VAL:CB	1:480:A:ILE:CG2	1	1.19
(1,185)	1:601:A:VAL:CA	1:596:A:ALA:CA	7	1.19
(1,333)	1:624:A:ILE:CG2	1:607:A:PHE:CB	6	1.18
(1,261)	1:593:A:VAL:CB	1:530:A:ASP:CB	5	1.18
(1,228)	1:492:A:PHE:CD1	1:544:A:ASP:CA	9	1.18
(1,191)	1:701:A:PRO:CA	1:689:A:LYS:CE	6	1.18

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2)	1:544:A:ASP:CA	1:557:A:THR:CG2	4	1.18
(1,276)	1:562:A:PHE:CG	1:566:A:ILE:CB	6	1.17
(1,276)	1:562:A:PHE:CG	1:566:A:ILE:CB	10	1.17
(1,261)	1:593:A:VAL:CB	1:530:A:ASP:CB	6	1.17
(1,231)	1:543:A:PHE:CE1	1:545:A:ASN:CB	2	1.17
(1,313)	1:594:A:PHE:CE1	1:607:A:PHE:CB	8	1.16
(1,269)	1:546:A:ILE:CG2	1:532:A:VAL:CA	10	1.16
(1,164)	1:492:A:PHE:CZ	1:493:A:LYS:CA	10	1.16
(1,312)	1:594:A:PHE:CG	1:577:A:TRP:CH2	4	1.15
(1,284)	1:674:A:SER:CB	1:581:A:ILE:CB	9	1.15
(1,276)	1:562:A:PHE:CG	1:566:A:ILE:CB	8	1.15
(1,264)	1:493:A:LYS:CE	1:537:A:ALA:CB	8	1.15
(1,218)	1:577:A:TRP:CD2	1:573:A:LYS:CA	1	1.15
(1,191)	1:701:A:PRO:CA	1:689:A:LYS:CE	4	1.15
(1,310)	1:689:A:LYS:CB	1:674:A:SER:CB	4	1.14
(1,247)	1:509:A:PHE:CZ	1:507:A:PHE:CD1	8	1.14
(1,333)	1:624:A:ILE:CG2	1:607:A:PHE:CB	1	1.13
(1,330)	1:624:A:ILE:CG2	1:601:A:VAL:CB	1	1.13
(1,317)	1:616:A:LEU:CB	1:624:A:ILE:CD1	7	1.13
(1,264)	1:493:A:LYS:CE	1:537:A:ALA:CB	6	1.13
(1,246)	1:543:A:PHE:CE1	1:541:A:PRO:CG	3	1.13
(1,231)	1:543:A:PHE:CE1	1:545:A:ASN:CB	4	1.13
(1,310)	1:689:A:LYS:CB	1:674:A:SER:CB	7	1.12
(1,276)	1:562:A:PHE:CG	1:566:A:ILE:CB	5	1.12
(1,189)	1:490:A:VAL:CB	1:518:A:LEU:CB	1	1.12
(1,2)	1:544:A:ASP:CA	1:557:A:THR:CG2	10	1.12
(1,312)	1:594:A:PHE:CG	1:577:A:TRP:CH2	2	1.11
(1,276)	1:562:A:PHE:CG	1:566:A:ILE:CB	4	1.11
(1,269)	1:546:A:ILE:CG2	1:532:A:VAL:CA	5	1.11
(1,2)	1:544:A:ASP:CA	1:557:A:THR:CG2	5	1.11
(1,333)	1:624:A:ILE:CG2	1:607:A:PHE:CB	2	1.1
(1,326)	1:525:A:ASP:CA	1:531:A:GLU:CG	9	1.1
(1,310)	1:689:A:LYS:CB	1:674:A:SER:CB	2	1.1
(1,273)	1:487:A:HIS:CE1	1:545:A:ASN:CA	7	1.09
(1,226)	1:535:A:PHE:CE1	1:531:A:GLU:CA	1	1.09
(1,160)	1:488:A:TYR:CG	1:490:A:VAL:CB	1	1.09
(1,330)	1:624:A:ILE:CG2	1:601:A:VAL:CB	5	1.08
(1,320)	1:606:A:PRO:CA	1:581:A:ILE:CG2	6	1.08
(1,241)	1:509:A:PHE:CG	1:506:A:PRO:CB	1	1.08
(1,310)	1:689:A:LYS:CB	1:674:A:SER:CB	8	1.07
(1,247)	1:509:A:PHE:CZ	1:507:A:PHE:CD1	9	1.07
(1,218)	1:577:A:TRP:CD2	1:573:A:LYS:CA	2	1.07

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,218)	1:577:A:TRP:CD2	1:573:A:LYS:CA	3	1.07
(1,297)	1:603:A:HIS:CE1	1:607:A:PHE:CE1	9	1.06
(1,185)	1:601:A:VAL:CA	1:596:A:ALA:CA	10	1.06
(1,2)	1:544:A:ASP:CA	1:557:A:THR:CG2	2	1.06
(1,310)	1:689:A:LYS:CB	1:674:A:SER:CB	10	1.05
(1,297)	1:603:A:HIS:CE1	1:607:A:PHE:CE1	6	1.05
(1,283)	1:492:A:PHE:CE1	1:543:A:PHE:CB	3	1.05
(1,189)	1:490:A:VAL:CB	1:518:A:LEU:CB	4	1.05
(1,160)	1:488:A:TYR:CG	1:490:A:VAL:CB	10	1.05
(1,337)	1:535:A:PHE:CE1	1:577:A:TRP:CE3	8	1.04
(1,333)	1:624:A:ILE:CG2	1:607:A:PHE:CB	4	1.04
(1,312)	1:594:A:PHE:CG	1:577:A:TRP:CH2	7	1.04
(1,271)	1:565:A:GLU:CA	1:489:A:GLY:CA	9	1.04
(1,195)	1:599:A:ASN:CA	1:613:A:ASN:CB	7	1.04
(1,189)	1:490:A:VAL:CB	1:518:A:LEU:CB	9	1.04
(1,160)	1:488:A:TYR:CG	1:490:A:VAL:CB	2	1.04
(1,113)	1:535:A:PHE:CD1	1:577:A:TRP:CZ2	9	1.04
(1,214)	1:490:A:VAL:CB	1:480:A:ILE:CG2	3	1.03
(1,198)	1:622:A:GLY:CA	1:612:A:GLU:CG	5	1.03
(1,318)	1:577:A:TRP:CE2	1:594:A:PHE:CE1	9	1.02
(1,241)	1:509:A:PHE:CG	1:506:A:PRO:CB	10	1.02
(1,189)	1:490:A:VAL:CB	1:518:A:LEU:CB	2	1.02
(1,2)	1:544:A:ASP:CA	1:557:A:THR:CG2	3	1.02
(1,274)	1:544:A:ASP:CA	1:535:A:PHE:CA	7	1.01
(1,330)	1:624:A:ILE:CG2	1:601:A:VAL:CB	10	1.0
(1,259)	1:488:A:TYR:CD1	1:493:A:LYS:CE	7	1.0
(1,215)	1:675:A:GLN:CG	1:687:A:ILE:CG2	1	1.0
(1,195)	1:599:A:ASN:CA	1:613:A:ASN:CB	3	1.0
(1,185)	1:601:A:VAL:CA	1:596:A:ALA:CA	3	1.0
(1,278)	1:535:A:PHE:CG	1:487:A:HIS:CB	1	0.99
(1,223)	1:487:A:HIS:CE1	1:564:A:LEU:CA	7	0.99
(1,2)	1:544:A:ASP:CA	1:557:A:THR:CG2	6	0.99
(1,195)	1:599:A:ASN:CA	1:613:A:ASN:CB	9	0.98
(1,164)	1:492:A:PHE:CZ	1:493:A:LYS:CA	7	0.98
(1,329)	1:682:A:HIS:CG	1:689:A:LYS:CD	3	0.97
(1,297)	1:603:A:HIS:CE1	1:607:A:PHE:CE1	1	0.97
(1,231)	1:543:A:PHE:CE1	1:545:A:ASN:CB	1	0.97
(1,320)	1:606:A:PRO:CA	1:581:A:ILE:CG2	10	0.96
(1,329)	1:682:A:HIS:CG	1:689:A:LYS:CD	9	0.95
(1,310)	1:689:A:LYS:CB	1:674:A:SER:CB	6	0.95
(1,164)	1:492:A:PHE:CZ	1:493:A:LYS:CA	2	0.95
(1,164)	1:492:A:PHE:CZ	1:493:A:LYS:CA	5	0.95

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,316)	1:607:A:PHE:CA	1:612:A:GLU:CG	10	0.94
(1,310)	1:689:A:LYS:CB	1:674:A:SER:CB	1	0.94
(1,264)	1:493:A:LYS:CE	1:537:A:ALA:CB	1	0.94
(1,331)	1:513:A:ASP:CB	1:506:A:PRO:CB	6	0.92
(1,330)	1:624:A:ILE:CG2	1:601:A:VAL:CB	7	0.92
(1,310)	1:689:A:LYS:CB	1:674:A:SER:CB	5	0.92
(1,262)	1:515:A:GLU:CG	1:518:A:LEU:CB	4	0.92
(1,331)	1:513:A:ASP:CB	1:506:A:PRO:CB	9	0.91
(1,218)	1:577:A:TRP:CD2	1:573:A:LYS:CA	9	0.91
(1,113)	1:535:A:PHE:CD1	1:577:A:TRP:CZ2	7	0.91
(1,330)	1:624:A:ILE:CG2	1:601:A:VAL:CB	6	0.9
(1,259)	1:488:A:TYR:CD1	1:493:A:LYS:CE	6	0.9
(1,241)	1:509:A:PHE:CG	1:506:A:PRO:CB	2	0.9
(1,160)	1:488:A:TYR:CG	1:490:A:VAL:CB	8	0.9
(1,333)	1:624:A:ILE:CG2	1:607:A:PHE:CB	8	0.89
(1,317)	1:616:A:LEU:CB	1:624:A:ILE:CD1	10	0.89
(1,316)	1:607:A:PHE:CA	1:612:A:GLU:CG	7	0.89
(1,312)	1:594:A:PHE:CG	1:577:A:TRP:CH2	3	0.89
(1,297)	1:603:A:HIS:CE1	1:607:A:PHE:CE1	4	0.89
(1,247)	1:509:A:PHE:CZ	1:507:A:PHE:CD1	10	0.89
(1,241)	1:509:A:PHE:CG	1:506:A:PRO:CB	3	0.89
(1,195)	1:599:A:ASN:CA	1:613:A:ASN:CB	8	0.89
(1,184)	1:624:A:ILE:CD1	1:599:A:ASN:CA	10	0.89
(1,113)	1:535:A:PHE:CD1	1:577:A:TRP:CZ2	4	0.89
(1,317)	1:616:A:LEU:CB	1:624:A:ILE:CD1	3	0.88
(1,312)	1:594:A:PHE:CG	1:577:A:TRP:CH2	9	0.88
(1,297)	1:603:A:HIS:CE1	1:607:A:PHE:CE1	8	0.88
(1,269)	1:546:A:ILE:CG2	1:532:A:VAL:CA	2	0.88
(1,261)	1:593:A:VAL:CB	1:530:A:ASP:CB	3	0.88
(1,261)	1:593:A:VAL:CB	1:530:A:ASP:CB	7	0.88
(1,185)	1:601:A:VAL:CA	1:596:A:ALA:CA	4	0.88
(1,164)	1:492:A:PHE:CZ	1:493:A:LYS:CA	1	0.88
(1,226)	1:535:A:PHE:CE1	1:531:A:GLU:CA	5	0.87
(1,2)	1:544:A:ASP:CA	1:557:A:THR:CG2	1	0.87
(1,232)	1:682:A:HIS:CG	1:687:A:ILE:CB	9	0.86
(1,218)	1:577:A:TRP:CD2	1:573:A:LYS:CA	10	0.86
(1,185)	1:601:A:VAL:CA	1:596:A:ALA:CA	8	0.85
(1,297)	1:603:A:HIS:CE1	1:607:A:PHE:CE1	3	0.84
(1,269)	1:546:A:ILE:CG2	1:532:A:VAL:CA	4	0.84
(1,247)	1:509:A:PHE:CZ	1:507:A:PHE:CD1	7	0.84
(1,223)	1:487:A:HIS:CE1	1:564:A:LEU:CA	3	0.84
(1,160)	1:488:A:TYR:CG	1:490:A:VAL:CB	5	0.84

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,331)	1:513:A:ASP:CB	1:506:A:PRO:CB	5	0.83
(1,297)	1:603:A:HIS:CE1	1:607:A:PHE:CE1	2	0.83
(1,274)	1:544:A:ASP:CA	1:535:A:PHE:CA	9	0.83
(1,237)	1:607:A:PHE:CZ	1:627:A:GLU:CB	5	0.83
(1,270)	1:561:A:PRO:CG	1:674:A:SER:CB	1	0.82
(1,231)	1:543:A:PHE:CE1	1:545:A:ASN:CB	7	0.82
(1,317)	1:616:A:LEU:CB	1:624:A:ILE:CD1	6	0.81
(1,305)	1:687:A:ILE:CG2	1:713:A:ARG:CD	10	0.81
(1,275)	1:535:A:PHE:CE1	1:659:A:GLU:CG	8	0.81
(1,269)	1:546:A:ILE:CG2	1:532:A:VAL:CA	3	0.81
(1,230)	1:535:A:PHE:CE1	1:536:A:LYS:CE	7	0.81
(1,195)	1:599:A:ASN:CA	1:613:A:ASN:CB	6	0.81
(1,184)	1:624:A:ILE:CD1	1:599:A:ASN:CA	6	0.81
(1,318)	1:577:A:TRP:CE2	1:594:A:PHE:CE1	3	0.8
(1,226)	1:535:A:PHE:CE1	1:531:A:GLU:CA	7	0.8
(1,199)	1:542:A:GLN:CG	1:541:A:PRO:CD	8	0.8
(1,189)	1:490:A:VAL:CB	1:518:A:LEU:CB	10	0.8
(1,302)	1:541:A:PRO:CD	1:521:A:GLU:CB	4	0.79
(1,297)	1:603:A:HIS:CE1	1:607:A:PHE:CE1	5	0.79
(1,297)	1:603:A:HIS:CE1	1:607:A:PHE:CE1	7	0.79
(1,297)	1:603:A:HIS:CE1	1:607:A:PHE:CE1	10	0.79
(1,280)	1:573:A:LYS:CA	1:562:A:PHE:CB	8	0.79
(1,270)	1:561:A:PRO:CG	1:674:A:SER:CB	10	0.79
(1,223)	1:487:A:HIS:CE1	1:564:A:LEU:CA	9	0.79
(1,142)	1:492:A:PHE:CZ	1:490:A:VAL:CB	4	0.79
(1,141)	1:509:A:PHE:CG	1:507:A:PHE:CG	10	0.79
(1,278)	1:535:A:PHE:CG	1:487:A:HIS:CB	5	0.78
(1,184)	1:624:A:ILE:CD1	1:599:A:ASN:CA	9	0.78
(1,226)	1:535:A:PHE:CE1	1:531:A:GLU:CA	10	0.77
(1,195)	1:599:A:ASN:CA	1:613:A:ASN:CB	10	0.77
(1,185)	1:601:A:VAL:CA	1:596:A:ALA:CA	2	0.77
(1,160)	1:488:A:TYR:CG	1:490:A:VAL:CB	9	0.77
(1,280)	1:573:A:LYS:CA	1:562:A:PHE:CB	5	0.76
(1,269)	1:546:A:ILE:CG2	1:532:A:VAL:CA	6	0.76
(1,259)	1:488:A:TYR:CD1	1:493:A:LYS:CE	3	0.76
(1,232)	1:682:A:HIS:CG	1:687:A:ILE:CB	3	0.76
(1,185)	1:601:A:VAL:CA	1:596:A:ALA:CA	1	0.76
(1,185)	1:601:A:VAL:CA	1:596:A:ALA:CA	9	0.76
(1,280)	1:573:A:LYS:CA	1:562:A:PHE:CB	4	0.75
(1,189)	1:490:A:VAL:CB	1:518:A:LEU:CB	8	0.75
(1,141)	1:509:A:PHE:CG	1:507:A:PHE:CG	8	0.75
(1,311)	1:535:A:PHE:CA	1:540:A:LEU:CA	8	0.74

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,280)	1:573:A:LYS:CA	1:562:A:PHE:CB	6	0.74
(1,274)	1:544:A:ASP:CA	1:535:A:PHE:CA	2	0.74
(1,270)	1:561:A:PRO:CG	1:674:A:SER:CB	8	0.74
(1,160)	1:488:A:TYR:CG	1:490:A:VAL:CB	4	0.74
(1,113)	1:535:A:PHE:CD1	1:577:A:TRP:CZ2	5	0.74
(1,316)	1:607:A:PHE:CA	1:612:A:GLU:CG	5	0.73
(1,270)	1:561:A:PRO:CG	1:674:A:SER:CB	4	0.73
(1,247)	1:509:A:PHE:CZ	1:507:A:PHE:CD1	1	0.73
(1,160)	1:488:A:TYR:CG	1:490:A:VAL:CB	6	0.73
(1,317)	1:616:A:LEU:CB	1:624:A:ILE:CD1	9	0.72
(1,226)	1:535:A:PHE:CE1	1:531:A:GLU:CA	2	0.72
(1,337)	1:535:A:PHE:CE1	1:577:A:TRP:CE3	2	0.71
(1,331)	1:513:A:ASP:CB	1:506:A:PRO:CB	3	0.71
(1,316)	1:607:A:PHE:CA	1:612:A:GLU:CG	6	0.71
(1,241)	1:509:A:PHE:CG	1:506:A:PRO:CB	4	0.71
(1,333)	1:624:A:ILE:CG2	1:607:A:PHE:CB	7	0.7
(1,280)	1:573:A:LYS:CA	1:562:A:PHE:CB	2	0.7
(1,223)	1:487:A:HIS:CE1	1:564:A:LEU:CA	1	0.7
(1,141)	1:509:A:PHE:CG	1:507:A:PHE:CG	4	0.69
(1,259)	1:488:A:TYR:CD1	1:493:A:LYS:CE	5	0.68
(1,232)	1:682:A:HIS:CG	1:687:A:ILE:CB	1	0.68
(1,337)	1:535:A:PHE:CE1	1:577:A:TRP:CE3	1	0.67
(1,265)	1:492:A:PHE:CE1	1:487:A:HIS:CB	8	0.67
(1,228)	1:492:A:PHE:CD1	1:544:A:ASP:CA	4	0.66
(1,199)	1:542:A:GLN:CG	1:541:A:PRO:CD	9	0.66
(1,19)	1:535:A:PHE:CE1	1:534:A:LYS:CG	1	0.66
(1,232)	1:682:A:HIS:CG	1:687:A:ILE:CB	4	0.65
(1,223)	1:487:A:HIS:CE1	1:564:A:LEU:CA	8	0.65
(1,141)	1:509:A:PHE:CG	1:507:A:PHE:CG	3	0.65
(1,234)	1:492:A:PHE:CE1	1:490:A:VAL:CB	5	0.64
(1,195)	1:599:A:ASN:CA	1:613:A:ASN:CB	1	0.64
(1,280)	1:573:A:LYS:CA	1:562:A:PHE:CB	1	0.63
(1,280)	1:573:A:LYS:CA	1:562:A:PHE:CB	7	0.63
(1,280)	1:573:A:LYS:CA	1:562:A:PHE:CB	10	0.63
(1,195)	1:599:A:ASN:CA	1:613:A:ASN:CB	2	0.63
(1,141)	1:509:A:PHE:CG	1:507:A:PHE:CG	1	0.63
(1,19)	1:535:A:PHE:CE1	1:534:A:LYS:CG	8	0.62
(1,312)	1:594:A:PHE:CG	1:577:A:TRP:CH2	5	0.61
(1,265)	1:492:A:PHE:CE1	1:487:A:HIS:CB	4	0.61
(1,230)	1:535:A:PHE:CE1	1:536:A:LYS:CE	6	0.61
(1,189)	1:490:A:VAL:CB	1:518:A:LEU:CB	5	0.61
(1,151)	1:546:A:ILE:CD1	1:552:A:LYS:CG	5	0.61

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,195)	1:599:A:ASN:CA	1:613:A:ASN:CB	4	0.6
(1,19)	1:535:A:PHE:CE1	1:534:A:LYS:CG	2	0.6
(1,316)	1:607:A:PHE:CA	1:612:A:GLU:CG	4	0.59
(1,275)	1:535:A:PHE:CE1	1:659:A:GLU:CG	2	0.59
(1,247)	1:509:A:PHE:CZ	1:507:A:PHE:CD1	6	0.59
(1,115)	1:487:A:HIS:CG	1:486:A:PRO:CG	3	0.59
(1,19)	1:535:A:PHE:CE1	1:534:A:LYS:CG	7	0.59
(1,331)	1:513:A:ASP:CB	1:506:A:PRO:CB	8	0.58
(1,331)	1:513:A:ASP:CB	1:506:A:PRO:CB	4	0.57
(1,280)	1:573:A:LYS:CA	1:562:A:PHE:CB	3	0.57
(1,275)	1:535:A:PHE:CE1	1:659:A:GLU:CG	1	0.57
(1,232)	1:682:A:HIS:CG	1:687:A:ILE:CB	2	0.57
(1,141)	1:509:A:PHE:CG	1:507:A:PHE:CG	7	0.57
(1,232)	1:682:A:HIS:CG	1:687:A:ILE:CB	7	0.56
(1,209)	1:675:A:GLN:CA	1:703:A:THR:CG2	4	0.56
(1,316)	1:607:A:PHE:CA	1:612:A:GLU:CG	2	0.55
(1,270)	1:561:A:PRO:CG	1:674:A:SER:CB	6	0.55
(1,270)	1:561:A:PRO:CG	1:674:A:SER:CB	7	0.55
(1,141)	1:509:A:PHE:CG	1:507:A:PHE:CG	2	0.55
(1,141)	1:509:A:PHE:CG	1:507:A:PHE:CG	5	0.55
(1,209)	1:675:A:GLN:CA	1:703:A:THR:CG2	7	0.54
(1,209)	1:675:A:GLN:CA	1:703:A:THR:CG2	10	0.54
(1,232)	1:682:A:HIS:CG	1:687:A:ILE:CB	8	0.53
(1,218)	1:577:A:TRP:CD2	1:573:A:LYS:CA	5	0.53
(1,141)	1:509:A:PHE:CG	1:507:A:PHE:CG	6	0.53
(1,278)	1:535:A:PHE:CG	1:487:A:HIS:CB	2	0.52
(1,247)	1:509:A:PHE:CZ	1:507:A:PHE:CD1	2	0.52
(1,209)	1:675:A:GLN:CA	1:703:A:THR:CG2	2	0.52
(1,199)	1:542:A:GLN:CG	1:541:A:PRO:CD	7	0.52
(1,280)	1:573:A:LYS:CA	1:562:A:PHE:CB	9	0.51
(1,278)	1:535:A:PHE:CG	1:487:A:HIS:CB	10	0.51
(1,241)	1:509:A:PHE:CG	1:506:A:PRO:CB	7	0.51
(1,115)	1:487:A:HIS:CG	1:486:A:PRO:CG	9	0.51
(1,335)	1:687:A:ILE:CG2	1:682:A:HIS:CB	3	0.5
(1,335)	1:687:A:ILE:CG2	1:682:A:HIS:CB	9	0.5
(1,328)	1:628:A:GLY:CA	1:602:A:VAL:CB	7	0.5
(1,311)	1:535:A:PHE:CA	1:540:A:LEU:CA	4	0.5
(1,270)	1:561:A:PRO:CG	1:674:A:SER:CB	2	0.5
(1,113)	1:535:A:PHE:CD1	1:577:A:TRP:CZ2	3	0.5
(1,2)	1:544:A:ASP:CA	1:557:A:THR:CG2	9	0.49
(1,270)	1:561:A:PRO:CG	1:674:A:SER:CB	5	0.48
(1,238)	1:562:A:PHE:CE1	1:565:A:GLU:CB	3	0.48

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,218)	1:577:A:TRP:CD2	1:573:A:LYS:CA	6	0.48
(1,141)	1:509:A:PHE:CG	1:507:A:PHE:CG	9	0.48
(1,314)	1:493:A:LYS:CE	1:541:A:PRO:CA	10	0.47
(1,160)	1:488:A:TYR:CG	1:490:A:VAL:CB	3	0.47
(1,315)	1:603:A:HIS:CG	1:593:A:VAL:CB	1	0.46
(1,278)	1:535:A:PHE:CG	1:487:A:HIS:CB	3	0.46
(1,262)	1:515:A:GLU:CG	1:518:A:LEU:CB	6	0.46
(1,316)	1:607:A:PHE:CA	1:612:A:GLU:CG	1	0.44
(1,261)	1:593:A:VAL:CB	1:530:A:ASP:CB	8	0.44
(1,223)	1:487:A:HIS:CE1	1:564:A:LEU:CA	5	0.44
(1,223)	1:487:A:HIS:CE1	1:564:A:LEU:CA	4	0.43
(1,215)	1:675:A:GLN:CG	1:687:A:ILE:CG2	3	0.43
(1,115)	1:487:A:HIS:CG	1:486:A:PRO:CG	7	0.43
(1,113)	1:535:A:PHE:CD1	1:577:A:TRP:CZ2	10	0.43
(1,329)	1:682:A:HIS:CG	1:689:A:LYS:CD	6	0.42
(1,335)	1:687:A:ILE:CG2	1:682:A:HIS:CB	4	0.41
(1,274)	1:544:A:ASP:CA	1:535:A:PHE:CA	10	0.41
(1,262)	1:515:A:GLU:CG	1:518:A:LEU:CB	7	0.41
(1,232)	1:682:A:HIS:CG	1:687:A:ILE:CB	10	0.41
(1,223)	1:487:A:HIS:CE1	1:564:A:LEU:CA	2	0.41
(1,19)	1:535:A:PHE:CE1	1:534:A:LYS:CG	10	0.41
(1,151)	1:546:A:ILE:CD1	1:552:A:LYS:CG	9	0.4
(1,332)	1:714:A:PHE:CB	1:706:A:ARG:CB	9	0.39
(1,329)	1:682:A:HIS:CG	1:689:A:LYS:CD	4	0.39
(1,318)	1:577:A:TRP:CE2	1:594:A:PHE:CE1	5	0.39
(1,269)	1:546:A:ILE:CG2	1:532:A:VAL:CA	7	0.39
(1,232)	1:682:A:HIS:CG	1:687:A:ILE:CB	5	0.39
(1,230)	1:535:A:PHE:CE1	1:536:A:LYS:CE	5	0.39
(1,331)	1:513:A:ASP:CB	1:506:A:PRO:CB	1	0.38
(1,315)	1:603:A:HIS:CG	1:593:A:VAL:CB	7	0.38
(1,209)	1:675:A:GLN:CA	1:703:A:THR:CG2	1	0.38
(1,316)	1:607:A:PHE:CA	1:612:A:GLU:CG	9	0.37
(1,247)	1:509:A:PHE:CZ	1:507:A:PHE:CD1	5	0.37
(1,223)	1:487:A:HIS:CE1	1:564:A:LEU:CA	6	0.37
(1,316)	1:607:A:PHE:CA	1:612:A:GLU:CG	8	0.36
(1,206)	1:607:A:PHE:CB	1:534:A:LYS:CG	9	0.36
(1,329)	1:682:A:HIS:CG	1:689:A:LYS:CD	5	0.35
(1,325)	1:487:A:HIS:CG	1:488:A:TYR:CE1	1	0.35
(1,315)	1:603:A:HIS:CG	1:593:A:VAL:CB	2	0.35
(1,231)	1:543:A:PHE:CE1	1:545:A:ASN:CB	9	0.35
(1,206)	1:607:A:PHE:CB	1:534:A:LYS:CG	4	0.35
(1,232)	1:682:A:HIS:CG	1:687:A:ILE:CB	6	0.34

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,151)	1:546:A:ILE:CD1	1:552:A:LYS:CG	4	0.34
(1,335)	1:687:A:ILE:CG2	1:682:A:HIS:CB	1	0.33
(1,269)	1:546:A:ILE:CG2	1:532:A:VAL:CA	9	0.33
(1,209)	1:675:A:GLN:CA	1:703:A:THR:CG2	8	0.33
(1,189)	1:490:A:VAL:CB	1:518:A:LEU:CB	6	0.33
(1,311)	1:535:A:PHE:CA	1:540:A:LEU:CA	5	0.31
(1,262)	1:515:A:GLU:CG	1:518:A:LEU:CB	8	0.31
(1,328)	1:628:A:GLY:CA	1:602:A:VAL:CB	8	0.3
(1,230)	1:535:A:PHE:CE1	1:536:A:LYS:CE	1	0.3
(1,223)	1:487:A:HIS:CE1	1:564:A:LEU:CA	10	0.3
(1,13)	1:562:A:PHE:CZ	1:682:A:HIS:CB	2	0.3
(1,332)	1:714:A:PHE:CB	1:706:A:ARG:CB	8	0.29
(1,315)	1:603:A:HIS:CG	1:593:A:VAL:CB	8	0.28
(1,312)	1:594:A:PHE:CG	1:577:A:TRP:CH2	10	0.28
(1,335)	1:687:A:ILE:CG2	1:682:A:HIS:CB	10	0.27
(1,325)	1:487:A:HIS:CG	1:488:A:TYR:CE1	6	0.27
(1,315)	1:603:A:HIS:CG	1:593:A:VAL:CB	4	0.27
(1,312)	1:594:A:PHE:CG	1:577:A:TRP:CH2	6	0.27
(1,335)	1:687:A:ILE:CG2	1:682:A:HIS:CB	7	0.26
(1,325)	1:487:A:HIS:CG	1:488:A:TYR:CE1	10	0.25
(1,314)	1:493:A:LYS:CE	1:541:A:PRO:CA	9	0.25
(1,115)	1:487:A:HIS:CG	1:486:A:PRO:CG	5	0.25
(1,113)	1:535:A:PHE:CD1	1:577:A:TRP:CZ2	6	0.25
(1,329)	1:682:A:HIS:CG	1:689:A:LYS:CD	7	0.24
(1,325)	1:487:A:HIS:CG	1:488:A:TYR:CE1	2	0.24
(1,314)	1:493:A:LYS:CE	1:541:A:PRO:CA	1	0.24
(1,278)	1:535:A:PHE:CG	1:487:A:HIS:CB	9	0.24
(1,278)	1:535:A:PHE:CG	1:487:A:HIS:CB	7	0.23
(1,261)	1:593:A:VAL:CB	1:530:A:ASP:CB	9	0.23
(1,328)	1:628:A:GLY:CA	1:602:A:VAL:CB	4	0.22
(1,305)	1:687:A:ILE:CG2	1:713:A:ARG:CD	5	0.22
(1,262)	1:515:A:GLU:CG	1:518:A:LEU:CB	5	0.22
(1,115)	1:487:A:HIS:CG	1:486:A:PRO:CG	6	0.22
(1,13)	1:562:A:PHE:CZ	1:682:A:HIS:CB	7	0.22
(1,335)	1:687:A:ILE:CG2	1:682:A:HIS:CB	8	0.21
(1,325)	1:487:A:HIS:CG	1:488:A:TYR:CE1	5	0.21
(1,305)	1:687:A:ILE:CG2	1:713:A:ARG:CD	9	0.21
(1,269)	1:546:A:ILE:CG2	1:532:A:VAL:CA	8	0.21
(1,234)	1:492:A:PHE:CE1	1:490:A:VAL:CB	1	0.21
(1,151)	1:546:A:ILE:CD1	1:552:A:LYS:CG	1	0.21
(1,335)	1:687:A:ILE:CG2	1:682:A:HIS:CB	2	0.2
(1,13)	1:562:A:PHE:CZ	1:682:A:HIS:CB	5	0.2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,332)	1:714:A:PHE:CB	1:706:A:ARG:CB	2	0.19
(1,281)	1:624:A:ILE:CD1	1:627:A:GLU:CB	10	0.19
(1,209)	1:675:A:GLN:CA	1:703:A:THR:CG2	5	0.19
(1,209)	1:675:A:GLN:CA	1:703:A:THR:CG2	6	0.19
(1,151)	1:546:A:ILE:CD1	1:552:A:LYS:CG	10	0.19
(1,238)	1:562:A:PHE:CE1	1:565:A:GLU:CB	9	0.18
(1,134)	1:487:A:HIS:CG	1:487:A:HIS:CD2	4	0.18
(1,115)	1:487:A:HIS:CG	1:486:A:PRO:CG	8	0.18
(1,13)	1:562:A:PHE:CZ	1:682:A:HIS:CB	9	0.18
(1,335)	1:687:A:ILE:CG2	1:682:A:HIS:CB	5	0.17
(1,305)	1:687:A:ILE:CG2	1:713:A:ARG:CD	7	0.17
(1,283)	1:492:A:PHE:CE1	1:543:A:PHE:CB	5	0.17
(1,213)	1:497:A:VAL:CB	1:480:A:ILE:CG2	4	0.17
(1,13)	1:562:A:PHE:CZ	1:682:A:HIS:CB	8	0.17
(1,332)	1:714:A:PHE:CB	1:706:A:ARG:CB	5	0.16
(1,134)	1:487:A:HIS:CG	1:487:A:HIS:CD2	6	0.16
(1,134)	1:487:A:HIS:CG	1:487:A:HIS:CD2	8	0.16
(1,265)	1:492:A:PHE:CE1	1:487:A:HIS:CB	3	0.15
(1,175)	1:509:A:PHE:CZ	1:509:A:PHE:CE1	5	0.15
(1,171)	1:682:A:HIS:CG	1:682:A:HIS:CD2	1	0.15
(1,171)	1:682:A:HIS:CG	1:682:A:HIS:CD2	2	0.15
(1,171)	1:682:A:HIS:CG	1:682:A:HIS:CD2	3	0.15
(1,171)	1:682:A:HIS:CG	1:682:A:HIS:CD2	4	0.15
(1,171)	1:682:A:HIS:CG	1:682:A:HIS:CD2	5	0.15
(1,171)	1:682:A:HIS:CG	1:682:A:HIS:CD2	6	0.15
(1,171)	1:682:A:HIS:CG	1:682:A:HIS:CD2	7	0.15
(1,171)	1:682:A:HIS:CG	1:682:A:HIS:CD2	8	0.15
(1,171)	1:682:A:HIS:CG	1:682:A:HIS:CD2	9	0.15
(1,171)	1:682:A:HIS:CG	1:682:A:HIS:CD2	10	0.15
(1,147)	1:603:A:HIS:CG	1:603:A:HIS:CD2	3	0.15
(1,134)	1:487:A:HIS:CG	1:487:A:HIS:CD2	1	0.15
(1,134)	1:487:A:HIS:CG	1:487:A:HIS:CD2	5	0.15
(1,134)	1:487:A:HIS:CG	1:487:A:HIS:CD2	7	0.15
(1,332)	1:714:A:PHE:CB	1:706:A:ARG:CB	6	0.14
(1,248)	1:535:A:PHE:CE1	1:535:A:PHE:CZ	2	0.14
(1,231)	1:543:A:PHE:CE1	1:545:A:ASN:CB	3	0.14
(1,175)	1:509:A:PHE:CZ	1:509:A:PHE:CE1	3	0.14
(1,175)	1:509:A:PHE:CZ	1:509:A:PHE:CE1	6	0.14
(1,175)	1:509:A:PHE:CZ	1:509:A:PHE:CE1	7	0.14
(1,175)	1:509:A:PHE:CZ	1:509:A:PHE:CE1	8	0.14
(1,175)	1:509:A:PHE:CZ	1:509:A:PHE:CE1	10	0.14
(1,151)	1:546:A:ILE:CD1	1:552:A:LYS:CG	3	0.14

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,147)	1:603:A:HIS:CG	1:603:A:HIS:CD2	1	0.14
(1,147)	1:603:A:HIS:CG	1:603:A:HIS:CD2	4	0.14
(1,147)	1:603:A:HIS:CG	1:603:A:HIS:CD2	6	0.14
(1,147)	1:603:A:HIS:CG	1:603:A:HIS:CD2	7	0.14
(1,147)	1:603:A:HIS:CG	1:603:A:HIS:CD2	8	0.14
(1,147)	1:603:A:HIS:CG	1:603:A:HIS:CD2	9	0.14
(1,147)	1:603:A:HIS:CG	1:603:A:HIS:CD2	10	0.14
(1,134)	1:487:A:HIS:CG	1:487:A:HIS:CD2	3	0.14
(1,134)	1:487:A:HIS:CG	1:487:A:HIS:CD2	9	0.14
(1,129)	1:507:A:PHE:CG	1:507:A:PHE:CD1	1	0.14
(1,129)	1:507:A:PHE:CG	1:507:A:PHE:CD1	2	0.14
(1,129)	1:507:A:PHE:CG	1:507:A:PHE:CD1	3	0.14
(1,129)	1:507:A:PHE:CG	1:507:A:PHE:CD1	4	0.14
(1,129)	1:507:A:PHE:CG	1:507:A:PHE:CD1	5	0.14
(1,129)	1:507:A:PHE:CG	1:507:A:PHE:CD1	6	0.14
(1,129)	1:507:A:PHE:CG	1:507:A:PHE:CD1	7	0.14
(1,129)	1:507:A:PHE:CG	1:507:A:PHE:CD1	8	0.14
(1,129)	1:507:A:PHE:CG	1:507:A:PHE:CD1	9	0.14
(1,129)	1:507:A:PHE:CG	1:507:A:PHE:CD1	10	0.14
(1,122)	1:488:A:TYR:CD1	1:488:A:TYR:CE1	8	0.14
(1,122)	1:488:A:TYR:CD1	1:488:A:TYR:CE1	9	0.14
(1,83)	1:562:A:PHE:CE1	1:562:A:PHE:CZ	1	0.14
(1,83)	1:562:A:PHE:CE1	1:562:A:PHE:CZ	2	0.14
(1,83)	1:562:A:PHE:CE1	1:562:A:PHE:CZ	3	0.14
(1,83)	1:562:A:PHE:CE1	1:562:A:PHE:CZ	4	0.14
(1,83)	1:562:A:PHE:CE1	1:562:A:PHE:CZ	5	0.14
(1,83)	1:562:A:PHE:CE1	1:562:A:PHE:CZ	6	0.14
(1,83)	1:562:A:PHE:CE1	1:562:A:PHE:CZ	7	0.14
(1,83)	1:562:A:PHE:CE1	1:562:A:PHE:CZ	8	0.14
(1,83)	1:562:A:PHE:CE1	1:562:A:PHE:CZ	9	0.14
(1,83)	1:562:A:PHE:CE1	1:562:A:PHE:CZ	10	0.14
(1,28)	1:492:A:PHE:CE1	1:492:A:PHE:CZ	1	0.14
(1,28)	1:492:A:PHE:CE1	1:492:A:PHE:CZ	3	0.14
(1,28)	1:492:A:PHE:CE1	1:492:A:PHE:CZ	4	0.14
(1,28)	1:492:A:PHE:CE1	1:492:A:PHE:CZ	5	0.14
(1,28)	1:492:A:PHE:CE1	1:492:A:PHE:CZ	9	0.14
(1,28)	1:492:A:PHE:CE1	1:492:A:PHE:CZ	10	0.14
(1,25)	1:492:A:PHE:CD1	1:492:A:PHE:CE1	1	0.14
(1,25)	1:492:A:PHE:CD1	1:492:A:PHE:CE1	4	0.14
(1,25)	1:492:A:PHE:CD1	1:492:A:PHE:CE1	10	0.14
(1,13)	1:562:A:PHE:CZ	1:682:A:HIS:CB	6	0.14
(1,335)	1:687:A:ILE:CG2	1:682:A:HIS:CB	6	0.13

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,332)	1:714:A:PHE:CB	1:706:A:ARG:CB	3	0.13
(1,332)	1:714:A:PHE:CB	1:706:A:ARG:CB	4	0.13
(1,328)	1:628:A:GLY:CA	1:602:A:VAL:CB	2	0.13
(1,305)	1:687:A:ILE:CG2	1:713:A:ARG:CD	1	0.13
(1,305)	1:687:A:ILE:CG2	1:713:A:ARG:CD	4	0.13
(1,248)	1:535:A:PHE:CE1	1:535:A:PHE:CZ	6	0.13
(1,217)	1:594:A:PHE:CE1	1:593:A:VAL:CA	6	0.13
(1,175)	1:509:A:PHE:CZ	1:509:A:PHE:CE1	1	0.13
(1,175)	1:509:A:PHE:CZ	1:509:A:PHE:CE1	2	0.13
(1,175)	1:509:A:PHE:CZ	1:509:A:PHE:CE1	4	0.13
(1,175)	1:509:A:PHE:CZ	1:509:A:PHE:CE1	9	0.13
(1,165)	1:562:A:PHE:CG	1:562:A:PHE:CD1	1	0.13
(1,165)	1:562:A:PHE:CG	1:562:A:PHE:CD1	2	0.13
(1,165)	1:562:A:PHE:CG	1:562:A:PHE:CD1	3	0.13
(1,165)	1:562:A:PHE:CG	1:562:A:PHE:CD1	4	0.13
(1,165)	1:562:A:PHE:CG	1:562:A:PHE:CD1	5	0.13
(1,165)	1:562:A:PHE:CG	1:562:A:PHE:CD1	6	0.13
(1,165)	1:562:A:PHE:CG	1:562:A:PHE:CD1	7	0.13
(1,165)	1:562:A:PHE:CG	1:562:A:PHE:CD1	8	0.13
(1,165)	1:562:A:PHE:CG	1:562:A:PHE:CD1	9	0.13
(1,165)	1:562:A:PHE:CG	1:562:A:PHE:CD1	10	0.13
(1,164)	1:492:A:PHE:CZ	1:493:A:LYS:CA	9	0.13
(1,147)	1:603:A:HIS:CG	1:603:A:HIS:CD2	2	0.13
(1,147)	1:603:A:HIS:CG	1:603:A:HIS:CD2	5	0.13
(1,134)	1:487:A:HIS:CG	1:487:A:HIS:CD2	2	0.13
(1,134)	1:487:A:HIS:CG	1:487:A:HIS:CD2	10	0.13
(1,122)	1:488:A:TYR:CD1	1:488:A:TYR:CE1	4	0.13
(1,122)	1:488:A:TYR:CD1	1:488:A:TYR:CE1	5	0.13
(1,122)	1:488:A:TYR:CD1	1:488:A:TYR:CE1	6	0.13
(1,101)	1:607:A:PHE:CD1	1:607:A:PHE:CE1	5	0.13
(1,101)	1:607:A:PHE:CD1	1:607:A:PHE:CE1	6	0.13
(1,78)	1:594:A:PHE:CE1	1:594:A:PHE:CZ	1	0.13
(1,78)	1:594:A:PHE:CE1	1:594:A:PHE:CZ	2	0.13
(1,78)	1:594:A:PHE:CE1	1:594:A:PHE:CZ	3	0.13
(1,78)	1:594:A:PHE:CE1	1:594:A:PHE:CZ	4	0.13
(1,78)	1:594:A:PHE:CE1	1:594:A:PHE:CZ	5	0.13
(1,78)	1:594:A:PHE:CE1	1:594:A:PHE:CZ	6	0.13
(1,78)	1:594:A:PHE:CE1	1:594:A:PHE:CZ	7	0.13
(1,78)	1:594:A:PHE:CE1	1:594:A:PHE:CZ	8	0.13
(1,78)	1:594:A:PHE:CE1	1:594:A:PHE:CZ	9	0.13
(1,78)	1:594:A:PHE:CE1	1:594:A:PHE:CZ	10	0.13
(1,66)	1:607:A:PHE:CE1	1:607:A:PHE:CZ	3	0.13

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,66)	1:607:A:PHE:CE1	1:607:A:PHE:CZ	4	0.13
(1,66)	1:607:A:PHE:CE1	1:607:A:PHE:CZ	7	0.13
(1,66)	1:607:A:PHE:CE1	1:607:A:PHE:CZ	8	0.13
(1,30)	1:562:A:PHE:CD1	1:562:A:PHE:CE1	1	0.13
(1,30)	1:562:A:PHE:CD1	1:562:A:PHE:CE1	2	0.13
(1,30)	1:562:A:PHE:CD1	1:562:A:PHE:CE1	3	0.13
(1,30)	1:562:A:PHE:CD1	1:562:A:PHE:CE1	4	0.13
(1,30)	1:562:A:PHE:CD1	1:562:A:PHE:CE1	5	0.13
(1,30)	1:562:A:PHE:CD1	1:562:A:PHE:CE1	6	0.13
(1,30)	1:562:A:PHE:CD1	1:562:A:PHE:CE1	7	0.13
(1,30)	1:562:A:PHE:CD1	1:562:A:PHE:CE1	8	0.13
(1,30)	1:562:A:PHE:CD1	1:562:A:PHE:CE1	9	0.13
(1,28)	1:492:A:PHE:CE1	1:492:A:PHE:CZ	2	0.13
(1,28)	1:492:A:PHE:CE1	1:492:A:PHE:CZ	6	0.13
(1,28)	1:492:A:PHE:CE1	1:492:A:PHE:CZ	7	0.13
(1,28)	1:492:A:PHE:CE1	1:492:A:PHE:CZ	8	0.13
(1,25)	1:492:A:PHE:CD1	1:492:A:PHE:CE1	2	0.13
(1,25)	1:492:A:PHE:CD1	1:492:A:PHE:CE1	3	0.13
(1,25)	1:492:A:PHE:CD1	1:492:A:PHE:CE1	5	0.13
(1,25)	1:492:A:PHE:CD1	1:492:A:PHE:CE1	6	0.13
(1,25)	1:492:A:PHE:CD1	1:492:A:PHE:CE1	7	0.13
(1,25)	1:492:A:PHE:CD1	1:492:A:PHE:CE1	8	0.13
(1,25)	1:492:A:PHE:CD1	1:492:A:PHE:CE1	9	0.13
(1,13)	1:562:A:PHE:CZ	1:682:A:HIS:CB	1	0.13
(1,318)	1:577:A:TRP:CE2	1:594:A:PHE:CE1	10	0.12
(1,306)	1:535:A:PHE:CE1	1:534:A:LYS:CA	4	0.12
(1,305)	1:687:A:ILE:CG2	1:713:A:ARG:CD	2	0.12
(1,305)	1:687:A:ILE:CG2	1:713:A:ARG:CD	3	0.12
(1,282)	1:632:A:ALA:CA	1:616:A:LEU:CB	5	0.12
(1,278)	1:535:A:PHE:CG	1:487:A:HIS:CB	4	0.12
(1,248)	1:535:A:PHE:CE1	1:535:A:PHE:CZ	1	0.12
(1,248)	1:535:A:PHE:CE1	1:535:A:PHE:CZ	3	0.12
(1,248)	1:535:A:PHE:CE1	1:535:A:PHE:CZ	5	0.12
(1,248)	1:535:A:PHE:CE1	1:535:A:PHE:CZ	7	0.12
(1,248)	1:535:A:PHE:CE1	1:535:A:PHE:CZ	10	0.12
(1,122)	1:488:A:TYR:CD1	1:488:A:TYR:CE1	1	0.12
(1,122)	1:488:A:TYR:CD1	1:488:A:TYR:CE1	2	0.12
(1,122)	1:488:A:TYR:CD1	1:488:A:TYR:CE1	3	0.12
(1,122)	1:488:A:TYR:CD1	1:488:A:TYR:CE1	7	0.12
(1,122)	1:488:A:TYR:CD1	1:488:A:TYR:CE1	10	0.12
(1,101)	1:607:A:PHE:CD1	1:607:A:PHE:CE1	1	0.12
(1,101)	1:607:A:PHE:CD1	1:607:A:PHE:CE1	2	0.12

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,101)	1:607:A:PHE:CD1	1:607:A:PHE:CE1	3	0.12
(1,101)	1:607:A:PHE:CD1	1:607:A:PHE:CE1	4	0.12
(1,101)	1:607:A:PHE:CD1	1:607:A:PHE:CE1	7	0.12
(1,101)	1:607:A:PHE:CD1	1:607:A:PHE:CE1	8	0.12
(1,101)	1:607:A:PHE:CD1	1:607:A:PHE:CE1	9	0.12
(1,101)	1:607:A:PHE:CD1	1:607:A:PHE:CE1	10	0.12
(1,66)	1:607:A:PHE:CE1	1:607:A:PHE:CZ	1	0.12
(1,66)	1:607:A:PHE:CE1	1:607:A:PHE:CZ	2	0.12
(1,66)	1:607:A:PHE:CE1	1:607:A:PHE:CZ	5	0.12
(1,66)	1:607:A:PHE:CE1	1:607:A:PHE:CZ	6	0.12
(1,66)	1:607:A:PHE:CE1	1:607:A:PHE:CZ	9	0.12
(1,66)	1:607:A:PHE:CE1	1:607:A:PHE:CZ	10	0.12
(1,30)	1:562:A:PHE:CD1	1:562:A:PHE:CE1	10	0.12
(1,13)	1:562:A:PHE:CZ	1:682:A:HIS:CB	4	0.12
(1,13)	1:562:A:PHE:CZ	1:682:A:HIS:CB	10	0.12
(1,274)	1:544:A:ASP:CA	1:535:A:PHE:CA	1	0.11
(1,248)	1:535:A:PHE:CE1	1:535:A:PHE:CZ	4	0.11
(1,248)	1:535:A:PHE:CE1	1:535:A:PHE:CZ	8	0.11
(1,248)	1:535:A:PHE:CE1	1:535:A:PHE:CZ	9	0.11
(1,240)	1:562:A:PHE:CD1	1:565:A:GLU:CB	3	0.11
(1,239)	1:535:A:PHE:CE1	1:532:A:VAL:CB	8	0.11
(1,151)	1:546:A:ILE:CD1	1:552:A:LYS:CG	6	0.11
(1,115)	1:487:A:HIS:CG	1:486:A:PRO:CG	4	0.11
(1,93)	1:690:A:TYR:CD1	1:690:A:TYR:CG	1	0.11
(1,93)	1:690:A:TYR:CD1	1:690:A:TYR:CG	2	0.11
(1,93)	1:690:A:TYR:CD1	1:690:A:TYR:CG	3	0.11
(1,93)	1:690:A:TYR:CD1	1:690:A:TYR:CG	4	0.11
(1,93)	1:690:A:TYR:CD1	1:690:A:TYR:CG	5	0.11
(1,93)	1:690:A:TYR:CD1	1:690:A:TYR:CG	6	0.11
(1,93)	1:690:A:TYR:CD1	1:690:A:TYR:CG	7	0.11
(1,93)	1:690:A:TYR:CD1	1:690:A:TYR:CG	8	0.11
(1,93)	1:690:A:TYR:CD1	1:690:A:TYR:CG	9	0.11
(1,93)	1:690:A:TYR:CD1	1:690:A:TYR:CG	10	0.11

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

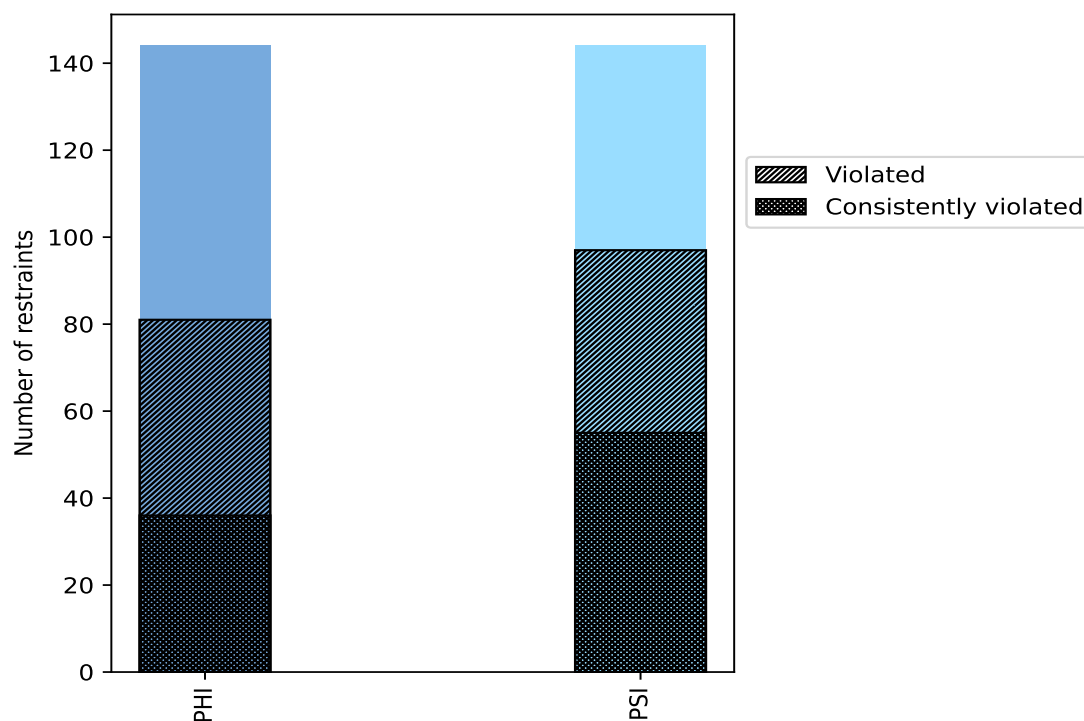
10.1 Summary of dihedral-angle violations [i](#)

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

Angle type	Count	% ¹	Violated ³			Consistently Violated ⁴		
			Count	% ²	% ¹	Count	% ²	% ¹
PHI	144	50.0	81	56.2	28.1	36	25.0	12.5
PSI	144	50.0	97	67.4	33.7	55	38.2	19.1
Total	288	100.0	178	61.8	61.8	91	31.6	31.6

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](#)



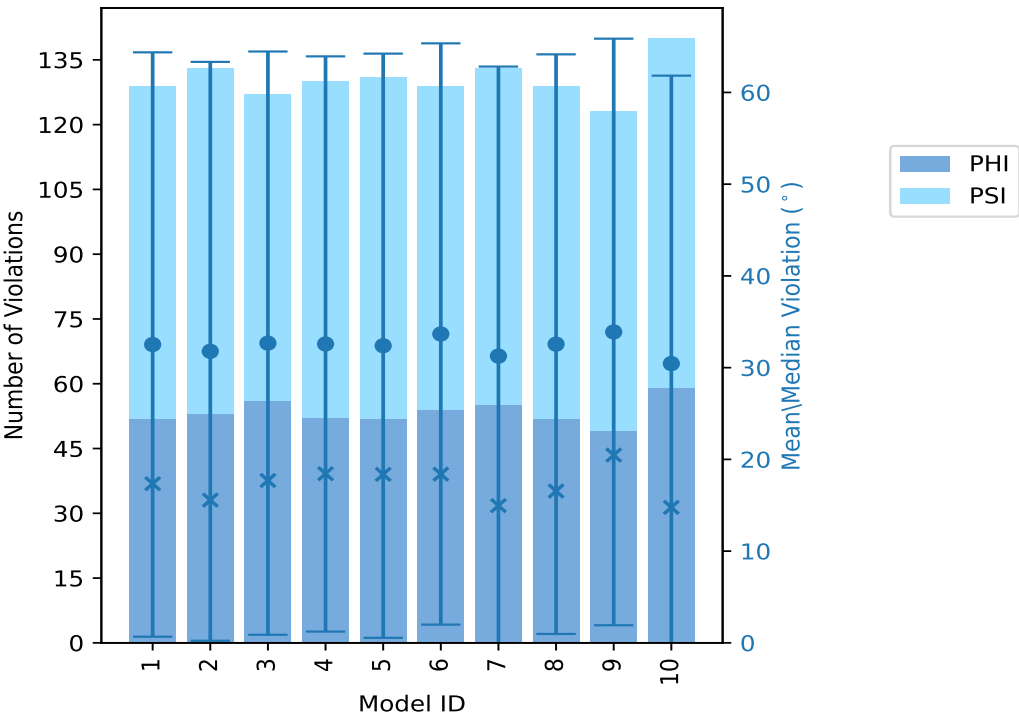
Violated and consistently violated restraints are shown using different hatch patterns in their respective categories

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 (°)
	PHI	PSI	Total				
1	52	77	129	32.52	107.24	31.85	17.35
2	53	80	133	31.78	107.51	31.55	15.56
3	56	71	127	32.67	104.92	31.79	17.7
4	52	78	130	32.58	107.89	31.35	18.44
5	52	79	131	32.39	106.57	31.84	18.37
6	54	75	129	33.67	107.23	31.68	18.39
7	55	78	133	31.26	106.71	31.56	14.96
8	52	77	129	32.56	108.94	31.59	16.55
9	49	74	123	33.89	108.76	31.97	20.47
10	59	81	140	30.44	106.86	31.39	14.77

10.2.1 Bar graph : Dihedral 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

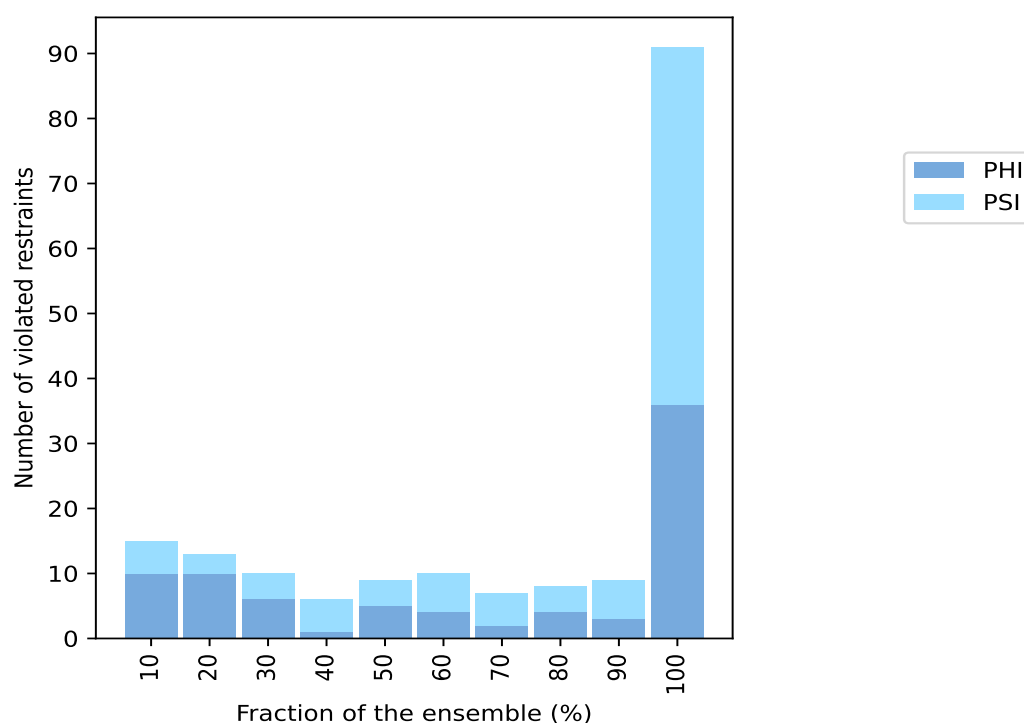
10.3 Dihedral-angle violation statistics for the ensemble [i](#)

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

Number of violated restraints			Fraction of the ensemble	
PHI	PSI	Total	Count ¹	%
10	5	15	1	10.0
10	3	13	2	20.0
6	4	10	3	30.0
1	5	6	4	40.0
5	4	9	5	50.0
4	6	10	6	60.0
2	5	7	7	70.0
4	4	8	8	80.0
3	6	9	9	90.0
36	55	91	10	100.0

¹ Number of models with violations

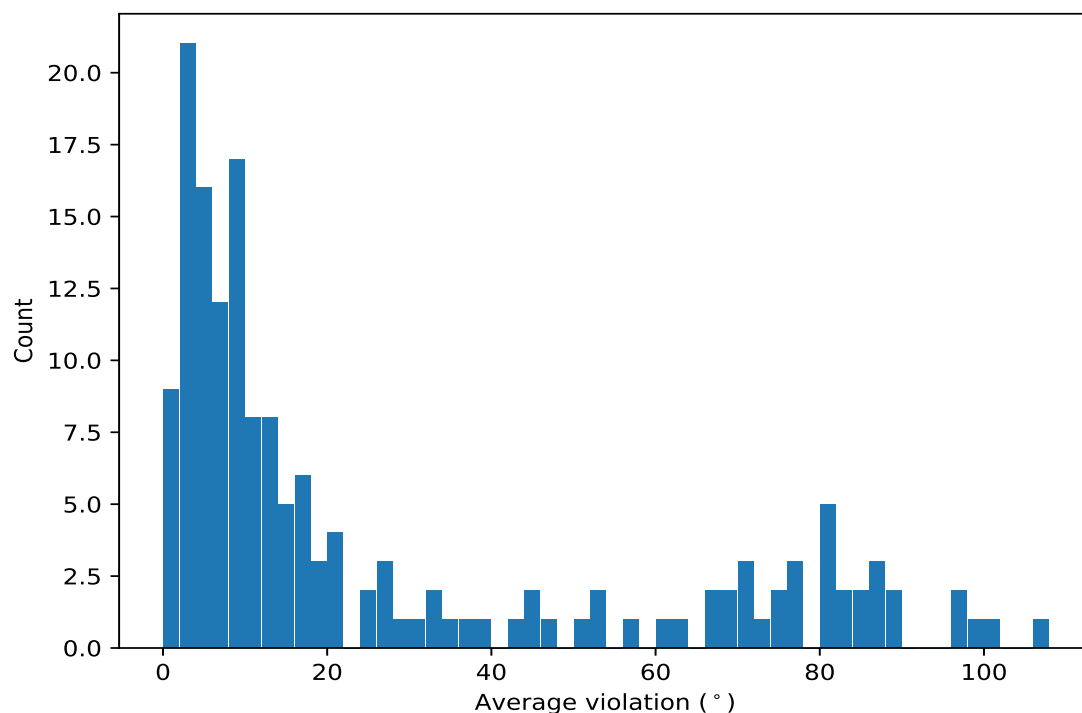
10.3.1 Bar graph : Dihedral-angle Violation statistics for the ensemble [i](#)



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

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

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



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

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

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Models ¹	Mean	SD ²	Median
(1,260)	1:569:A:ARG:N	1:569:A:ARG:CA	1:569:A:ARG:C	1:570:A:GLY:N	10	107.26	1.09	107.24
(1,4)	1:480:A:ILE:N	1:480:A:ILE:CA	1:480:A:ILE:C	1:481:A:LYS:N	10	101.03	2.59	101.06
(1,114)	1:594:A:PHE:N	1:594:A:PHE:CA	1:594:A:PHE:C	1:595:A:LYS:N	10	99.29	5.67	97.85
(1,112)	1:593:A:VAL:N	1:593:A:VAL:CA	1:593:A:VAL:C	1:594:A:PHE:N	10	97.7	4.0	98.22
(1,130)	1:615:A:SER:N	1:615:A:SER:CA	1:615:A:SER:C	1:616:A:LEU:N	10	96.1	2.15	96.84
(1,50)	1:524:A:LEU:N	1:524:A:LEU:CA	1:524:A:LEU:C	1:525:A:ASP:N	10	89.54	3.68	90.68
(1,134)	1:617:A:THR:N	1:617:A:THR:CA	1:617:A:THR:C	1:618:A:GLU:N	10	88.48	1.6	88.3
(1,266)	1:596:A:ALA:N	1:596:A:ALA:CA	1:596:A:ALA:C	1:597:A:ARG:N	10	87.61	4.36	87.78
(1,164)	1:643:A:PHE:N	1:643:A:PHE:CA	1:643:A:PHE:C	1:644:A:ASP:N	10	87.51	1.58	86.98
(1,132)	1:616:A:LEU:N	1:616:A:LEU:CA	1:616:A:LEU:C	1:617:A:THR:N	10	87.22	1.38	86.86
(1,270)	1:622:A:GLY:N	1:622:A:GLY:CA	1:622:A:GLY:C	1:623:A:SER:N	10	84.59	2.63	85.02
(1,82)	1:568:A:LYS:N	1:568:A:LYS:CA	1:568:A:LYS:C	1:569:A:ARG:N	10	84.43	0.59	84.38
(1,272)	1:633:A:THR:N	1:633:A:THR:CA	1:633:A:THR:C	1:634:A:ALA:N	10	83.37	0.61	83.35

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Models ¹	Mean	SD ²	Median
(1,286)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:CA	1:697:A:ALA:C	1:698:A:SER:N	10	82.85	1.66	82.94
(1,243)	1:480:A:ILE:C	1:481:A:LYS:N	1:481:A:LYS:CA	1:481:A:LYS:C	10	81.5	1.87	81.26
(1,190)	1:671:A:GLU:N	1:671:A:GLU:CA	1:671:A:GLU:C	1:672:A:GLU:N	10	80.98	2.97	82.28
(1,186)	1:655:A:SER:N	1:655:A:SER:CA	1:655:A:SER:C	1:656:A:LEU:N	10	80.93	1.94	80.94
(1,201)	1:678:A:GLN:C	1:679:A:GLU:N	1:679:A:GLU:CA	1:679:A:GLU:C	10	80.46	1.82	80.28
(1,278)	1:672:A:GLU:N	1:672:A:GLU:CA	1:672:A:GLU:C	1:673:A:ILE:N	10	80.32	2.56	80.53
(1,276)	1:635:A:LYS:N	1:635:A:LYS:CA	1:635:A:LYS:C	1:636:A:ARG:N	10	77.12	1.69	76.62
(1,166)	1:644:A:ASP:N	1:644:A:ASP:CA	1:644:A:ASP:C	1:645:A:LYS:N	10	76.72	0.55	76.72
(1,120)	1:600:A:THR:N	1:600:A:THR:CA	1:600:A:THR:C	1:601:A:VAL:N	10	76.4	1.24	76.59
(1,280)	1:680:A:LEU:N	1:680:A:LEU:CA	1:680:A:LEU:C	1:681:A:VAL:N	10	75.05	1.84	74.9
(1,122)	1:601:A:VAL:N	1:601:A:VAL:CA	1:601:A:VAL:C	1:602:A:VAL:N	10	74.01	1.89	73.5
(1,52)	1:525:A:ASP:N	1:525:A:ASP:CA	1:525:A:ASP:C	1:526:A:GLU:N	10	73.85	2.72	75.1
(1,204)	1:684:A:ALA:N	1:684:A:ALA:CA	1:684:A:ALA:C	1:685:A:LYS:N	10	71.58	1.91	70.96
(1,216)	1:694:A:GLU:N	1:694:A:GLU:CA	1:694:A:GLU:C	1:695:A:VAL:N	10	71.56	1.49	71.18
(1,26)	1:504:A:VAL:N	1:504:A:VAL:CA	1:504:A:VAL:C	1:505:A:CYS:N	10	70.44	1.53	70.28
(1,72)	1:553:A:VAL:N	1:553:A:VAL:CA	1:553:A:VAL:C	1:554:A:LYS:N	10	69.44	0.82	69.16
(1,78)	1:563:A:ASP:N	1:563:A:ASP:CA	1:563:A:ASP:C	1:564:A:LEU:N	10	69.18	2.1	69.62
(1,110)	1:592:A:VAL:N	1:592:A:VAL:CA	1:592:A:VAL:C	1:593:A:VAL:N	10	67.16	3.96	68.59
(1,84)	1:570:A:GLY:N	1:570:A:GLY:CA	1:570:A:GLY:C	1:571:A:ALA:N	10	66.84	0.66	66.94
(1,222)	1:698:A:SER:N	1:698:A:SER:CA	1:698:A:SER:C	1:699:A:ASP:N	10	63.29	1.66	63.67
(1,212)	1:690:A:TYR:N	1:690:A:TYR:CA	1:690:A:TYR:C	1:691:A:ARG:N	10	60.4	2.07	59.78
(1,117)	1:598:A:PRO:C	1:599:A:ASN:N	1:599:A:ASN:CA	1:599:A:ASN:C	10	56.15	1.67	56.42
(1,83)	1:569:A:ARG:C	1:570:A:GLY:N	1:570:A:GLY:CA	1:570:A:GLY:C	10	53.63	1.92	54.02
(1,118)	1:599:A:ASN:N	1:599:A:ASN:CA	1:599:A:ASN:C	1:600:A:THR:N	10	53.47	1.89	53.12
(1,116)	1:595:A:LYS:N	1:595:A:LYS:CA	1:595:A:LYS:C	1:596:A:ALA:N	10	51.17	10.39	47.95
(1,124)	1:602:A:VAL:N	1:602:A:VAL:CA	1:602:A:VAL:C	1:603:A:HIS:N	10	47.75	2.14	47.84
(1,221)	1:697:A:ALA:C	1:698:A:SER:N	1:698:A:SER:CA	1:698:A:SER:C	10	44.26	5.53	41.84
(1,49)	1:523:A:ARG:C	1:524:A:LEU:N	1:524:A:LEU:CA	1:524:A:LEU:C	10	44.21	2.8	43.62
(1,244)	1:481:A:LYS:N	1:481:A:LYS:CA	1:481:A:LYS:C	1:482:A:ALA:N	10	42.98	2.28	42.52
(1,144)	1:625:A:VAL:N	1:625:A:VAL:CA	1:625:A:VAL:C	1:626:A:GLN:N	10	38.13	0.91	38.03
(1,126)	1:606:A:PRO:N	1:606:A:PRO:CA	1:606:A:PRO:C	1:607:A:PHE:N	10	36.65	2.46	36.8
(1,285)	1:696:A:LYS:C	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:CA	1:697:A:ALA:C	10	34.64	11.07	28.82
(1,9)	1:488:A:TYR:C	1:489:A:GLY:N	1:489:A:GLY:CA	1:489:A:GLY:C	10	33.24	3.76	32.95
(1,248)	1:488:A:TYR:N	1:488:A:TYR:CA	1:488:A:TYR:C	1:489:A:GLY:N	10	32.91	3.08	33.44
(1,215)	1:693:A:VAL:C	1:694:A:GLU:N	1:694:A:GLU:CA	1:694:A:GLU:C	10	31.34	0.7	31.14
(1,28)	1:505:A:CYS:N	1:505:A:CYS:CA	1:505:A:CYS:C	1:506:A:PRO:N	10	28.67	1.2	28.84
(1,145)	1:625:A:VAL:C	1:626:A:GLN:N	1:626:A:GLN:CA	1:626:A:GLN:C	10	26.94	3.49	27.4
(1,5)	1:481:A:LYS:C	1:482:A:ALA:N	1:482:A:ALA:CA	1:482:A:ALA:C	10	26.47	1.85	26.83
(1,205)	1:684:A:ALA:C	1:685:A:LYS:N	1:685:A:LYS:CA	1:685:A:LYS:C	10	26.23	4.52	28.9
(1,268)	1:613:A:ASN:N	1:613:A:ASN:CA	1:613:A:ASN:C	1:614:A:ARG:N	10	25.71	1.65	26.2
(1,75)	1:561:A:PRO:C	1:562:A:PHE:N	1:562:A:PHE:CA	1:562:A:PHE:C	10	24.35	1.95	24.47
(1,200)	1:678:A:GLN:N	1:678:A:GLN:CA	1:678:A:GLN:C	1:679:A:GLU:N	10	21.66	2.98	21.35
(1,151)	1:629:A:PHE:C	1:630:A:GLU:N	1:630:A:GLU:CA	1:630:A:GLU:C	10	21.22	2.43	22.04
(1,27)	1:504:A:VAL:C	1:505:A:CYS:N	1:505:A:CYS:CA	1:505:A:CYS:C	10	21.12	1.13	21.03
(1,3)	1:479:A:VAL:C	1:480:A:ILE:N	1:480:A:ILE:CA	1:480:A:ILE:C	10	19.99	3.75	20.24
(1,131)	1:615:A:SER:C	1:616:A:LEU:N	1:616:A:LEU:CA	1:616:A:LEU:C	10	19.97	3.55	21.16
(1,135)	1:617:A:THR:C	1:618:A:GLU:N	1:618:A:GLU:CA	1:618:A:GLU:C	10	19.69	4.1	19.0
(1,202)	1:679:A:GLU:N	1:679:A:GLU:CA	1:679:A:GLU:C	1:680:A:LEU:N	10	17.59	2.07	17.72
(1,147)	1:626:A:GLN:C	1:627:A:GLU:N	1:627:A:GLU:CA	1:627:A:GLU:C	10	16.94	3.23	16.74
(1,56)	1:527:A:LEU:N	1:527:A:LEU:CA	1:527:A:LEU:C	1:528:A:ARG:N	10	16.8	3.57	16.92
(1,282)	1:682:A:HIS:N	1:682:A:HIS:CA	1:682:A:HIS:C	1:683:A:LYS:N	10	16.1	3.55	14.61

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Models ¹	Mean	SD ²	Median
(1,165)	1:643:A:PHE:C	1:644:A:ASP:N	1:644:A:ASP:CA	1:644:A:ASP:C	10	16.06	1.58	15.14
(1,198)	1:677:A:ARG:N	1:677:A:ARG:CA	1:677:A:ARG:C	1:678:A:GLN:N	10	15.82	2.13	15.26
(1,220)	1:696:A:LYS:N	1:696:A:LYS:CA	1:696:A:LYS:C	1:697:A:ALA:N	10	15.76	13.32	10.26
(1,51)	1:524:A:LEU:C	1:525:A:ASP:N	1:525:A:ASP:CA	1:525:A:ASP:C	10	15.36	4.11	16.8
(1,214)	1:691:A:ARG:N	1:691:A:ARG:CA	1:691:A:ARG:C	1:692:A:ALA:N	10	14.12	6.06	12.43
(1,127)	1:607:A:PHE:C	1:608:A:VAL:N	1:608:A:VAL:CA	1:608:A:VAL:C	10	13.99	3.18	13.66
(1,69)	1:551:A:LYS:C	1:552:A:LYS:N	1:552:A:LYS:CA	1:552:A:LYS:C	10	13.05	1.38	12.93
(1,271)	1:632:A:ALA:C	1:633:A:THR:N	1:633:A:THR:CA	1:633:A:THR:C	10	12.3	1.03	12.09
(1,36)	1:516:A:ARG:N	1:516:A:ARG:CA	1:516:A:ARG:C	1:517:A:GLN:N	10	12.2	3.41	12.2
(1,141)	1:623:A:SER:C	1:624:A:ILE:N	1:624:A:ILE:CA	1:624:A:ILE:C	10	11.66	4.16	12.73
(1,67)	1:539:A:PRO:C	1:540:A:LEU:N	1:540:A:LEU:CA	1:540:A:LEU:C	10	11.51	6.26	12.58
(1,163)	1:642:A:GLU:C	1:643:A:PHE:N	1:643:A:PHE:CA	1:643:A:PHE:C	10	11.27	0.97	11.16
(1,210)	1:689:A:LYS:N	1:689:A:LYS:CA	1:689:A:LYS:C	1:690:A:TYR:N	10	11.13	4.73	13.15
(1,65)	1:538:A:GLN:C	1:539:A:PRO:N	1:539:A:PRO:CA	1:539:A:PRO:C	10	10.96	5.41	9.46
(1,142)	1:624:A:ILE:N	1:624:A:ILE:CA	1:624:A:ILE:C	1:625:A:VAL:N	10	10.18	1.61	10.4
(1,81)	1:567:A:GLU:C	1:568:A:LYS:N	1:568:A:LYS:CA	1:568:A:LYS:C	10	10.02	1.01	9.8
(1,136)	1:618:A:GLU:N	1:618:A:GLU:CA	1:618:A:GLU:C	1:619:A:SER:N	10	9.18	2.52	10.47
(1,261)	1:583:A:GLU:C	1:584:A:GLU:N	1:584:A:GLU:CA	1:584:A:GLU:C	10	8.82	2.73	8.87
(1,281)	1:681:A:VAL:C	1:682:A:HIS:N	1:682:A:HIS:CA	1:682:A:HIS:C	10	8.71	2.13	9.06
(1,64)	1:538:A:GLN:N	1:538:A:GLN:CA	1:538:A:GLN:C	1:539:A:PRO:N	10	8.4	2.63	8.67
(1,225)	1:699:A:ASP:C	1:700:A:VAL:N	1:700:A:VAL:CA	1:700:A:VAL:C	10	8.13	4.84	5.69
(1,203)	1:683:A:LYS:C	1:684:A:ALA:N	1:684:A:ALA:CA	1:684:A:ALA:C	10	7.99	1.58	8.38
(1,213)	1:690:A:TYR:C	1:691:A:ARG:N	1:691:A:ARG:CA	1:691:A:ARG:C	10	7.94	6.59	5.86
(1,208)	1:686:A:PRO:N	1:686:A:PRO:CA	1:686:A:PRO:C	1:687:A:ILE:N	10	6.96	1.74	7.09
(1,162)	1:641:A:GLN:N	1:641:A:GLN:CA	1:641:A:GLN:C	1:642:A:GLU:N	10	6.35	0.94	6.39
(1,197)	1:676:A:LEU:C	1:677:A:ARG:N	1:677:A:ARG:CA	1:677:A:ARG:C	10	5.75	1.85	5.69
(1,153)	1:635:A:LYS:C	1:636:A:ARG:N	1:636:A:ARG:CA	1:636:A:ARG:C	10	4.77	1.18	4.64
(1,149)	1:627:A:GLU:C	1:628:A:GLY:N	1:628:A:GLY:CA	1:628:A:GLY:C	9	21.25	5.24	22.62
(1,150)	1:628:A:GLY:N	1:628:A:GLY:CA	1:628:A:GLY:C	1:629:A:PHE:N	9	16.46	6.89	20.66
(1,14)	1:491:A:PRO:N	1:491:A:PRO:CA	1:491:A:PRO:C	1:492:A:PHE:N	9	9.46	8.47	4.92
(1,16)	1:492:A:PHE:N	1:492:A:PHE:CA	1:492:A:PHE:C	1:493:A:LYS:N	9	9.21	5.78	9.24
(1,254)	1:528:A:ARG:N	1:528:A:ARG:CA	1:528:A:ARG:C	1:529:A:LYS:N	9	8.29	3.5	8.29
(1,253)	1:527:A:LEU:C	1:528:A:ARG:N	1:528:A:ARG:CA	1:528:A:ARG:C	9	7.18	2.77	7.56
(1,256)	1:537:A:ALA:N	1:537:A:ALA:CA	1:537:A:ALA:C	1:538:A:GLN:N	9	6.96	2.8	6.82
(1,10)	1:489:A:GLY:N	1:489:A:GLY:CA	1:489:A:GLY:C	1:490:A:VAL:N	9	2.49	1.01	2.42
(1,231)	1:702:A:LEU:C	1:703:A:THR:N	1:703:A:THR:CA	1:703:A:THR:C	9	2.44	0.6	2.58
(1,199)	1:677:A:ARG:C	1:678:A:GLN:N	1:678:A:GLN:CA	1:678:A:GLN:C	8	8.78	1.14	8.81
(1,8)	1:487:A:HIS:N	1:487:A:HIS:CA	1:487:A:HIS:C	1:488:A:TYR:N	8	8.15	4.06	6.76
(1,37)	1:516:A:ARG:C	1:517:A:GLN:N	1:517:A:GLN:CA	1:517:A:GLN:C	8	6.44	1.48	5.94
(1,218)	1:695:A:VAL:N	1:695:A:VAL:CA	1:695:A:VAL:C	1:696:A:LYS:N	8	4.75	1.17	4.62
(1,86)	1:573:A:LYS:N	1:573:A:LYS:CA	1:573:A:LYS:C	1:574:A:LEU:N	8	3.9	1.37	3.72
(1,30)	1:508:A:SER:N	1:508:A:SER:CA	1:508:A:SER:C	1:509:A:PHE:N	8	3.38	1.15	3.54
(1,109)	1:591:A:MET:C	1:592:A:VAL:N	1:592:A:VAL:CA	1:592:A:VAL:C	8	2.6	1.19	2.39
(1,25)	1:503:A:ASP:C	1:504:A:VAL:N	1:504:A:VAL:CA	1:504:A:VAL:C	8	1.93	0.88	1.74
(1,24)	1:498:A:GLU:N	1:498:A:GLU:CA	1:498:A:GLU:C	1:499:A:GLN:N	7	8.28	3.78	7.31
(1,59)	1:532:A:VAL:C	1:533:A:PRO:N	1:533:A:PRO:CA	1:533:A:PRO:C	7	8.15	3.42	7.38
(1,66)	1:539:A:PRO:N	1:539:A:PRO:CA	1:539:A:PRO:C	1:540:A:LEU:N	7	8.09	6.37	5.76
(1,108)	1:585:A:LEU:N	1:585:A:LEU:CA	1:585:A:LEU:C	1:586:A:LYS:N	7	5.25	4.87	3.86
(1,125)	1:605:A:GLU:C	1:606:A:PRO:N	1:606:A:PRO:CA	1:606:A:PRO:C	7	2.76	1.21	2.06
(1,284)	1:692:A:ALA:N	1:692:A:ALA:CA	1:692:A:ALA:C	1:693:A:VAL:N	7	2.43	0.84	2.69
(1,156)	1:637:A:ALA:N	1:637:A:ALA:CA	1:637:A:ALA:C	1:638:A:LYS:N	7	1.89	0.49	1.71

Continued on next page...

Continued from previous page...

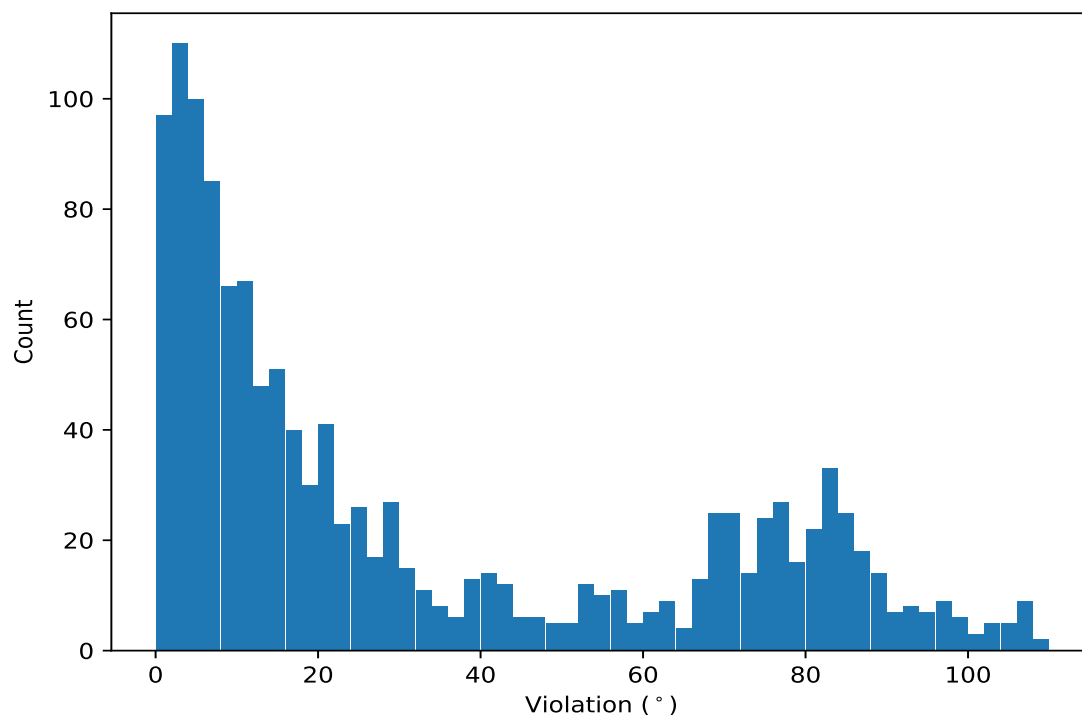
Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Models ¹	Mean	SD ²	Median
(1,62)	1:535:A:PHE:N	1:535:A:PHE:CA	1:535:A:PHE:C	1:536:A:LYS:N	6	8.67	4.24	9.38
(1,257)	1:543:A:PHE:C	1:544:A:ASP:N	1:544:A:ASP:CA	1:544:A:ASP:C	6	8.06	6.33	8.06
(1,137)	1:618:A:GLU:C	1:619:A:SER:N	1:619:A:SER:CA	1:619:A:SER:C	6	6.73	0.46	6.74
(1,250)	1:499:A:GLN:N	1:499:A:GLN:CA	1:499:A:GLN:C	1:500:A:ARG:N	6	6.34	4.13	6.76
(1,138)	1:619:A:SER:N	1:619:A:SER:CA	1:619:A:SER:C	1:620:A:LEU:N	6	5.49	0.84	5.36
(1,19)	1:495:A:LYS:C	1:496:A:LEU:N	1:496:A:LEU:CA	1:496:A:LEU:C	6	4.75	2.65	4.32
(1,140)	1:623:A:SER:N	1:623:A:SER:CA	1:623:A:SER:C	1:624:A:ILE:N	6	4.73	1.48	5.25
(1,255)	1:536:A:LYS:C	1:537:A:ALA:N	1:537:A:ALA:CA	1:537:A:ALA:C	6	4.36	2.76	3.24
(1,232)	1:703:A:THR:N	1:703:A:THR:CA	1:703:A:THR:C	1:704:A:VAL:N	6	2.94	1.37	2.5
(1,74)	1:557:A:THR:N	1:557:A:THR:CA	1:557:A:THR:C	1:558:A:GLN:N	6	2.27	0.55	2.01
(1,22)	1:497:A:VAL:N	1:497:A:VAL:CA	1:497:A:VAL:C	1:498:A:GLU:N	5	12.8	7.09	10.65
(1,15)	1:491:A:PRO:C	1:492:A:PHE:N	1:492:A:PHE:CA	1:492:A:PHE:C	5	11.79	6.04	9.21
(1,265)	1:595:A:LYS:C	1:596:A:ALA:N	1:596:A:ALA:CA	1:596:A:ALA:C	5	8.83	1.85	9.18
(1,20)	1:496:A:LEU:N	1:496:A:LEU:CA	1:496:A:LEU:C	1:497:A:VAL:N	5	4.84	2.31	5.59
(1,100)	1:580:A:GLN:N	1:580:A:GLN:CA	1:580:A:GLN:C	1:581:A:ILE:N	5	4.45	1.56	4.77
(1,95)	1:577:A:TRP:C	1:578:A:GLN:N	1:578:A:GLN:CA	1:578:A:GLN:C	5	2.56	1.04	2.72
(1,228)	1:701:A:PRO:N	1:701:A:PRO:CA	1:701:A:PRO:C	1:702:A:LEU:N	5	2.23	0.99	1.87
(1,209)	1:688:A:ARG:C	1:689:A:LYS:N	1:689:A:LYS:CA	1:689:A:LYS:C	5	2.15	0.69	2.23
(1,133)	1:616:A:LEU:C	1:617:A:THR:N	1:617:A:THR:CA	1:617:A:THR:C	5	1.84	0.93	1.12
(1,146)	1:626:A:GLN:N	1:626:A:GLN:CA	1:626:A:GLN:C	1:627:A:GLU:N	4	12.49	5.81	15.08
(1,192)	1:674:A:SER:N	1:674:A:SER:CA	1:674:A:SER:C	1:675:A:GLN:N	4	4.36	2.6	3.69
(1,60)	1:533:A:PRO:N	1:533:A:PRO:CA	1:533:A:PRO:C	1:534:A:LYS:N	4	3.42	1.72	2.77
(1,12)	1:490:A:VAL:N	1:490:A:VAL:CA	1:490:A:VAL:C	1:491:A:PRO:N	4	2.84	1.28	2.71
(1,169)	1:645:A:LYS:C	1:646:A:CYS:N	1:646:A:CYS:CA	1:646:A:CYS:C	4	1.8	0.28	1.82
(1,170)	1:646:A:CYS:N	1:646:A:CYS:CA	1:646:A:CYS:C	1:647:A:LEU:N	4	1.32	0.24	1.23
(1,217)	1:694:A:GLU:C	1:695:A:VAL:N	1:695:A:VAL:CA	1:695:A:VAL:C	3	14.79	9.65	21.28
(1,23)	1:497:A:VAL:C	1:498:A:GLU:N	1:498:A:GLU:CA	1:498:A:GLU:C	3	12.48	7.68	14.9
(1,249)	1:498:A:GLU:C	1:499:A:GLN:N	1:499:A:GLN:CA	1:499:A:GLN:C	3	7.61	1.79	7.04
(1,104)	1:582:A:GLN:N	1:582:A:GLN:CA	1:582:A:GLN:C	1:583:A:GLU:N	3	6.86	4.31	4.83
(1,43)	1:519:A:GLN:C	1:520:A:LYS:N	1:520:A:LYS:CA	1:520:A:LYS:C	3	6.05	1.84	5.77
(1,58)	1:532:A:VAL:N	1:532:A:VAL:CA	1:532:A:VAL:C	1:533:A:PRO:N	3	5.11	2.02	4.52
(1,17)	1:492:A:PHE:C	1:493:A:LYS:N	1:493:A:LYS:CA	1:493:A:LYS:C	3	4.29	3.63	2.37
(1,61)	1:534:A:LYS:C	1:535:A:PHE:N	1:535:A:PHE:CA	1:535:A:PHE:C	3	3.88	0.7	3.42
(1,48)	1:522:A:LYS:N	1:522:A:LYS:CA	1:522:A:LYS:C	1:523:A:ARG:N	3	2.89	0.9	2.84
(1,184)	1:653:A:GLN:N	1:653:A:GLN:CA	1:653:A:GLN:C	1:654:A:LYS:N	3	2.74	1.8	1.48
(1,41)	1:518:A:LEU:C	1:519:A:GLN:N	1:519:A:GLN:CA	1:519:A:GLN:C	2	12.34	1.58	12.34
(1,226)	1:700:A:VAL:N	1:700:A:VAL:CA	1:700:A:VAL:C	1:701:A:PRO:N	2	9.08	0.48	9.08
(1,258)	1:544:A:ASP:N	1:544:A:ASP:CA	1:544:A:ASP:C	1:545:A:ASN:N	2	4.36	0.53	4.36
(1,191)	1:673:A:ILE:C	1:674:A:SER:N	1:674:A:SER:CA	1:674:A:SER:C	2	4.29	0.02	4.29
(1,224)	1:699:A:ASP:N	1:699:A:ASP:CA	1:699:A:ASP:C	1:700:A:VAL:N	2	4.17	0.65	4.17
(1,39)	1:517:A:GLN:C	1:518:A:LEU:N	1:518:A:LEU:CA	1:518:A:LEU:C	2	3.48	0.56	3.48
(1,185)	1:654:A:LYS:C	1:655:A:SER:N	1:655:A:SER:CA	1:655:A:SER:C	2	3.09	0.51	3.09
(1,223)	1:698:A:SER:C	1:699:A:ASP:N	1:699:A:ASP:CA	1:699:A:ASP:C	2	2.9	0.09	2.9
(1,7)	1:486:A:PRO:C	1:487:A:HIS:N	1:487:A:HIS:CA	1:487:A:HIS:C	2	2.2	0.69	2.2
(1,119)	1:599:A:ASN:C	1:600:A:THR:N	1:600:A:THR:CA	1:600:A:THR:C	2	1.7	0.04	1.7
(1,245)	1:482:A:ALA:C	1:483:A:THR:N	1:483:A:THR:CA	1:483:A:THR:C	2	1.58	0.16	1.58
(1,277)	1:671:A:GLU:C	1:672:A:GLU:N	1:672:A:GLU:CA	1:672:A:GLU:C	2	1.4	0.15	1.4
(1,237)	1:706:A:ARG:C	1:707:A:SER:N	1:707:A:SER:CA	1:707:A:SER:C	2	1.2	0.08	1.2

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 (°)
(1,260)	1:569:A:ARG:N	1:569:A:ARG:CA	1:569:A:ARG:C	1:570:A:GLY:N	8	108.94
(1,260)	1:569:A:ARG:N	1:569:A:ARG:CA	1:569:A:ARG:C	1:570:A:GLY:N	9	108.76
(1,260)	1:569:A:ARG:N	1:569:A:ARG:CA	1:569:A:ARG:C	1:570:A:GLY:N	4	107.89
(1,260)	1:569:A:ARG:N	1:569:A:ARG:CA	1:569:A:ARG:C	1:570:A:GLY:N	2	107.51
(1,260)	1:569:A:ARG:N	1:569:A:ARG:CA	1:569:A:ARG:C	1:570:A:GLY:N	1	107.24
(1,260)	1:569:A:ARG:N	1:569:A:ARG:CA	1:569:A:ARG:C	1:570:A:GLY:N	6	107.23
(1,260)	1:569:A:ARG:N	1:569:A:ARG:CA	1:569:A:ARG:C	1:570:A:GLY:N	10	106.86
(1,260)	1:569:A:ARG:N	1:569:A:ARG:CA	1:569:A:ARG:C	1:570:A:GLY:N	7	106.71
(1,114)	1:594:A:PHE:N	1:594:A:PHE:CA	1:594:A:PHE:C	1:595:A:LYS:N	1	106.66
(1,260)	1:569:A:ARG:N	1:569:A:ARG:CA	1:569:A:ARG:C	1:570:A:GLY:N	5	106.57
(1,114)	1:594:A:PHE:N	1:594:A:PHE:CA	1:594:A:PHE:C	1:595:A:LYS:N	2	106.06
(1,114)	1:594:A:PHE:N	1:594:A:PHE:CA	1:594:A:PHE:C	1:595:A:LYS:N	8	105.32
(1,114)	1:594:A:PHE:N	1:594:A:PHE:CA	1:594:A:PHE:C	1:595:A:LYS:N	4	105.1
(1,260)	1:569:A:ARG:N	1:569:A:ARG:CA	1:569:A:ARG:C	1:570:A:GLY:N	3	104.92

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,4)	1:480:A:ILE:N	1:480:A:ILE:CA	1:480:A:ILE:C	1:481:A:LYS:N	5	104.78
(1,4)	1:480:A:ILE:N	1:480:A:ILE:CA	1:480:A:ILE:C	1:481:A:LYS:N	6	104.19
(1,4)	1:480:A:ILE:N	1:480:A:ILE:CA	1:480:A:ILE:C	1:481:A:LYS:N	9	103.48
(1,112)	1:593:A:VAL:N	1:593:A:VAL:CA	1:593:A:VAL:C	1:594:A:PHE:N	2	103.08
(1,112)	1:593:A:VAL:N	1:593:A:VAL:CA	1:593:A:VAL:C	1:594:A:PHE:N	1	102.89
(1,4)	1:480:A:ILE:N	1:480:A:ILE:CA	1:480:A:ILE:C	1:481:A:LYS:N	3	102.73
(1,4)	1:480:A:ILE:N	1:480:A:ILE:CA	1:480:A:ILE:C	1:481:A:LYS:N	8	102.33
(1,112)	1:593:A:VAL:N	1:593:A:VAL:CA	1:593:A:VAL:C	1:594:A:PHE:N	7	100.59
(1,112)	1:593:A:VAL:N	1:593:A:VAL:CA	1:593:A:VAL:C	1:594:A:PHE:N	4	100.45
(1,114)	1:594:A:PHE:N	1:594:A:PHE:CA	1:594:A:PHE:C	1:595:A:LYS:N	9	100.28
(1,4)	1:480:A:ILE:N	1:480:A:ILE:CA	1:480:A:ILE:C	1:481:A:LYS:N	10	99.8
(1,4)	1:480:A:ILE:N	1:480:A:ILE:CA	1:480:A:ILE:C	1:481:A:LYS:N	2	98.62
(1,112)	1:593:A:VAL:N	1:593:A:VAL:CA	1:593:A:VAL:C	1:594:A:PHE:N	8	98.52
(1,4)	1:480:A:ILE:N	1:480:A:ILE:CA	1:480:A:ILE:C	1:481:A:LYS:N	1	98.41
(1,4)	1:480:A:ILE:N	1:480:A:ILE:CA	1:480:A:ILE:C	1:481:A:LYS:N	4	98.2
(1,130)	1:615:A:SER:N	1:615:A:SER:CA	1:615:A:SER:C	1:616:A:LEU:N	9	98.18
(1,112)	1:593:A:VAL:N	1:593:A:VAL:CA	1:593:A:VAL:C	1:594:A:PHE:N	9	97.91
(1,4)	1:480:A:ILE:N	1:480:A:ILE:CA	1:480:A:ILE:C	1:481:A:LYS:N	7	97.8
(1,130)	1:615:A:SER:N	1:615:A:SER:CA	1:615:A:SER:C	1:616:A:LEU:N	3	97.16
(1,130)	1:615:A:SER:N	1:615:A:SER:CA	1:615:A:SER:C	1:616:A:LEU:N	1	97.06
(1,130)	1:615:A:SER:N	1:615:A:SER:CA	1:615:A:SER:C	1:616:A:LEU:N	2	97.06
(1,130)	1:615:A:SER:N	1:615:A:SER:CA	1:615:A:SER:C	1:616:A:LEU:N	10	96.86
(1,130)	1:615:A:SER:N	1:615:A:SER:CA	1:615:A:SER:C	1:616:A:LEU:N	4	96.83
(1,130)	1:615:A:SER:N	1:615:A:SER:CA	1:615:A:SER:C	1:616:A:LEU:N	6	96.17
(1,130)	1:615:A:SER:N	1:615:A:SER:CA	1:615:A:SER:C	1:616:A:LEU:N	7	96.15
(1,112)	1:593:A:VAL:N	1:593:A:VAL:CA	1:593:A:VAL:C	1:594:A:PHE:N	3	95.85
(1,130)	1:615:A:SER:N	1:615:A:SER:CA	1:615:A:SER:C	1:616:A:LEU:N	8	95.6
(1,114)	1:594:A:PHE:N	1:594:A:PHE:CA	1:594:A:PHE:C	1:595:A:LYS:N	10	95.42
(1,266)	1:596:A:ALA:N	1:596:A:ALA:CA	1:596:A:ALA:C	1:597:A:ARG:N	6	94.99
(1,114)	1:594:A:PHE:N	1:594:A:PHE:CA	1:594:A:PHE:C	1:595:A:LYS:N	7	94.8
(1,50)	1:524:A:LEU:N	1:524:A:LEU:CA	1:524:A:LEU:C	1:525:A:ASP:N	5	94.12
(1,112)	1:593:A:VAL:N	1:593:A:VAL:CA	1:593:A:VAL:C	1:594:A:PHE:N	5	94.09
(1,50)	1:524:A:LEU:N	1:524:A:LEU:CA	1:524:A:LEU:C	1:525:A:ASP:N	7	93.85
(1,114)	1:594:A:PHE:N	1:594:A:PHE:CA	1:594:A:PHE:C	1:595:A:LYS:N	6	93.42
(1,114)	1:594:A:PHE:N	1:594:A:PHE:CA	1:594:A:PHE:C	1:595:A:LYS:N	3	93.39
(1,266)	1:596:A:ALA:N	1:596:A:ALA:CA	1:596:A:ALA:C	1:597:A:ARG:N	10	92.95
(1,134)	1:617:A:THR:N	1:617:A:THR:CA	1:617:A:THR:C	1:618:A:GLU:N	6	92.7
(1,112)	1:593:A:VAL:N	1:593:A:VAL:CA	1:593:A:VAL:C	1:594:A:PHE:N	10	92.53
(1,114)	1:594:A:PHE:N	1:594:A:PHE:CA	1:594:A:PHE:C	1:595:A:LYS:N	5	92.48
(1,50)	1:524:A:LEU:N	1:524:A:LEU:CA	1:524:A:LEU:C	1:525:A:ASP:N	6	92.38
(1,50)	1:524:A:LEU:N	1:524:A:LEU:CA	1:524:A:LEU:C	1:525:A:ASP:N	1	91.36
(1,50)	1:524:A:LEU:N	1:524:A:LEU:CA	1:524:A:LEU:C	1:525:A:ASP:N	2	91.13
(1,112)	1:593:A:VAL:N	1:593:A:VAL:CA	1:593:A:VAL:C	1:594:A:PHE:N	6	91.07
(1,164)	1:643:A:PHE:N	1:643:A:PHE:CA	1:643:A:PHE:C	1:644:A:ASP:N	5	90.79
(1,266)	1:596:A:ALA:N	1:596:A:ALA:CA	1:596:A:ALA:C	1:597:A:ARG:N	7	90.35
(1,50)	1:524:A:LEU:N	1:524:A:LEU:CA	1:524:A:LEU:C	1:525:A:ASP:N	10	90.24
(1,266)	1:596:A:ALA:N	1:596:A:ALA:CA	1:596:A:ALA:C	1:597:A:ARG:N	3	90.06
(1,130)	1:615:A:SER:N	1:615:A:SER:CA	1:615:A:SER:C	1:616:A:LEU:N	5	89.96
(1,266)	1:596:A:ALA:N	1:596:A:ALA:CA	1:596:A:ALA:C	1:597:A:ARG:N	5	89.89
(1,132)	1:616:A:LEU:N	1:616:A:LEU:CA	1:616:A:LEU:C	1:617:A:THR:N	5	89.4
(1,164)	1:643:A:PHE:N	1:643:A:PHE:CA	1:643:A:PHE:C	1:644:A:ASP:N	9	89.25

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,164)	1:643:A:PHE:N	1:643:A:PHE:CA	1:643:A:PHE:C	1:644:A:ASP:N	3	89.24
(1,134)	1:617:A:THR:N	1:617:A:THR:CA	1:617:A:THR:C	1:618:A:GLU:N	3	89.23
(1,134)	1:617:A:THR:N	1:617:A:THR:CA	1:617:A:THR:C	1:618:A:GLU:N	9	89.1
(1,132)	1:616:A:LEU:N	1:616:A:LEU:CA	1:616:A:LEU:C	1:617:A:THR:N	9	88.85
(1,50)	1:524:A:LEU:N	1:524:A:LEU:CA	1:524:A:LEU:C	1:525:A:ASP:N	4	88.76
(1,132)	1:616:A:LEU:N	1:616:A:LEU:CA	1:616:A:LEU:C	1:617:A:THR:N	7	88.41
(1,134)	1:617:A:THR:N	1:617:A:THR:CA	1:617:A:THR:C	1:618:A:GLU:N	1	88.4
(1,132)	1:616:A:LEU:N	1:616:A:LEU:CA	1:616:A:LEU:C	1:617:A:THR:N	3	88.38
(1,134)	1:617:A:THR:N	1:617:A:THR:CA	1:617:A:THR:C	1:618:A:GLU:N	2	88.37
(1,134)	1:617:A:THR:N	1:617:A:THR:CA	1:617:A:THR:C	1:618:A:GLU:N	10	88.23
(1,270)	1:622:A:GLY:N	1:622:A:GLY:CA	1:622:A:GLY:C	1:623:A:SER:N	1	87.76
(1,270)	1:622:A:GLY:N	1:622:A:GLY:CA	1:622:A:GLY:C	1:623:A:SER:N	2	87.74
(1,164)	1:643:A:PHE:N	1:643:A:PHE:CA	1:643:A:PHE:C	1:644:A:ASP:N	10	87.35
(1,134)	1:617:A:THR:N	1:617:A:THR:CA	1:617:A:THR:C	1:618:A:GLU:N	4	87.34
(1,134)	1:617:A:THR:N	1:617:A:THR:CA	1:617:A:THR:C	1:618:A:GLU:N	7	87.3
(1,134)	1:617:A:THR:N	1:617:A:THR:CA	1:617:A:THR:C	1:618:A:GLU:N	5	87.1
(1,134)	1:617:A:THR:N	1:617:A:THR:CA	1:617:A:THR:C	1:618:A:GLU:N	8	87.01
(1,164)	1:643:A:PHE:N	1:643:A:PHE:CA	1:643:A:PHE:C	1:644:A:ASP:N	8	87.0
(1,164)	1:643:A:PHE:N	1:643:A:PHE:CA	1:643:A:PHE:C	1:644:A:ASP:N	7	86.96
(1,132)	1:616:A:LEU:N	1:616:A:LEU:CA	1:616:A:LEU:C	1:617:A:THR:N	10	86.9
(1,132)	1:616:A:LEU:N	1:616:A:LEU:CA	1:616:A:LEU:C	1:617:A:THR:N	4	86.82
(1,132)	1:616:A:LEU:N	1:616:A:LEU:CA	1:616:A:LEU:C	1:617:A:THR:N	8	86.62
(1,270)	1:622:A:GLY:N	1:622:A:GLY:CA	1:622:A:GLY:C	1:623:A:SER:N	4	86.25
(1,164)	1:643:A:PHE:N	1:643:A:PHE:CA	1:643:A:PHE:C	1:644:A:ASP:N	1	86.24
(1,164)	1:643:A:PHE:N	1:643:A:PHE:CA	1:643:A:PHE:C	1:644:A:ASP:N	4	86.2
(1,278)	1:672:A:GLU:N	1:672:A:GLU:CA	1:672:A:GLU:C	1:673:A:ILE:N	9	86.18
(1,164)	1:643:A:PHE:N	1:643:A:PHE:CA	1:643:A:PHE:C	1:644:A:ASP:N	2	86.16
(1,50)	1:524:A:LEU:N	1:524:A:LEU:CA	1:524:A:LEU:C	1:525:A:ASP:N	8	86.16
(1,132)	1:616:A:LEU:N	1:616:A:LEU:CA	1:616:A:LEU:C	1:617:A:THR:N	1	85.99
(1,164)	1:643:A:PHE:N	1:643:A:PHE:CA	1:643:A:PHE:C	1:644:A:ASP:N	6	85.93
(1,132)	1:616:A:LEU:N	1:616:A:LEU:CA	1:616:A:LEU:C	1:617:A:THR:N	2	85.87
(1,270)	1:622:A:GLY:N	1:622:A:GLY:CA	1:622:A:GLY:C	1:623:A:SER:N	8	85.84
(1,82)	1:568:A:LYS:N	1:568:A:LYS:CA	1:568:A:LYS:C	1:569:A:ARG:N	3	85.81
(1,266)	1:596:A:ALA:N	1:596:A:ALA:CA	1:596:A:ALA:C	1:597:A:ARG:N	9	85.66
(1,270)	1:622:A:GLY:N	1:622:A:GLY:CA	1:622:A:GLY:C	1:623:A:SER:N	10	85.41
(1,286)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:CA	1:697:A:ALA:C	1:698:A:SER:N	6	85.34
(1,186)	1:655:A:SER:N	1:655:A:SER:CA	1:655:A:SER:C	1:656:A:LEU:N	3	84.99
(1,132)	1:616:A:LEU:N	1:616:A:LEU:CA	1:616:A:LEU:C	1:617:A:THR:N	6	84.99
(1,243)	1:480:A:ILE:C	1:481:A:LYS:N	1:481:A:LYS:CA	1:481:A:LYS:C	9	84.8
(1,82)	1:568:A:LYS:N	1:568:A:LYS:CA	1:568:A:LYS:C	1:569:A:ARG:N	7	84.8
(1,82)	1:568:A:LYS:N	1:568:A:LYS:CA	1:568:A:LYS:C	1:569:A:ARG:N	2	84.72
(1,270)	1:622:A:GLY:N	1:622:A:GLY:CA	1:622:A:GLY:C	1:623:A:SER:N	6	84.64
(1,82)	1:568:A:LYS:N	1:568:A:LYS:CA	1:568:A:LYS:C	1:569:A:ARG:N	8	84.6
(1,286)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:CA	1:697:A:ALA:C	1:698:A:SER:N	5	84.48
(1,270)	1:622:A:GLY:N	1:622:A:GLY:CA	1:622:A:GLY:C	1:623:A:SER:N	7	84.42
(1,82)	1:568:A:LYS:N	1:568:A:LYS:CA	1:568:A:LYS:C	1:569:A:ARG:N	10	84.4
(1,82)	1:568:A:LYS:N	1:568:A:LYS:CA	1:568:A:LYS:C	1:569:A:ARG:N	9	84.37
(1,50)	1:524:A:LEU:N	1:524:A:LEU:CA	1:524:A:LEU:C	1:525:A:ASP:N	3	84.37
(1,272)	1:633:A:THR:N	1:633:A:THR:CA	1:633:A:THR:C	1:634:A:ALA:N	3	84.28
(1,286)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:CA	1:697:A:ALA:C	1:698:A:SER:N	10	84.26
(1,272)	1:633:A:THR:N	1:633:A:THR:CA	1:633:A:THR:C	1:634:A:ALA:N	6	84.13

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,190)	1:671:A:GLU:N	1:671:A:GLU:CA	1:671:A:GLU:C	1:672:A:GLU:N	7	84.13
(1,272)	1:633:A:THR:N	1:633:A:THR:CA	1:633:A:THR:C	1:634:A:ALA:N	10	84.02
(1,270)	1:622:A:GLY:N	1:622:A:GLY:CA	1:622:A:GLY:C	1:623:A:SER:N	3	83.99
(1,82)	1:568:A:LYS:N	1:568:A:LYS:CA	1:568:A:LYS:C	1:569:A:ARG:N	1	83.99
(1,82)	1:568:A:LYS:N	1:568:A:LYS:CA	1:568:A:LYS:C	1:569:A:ARG:N	6	83.99
(1,82)	1:568:A:LYS:N	1:568:A:LYS:CA	1:568:A:LYS:C	1:569:A:ARG:N	5	83.96
(1,201)	1:678:A:GLN:C	1:679:A:GLU:N	1:679:A:GLU:CA	1:679:A:GLU:C	9	83.9
(1,266)	1:596:A:ALA:N	1:596:A:ALA:CA	1:596:A:ALA:C	1:597:A:ARG:N	2	83.86
(1,243)	1:480:A:ILE:C	1:481:A:LYS:N	1:481:A:LYS:CA	1:481:A:LYS:C	3	83.68
(1,82)	1:568:A:LYS:N	1:568:A:LYS:CA	1:568:A:LYS:C	1:569:A:ARG:N	4	83.62
(1,190)	1:671:A:GLU:N	1:671:A:GLU:CA	1:671:A:GLU:C	1:672:A:GLU:N	2	83.5
(1,272)	1:633:A:THR:N	1:633:A:THR:CA	1:633:A:THR:C	1:634:A:ALA:N	9	83.45
(1,201)	1:678:A:GLN:C	1:679:A:GLU:N	1:679:A:GLU:CA	1:679:A:GLU:C	3	83.45
(1,266)	1:596:A:ALA:N	1:596:A:ALA:CA	1:596:A:ALA:C	1:597:A:ARG:N	1	83.44
(1,286)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:CA	1:697:A:ALA:C	1:698:A:SER:N	3	83.41
(1,272)	1:633:A:THR:N	1:633:A:THR:CA	1:633:A:THR:C	1:634:A:ALA:N	1	83.36
(1,272)	1:633:A:THR:N	1:633:A:THR:CA	1:633:A:THR:C	1:634:A:ALA:N	2	83.34
(1,190)	1:671:A:GLU:N	1:671:A:GLU:CA	1:671:A:GLU:C	1:672:A:GLU:N	8	83.22
(1,272)	1:633:A:THR:N	1:633:A:THR:CA	1:633:A:THR:C	1:634:A:ALA:N	4	83.2
(1,190)	1:671:A:GLU:N	1:671:A:GLU:CA	1:671:A:GLU:C	1:672:A:GLU:N	10	83.19
(1,286)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:CA	1:697:A:ALA:C	1:698:A:SER:N	9	83.09
(1,50)	1:524:A:LEU:N	1:524:A:LEU:CA	1:524:A:LEU:C	1:525:A:ASP:N	9	82.98
(1,272)	1:633:A:THR:N	1:633:A:THR:CA	1:633:A:THR:C	1:634:A:ALA:N	7	82.89
(1,286)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:CA	1:697:A:ALA:C	1:698:A:SER:N	4	82.8
(1,266)	1:596:A:ALA:N	1:596:A:ALA:CA	1:596:A:ALA:C	1:597:A:ARG:N	4	82.79
(1,272)	1:633:A:THR:N	1:633:A:THR:CA	1:633:A:THR:C	1:634:A:ALA:N	5	82.76
(1,286)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:CA	1:697:A:ALA:C	1:698:A:SER:N	2	82.68
(1,243)	1:480:A:ILE:C	1:481:A:LYS:N	1:481:A:LYS:CA	1:481:A:LYS:C	5	82.56
(1,186)	1:655:A:SER:N	1:655:A:SER:CA	1:655:A:SER:C	1:656:A:LEU:N	9	82.47
(1,190)	1:671:A:GLU:N	1:671:A:GLU:CA	1:671:A:GLU:C	1:672:A:GLU:N	1	82.43
(1,243)	1:480:A:ILE:C	1:481:A:LYS:N	1:481:A:LYS:CA	1:481:A:LYS:C	6	82.38
(1,286)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:CA	1:697:A:ALA:C	1:698:A:SER:N	8	82.28
(1,272)	1:633:A:THR:N	1:633:A:THR:CA	1:633:A:THR:C	1:634:A:ALA:N	8	82.23
(1,266)	1:596:A:ALA:N	1:596:A:ALA:CA	1:596:A:ALA:C	1:597:A:ARG:N	8	82.13
(1,190)	1:671:A:GLU:N	1:671:A:GLU:CA	1:671:A:GLU:C	1:672:A:GLU:N	4	82.13
(1,278)	1:672:A:GLU:N	1:672:A:GLU:CA	1:672:A:GLU:C	1:673:A:ILE:N	3	81.52
(1,243)	1:480:A:ILE:C	1:481:A:LYS:N	1:481:A:LYS:CA	1:481:A:LYS:C	7	81.51
(1,186)	1:655:A:SER:N	1:655:A:SER:CA	1:655:A:SER:C	1:656:A:LEU:N	8	81.47
(1,278)	1:672:A:GLU:N	1:672:A:GLU:CA	1:672:A:GLU:C	1:673:A:ILE:N	5	81.46
(1,278)	1:672:A:GLU:N	1:672:A:GLU:CA	1:672:A:GLU:C	1:673:A:ILE:N	8	81.42
(1,278)	1:672:A:GLU:N	1:672:A:GLU:CA	1:672:A:GLU:C	1:673:A:ILE:N	4	81.37
(1,186)	1:655:A:SER:N	1:655:A:SER:CA	1:655:A:SER:C	1:656:A:LEU:N	10	81.18
(1,243)	1:480:A:ILE:C	1:481:A:LYS:N	1:481:A:LYS:CA	1:481:A:LYS:C	10	81.02
(1,186)	1:655:A:SER:N	1:655:A:SER:CA	1:655:A:SER:C	1:656:A:LEU:N	1	80.97
(1,186)	1:655:A:SER:N	1:655:A:SER:CA	1:655:A:SER:C	1:656:A:LEU:N	4	80.92
(1,201)	1:678:A:GLN:C	1:679:A:GLU:N	1:679:A:GLU:CA	1:679:A:GLU:C	6	80.88
(1,186)	1:655:A:SER:N	1:655:A:SER:CA	1:655:A:SER:C	1:656:A:LEU:N	2	80.82
(1,286)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:CA	1:697:A:ALA:C	1:698:A:SER:N	1	80.62
(1,276)	1:635:A:LYS:N	1:635:A:LYS:CA	1:635:A:LYS:C	1:636:A:ARG:N	6	80.56
(1,243)	1:480:A:ILE:C	1:481:A:LYS:N	1:481:A:LYS:CA	1:481:A:LYS:C	2	80.51
(1,243)	1:480:A:ILE:C	1:481:A:LYS:N	1:481:A:LYS:CA	1:481:A:LYS:C	8	80.41

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,201)	1:678:A:GLN:C	1:679:A:GLU:N	1:679:A:GLU:CA	1:679:A:GLU:C	7	80.39
(1,201)	1:678:A:GLN:C	1:679:A:GLU:N	1:679:A:GLU:CA	1:679:A:GLU:C	5	80.33
(1,243)	1:480:A:ILE:C	1:481:A:LYS:N	1:481:A:LYS:CA	1:481:A:LYS:C	1	80.31
(1,270)	1:622:A:GLY:N	1:622:A:GLY:CA	1:622:A:GLY:C	1:623:A:SER:N	9	80.28
(1,201)	1:678:A:GLN:C	1:679:A:GLU:N	1:679:A:GLU:CA	1:679:A:GLU:C	4	80.22
(1,186)	1:655:A:SER:N	1:655:A:SER:CA	1:655:A:SER:C	1:656:A:LEU:N	6	80.16
(1,201)	1:678:A:GLN:C	1:679:A:GLU:N	1:679:A:GLU:CA	1:679:A:GLU:C	10	79.99
(1,190)	1:671:A:GLU:N	1:671:A:GLU:CA	1:671:A:GLU:C	1:672:A:GLU:N	5	79.98
(1,278)	1:672:A:GLU:N	1:672:A:GLU:CA	1:672:A:GLU:C	1:673:A:ILE:N	6	79.69
(1,270)	1:622:A:GLY:N	1:622:A:GLY:CA	1:622:A:GLY:C	1:623:A:SER:N	5	79.55
(1,286)	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:CA	1:697:A:ALA:C	1:698:A:SER:N	7	79.51
(1,122)	1:601:A:VAL:N	1:601:A:VAL:CA	1:601:A:VAL:C	1:602:A:VAL:N	5	79.28
(1,190)	1:671:A:GLU:N	1:671:A:GLU:CA	1:671:A:GLU:C	1:672:A:GLU:N	6	79.27
(1,186)	1:655:A:SER:N	1:655:A:SER:CA	1:655:A:SER:C	1:656:A:LEU:N	7	79.21
(1,276)	1:635:A:LYS:N	1:635:A:LYS:CA	1:635:A:LYS:C	1:636:A:ARG:N	10	79.04
(1,278)	1:672:A:GLU:N	1:672:A:GLU:CA	1:672:A:GLU:C	1:673:A:ILE:N	1	78.95
(1,201)	1:678:A:GLN:C	1:679:A:GLU:N	1:679:A:GLU:CA	1:679:A:GLU:C	1	78.79
(1,201)	1:678:A:GLN:C	1:679:A:GLU:N	1:679:A:GLU:CA	1:679:A:GLU:C	2	78.43
(1,276)	1:635:A:LYS:N	1:635:A:LYS:CA	1:635:A:LYS:C	1:636:A:ARG:N	3	78.39
(1,201)	1:678:A:GLN:C	1:679:A:GLU:N	1:679:A:GLU:CA	1:679:A:GLU:C	8	78.22
(1,278)	1:672:A:GLU:N	1:672:A:GLU:CA	1:672:A:GLU:C	1:673:A:ILE:N	10	78.04
(1,120)	1:600:A:THR:N	1:600:A:THR:CA	1:600:A:THR:C	1:601:A:VAL:N	6	78.03
(1,276)	1:635:A:LYS:N	1:635:A:LYS:CA	1:635:A:LYS:C	1:636:A:ARG:N	5	77.91
(1,243)	1:480:A:ILE:C	1:481:A:LYS:N	1:481:A:LYS:CA	1:481:A:LYS:C	4	77.79
(1,278)	1:672:A:GLU:N	1:672:A:GLU:CA	1:672:A:GLU:C	1:673:A:ILE:N	7	77.78
(1,166)	1:644:A:ASP:N	1:644:A:ASP:CA	1:644:A:ASP:C	1:645:A:LYS:N	5	77.59
(1,120)	1:600:A:THR:N	1:600:A:THR:CA	1:600:A:THR:C	1:601:A:VAL:N	8	77.59
(1,120)	1:600:A:THR:N	1:600:A:THR:CA	1:600:A:THR:C	1:601:A:VAL:N	7	77.54
(1,190)	1:671:A:GLU:N	1:671:A:GLU:CA	1:671:A:GLU:C	1:672:A:GLU:N	9	77.45
(1,280)	1:680:A:LEU:N	1:680:A:LEU:CA	1:680:A:LEU:C	1:681:A:VAL:N	1	77.33
(1,120)	1:600:A:THR:N	1:600:A:THR:CA	1:600:A:THR:C	1:601:A:VAL:N	1	77.26
(1,280)	1:680:A:LEU:N	1:680:A:LEU:CA	1:680:A:LEU:C	1:681:A:VAL:N	7	77.25
(1,166)	1:644:A:ASP:N	1:644:A:ASP:CA	1:644:A:ASP:C	1:645:A:LYS:N	10	77.18
(1,166)	1:644:A:ASP:N	1:644:A:ASP:CA	1:644:A:ASP:C	1:645:A:LYS:N	9	77.16
(1,186)	1:655:A:SER:N	1:655:A:SER:CA	1:655:A:SER:C	1:656:A:LEU:N	5	77.09
(1,166)	1:644:A:ASP:N	1:644:A:ASP:CA	1:644:A:ASP:C	1:645:A:LYS:N	2	77.09
(1,120)	1:600:A:THR:N	1:600:A:THR:CA	1:600:A:THR:C	1:601:A:VAL:N	2	76.94
(1,276)	1:635:A:LYS:N	1:635:A:LYS:CA	1:635:A:LYS:C	1:636:A:ARG:N	9	76.92
(1,280)	1:680:A:LEU:N	1:680:A:LEU:CA	1:680:A:LEU:C	1:681:A:VAL:N	9	76.91
(1,278)	1:672:A:GLU:N	1:672:A:GLU:CA	1:672:A:GLU:C	1:673:A:ILE:N	2	76.83
(1,166)	1:644:A:ASP:N	1:644:A:ASP:CA	1:644:A:ASP:C	1:645:A:LYS:N	1	76.81
(1,166)	1:644:A:ASP:N	1:644:A:ASP:CA	1:644:A:ASP:C	1:645:A:LYS:N	8	76.64
(1,166)	1:644:A:ASP:N	1:644:A:ASP:CA	1:644:A:ASP:C	1:645:A:LYS:N	6	76.51
(1,166)	1:644:A:ASP:N	1:644:A:ASP:CA	1:644:A:ASP:C	1:645:A:LYS:N	4	76.4
(1,276)	1:635:A:LYS:N	1:635:A:LYS:CA	1:635:A:LYS:C	1:636:A:ARG:N	4	76.31
(1,166)	1:644:A:ASP:N	1:644:A:ASP:CA	1:644:A:ASP:C	1:645:A:LYS:N	3	76.29
(1,120)	1:600:A:THR:N	1:600:A:THR:CA	1:600:A:THR:C	1:601:A:VAL:N	10	76.23
(1,52)	1:525:A:ASP:N	1:525:A:ASP:CA	1:525:A:ASP:C	1:526:A:GLU:N	5	76.09
(1,280)	1:680:A:LEU:N	1:680:A:LEU:CA	1:680:A:LEU:C	1:681:A:VAL:N	3	76.02
(1,120)	1:600:A:THR:N	1:600:A:THR:CA	1:600:A:THR:C	1:601:A:VAL:N	4	75.98
(1,276)	1:635:A:LYS:N	1:635:A:LYS:CA	1:635:A:LYS:C	1:636:A:ARG:N	8	75.65

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,276)	1:635:A:LYS:N	1:635:A:LYS:CA	1:635:A:LYS:C	1:636:A:ARG:N	1	75.61
(1,166)	1:644:A:ASP:N	1:644:A:ASP:CA	1:644:A:ASP:C	1:645:A:LYS:N	7	75.55
(1,52)	1:525:A:ASP:N	1:525:A:ASP:CA	1:525:A:ASP:C	1:526:A:GLU:N	6	75.54
(1,120)	1:600:A:THR:N	1:600:A:THR:CA	1:600:A:THR:C	1:601:A:VAL:N	9	75.49
(1,276)	1:635:A:LYS:N	1:635:A:LYS:CA	1:635:A:LYS:C	1:636:A:ARG:N	7	75.43
(1,276)	1:635:A:LYS:N	1:635:A:LYS:CA	1:635:A:LYS:C	1:636:A:ARG:N	2	75.42
(1,52)	1:525:A:ASP:N	1:525:A:ASP:CA	1:525:A:ASP:C	1:526:A:GLU:N	2	75.42
(1,52)	1:525:A:ASP:N	1:525:A:ASP:CA	1:525:A:ASP:C	1:526:A:GLU:N	4	75.15
(1,52)	1:525:A:ASP:N	1:525:A:ASP:CA	1:525:A:ASP:C	1:526:A:GLU:N	10	75.15
(1,204)	1:684:A:ALA:N	1:684:A:ALA:CA	1:684:A:ALA:C	1:685:A:LYS:N	6	75.1
(1,122)	1:601:A:VAL:N	1:601:A:VAL:CA	1:601:A:VAL:C	1:602:A:VAL:N	9	75.09
(1,52)	1:525:A:ASP:N	1:525:A:ASP:CA	1:525:A:ASP:C	1:526:A:GLU:N	8	75.05
(1,120)	1:600:A:THR:N	1:600:A:THR:CA	1:600:A:THR:C	1:601:A:VAL:N	3	74.97
(1,280)	1:680:A:LEU:N	1:680:A:LEU:CA	1:680:A:LEU:C	1:681:A:VAL:N	6	74.91
(1,280)	1:680:A:LEU:N	1:680:A:LEU:CA	1:680:A:LEU:C	1:681:A:VAL:N	4	74.88
(1,280)	1:680:A:LEU:N	1:680:A:LEU:CA	1:680:A:LEU:C	1:681:A:VAL:N	5	74.84
(1,52)	1:525:A:ASP:N	1:525:A:ASP:CA	1:525:A:ASP:C	1:526:A:GLU:N	1	74.83
(1,204)	1:684:A:ALA:N	1:684:A:ALA:CA	1:684:A:ALA:C	1:685:A:LYS:N	5	74.71
(1,190)	1:671:A:GLU:N	1:671:A:GLU:CA	1:671:A:GLU:C	1:672:A:GLU:N	3	74.5
(1,216)	1:694:A:GLU:N	1:694:A:GLU:CA	1:694:A:GLU:C	1:695:A:VAL:N	6	74.31
(1,26)	1:504:A:VAL:N	1:504:A:VAL:CA	1:504:A:VAL:C	1:505:A:CYS:N	10	74.17
(1,280)	1:680:A:LEU:N	1:680:A:LEU:CA	1:680:A:LEU:C	1:681:A:VAL:N	10	74.07
(1,122)	1:601:A:VAL:N	1:601:A:VAL:CA	1:601:A:VAL:C	1:602:A:VAL:N	4	73.99
(1,120)	1:600:A:THR:N	1:600:A:THR:CA	1:600:A:THR:C	1:601:A:VAL:N	5	73.99
(1,122)	1:601:A:VAL:N	1:601:A:VAL:CA	1:601:A:VAL:C	1:602:A:VAL:N	8	73.68
(1,122)	1:601:A:VAL:N	1:601:A:VAL:CA	1:601:A:VAL:C	1:602:A:VAL:N	10	73.61
(1,216)	1:694:A:GLU:N	1:694:A:GLU:CA	1:694:A:GLU:C	1:695:A:VAL:N	5	73.54
(1,52)	1:525:A:ASP:N	1:525:A:ASP:CA	1:525:A:ASP:C	1:526:A:GLU:N	9	73.52
(1,122)	1:601:A:VAL:N	1:601:A:VAL:CA	1:601:A:VAL:C	1:602:A:VAL:N	2	73.4
(1,204)	1:684:A:ALA:N	1:684:A:ALA:CA	1:684:A:ALA:C	1:685:A:LYS:N	3	72.98
(1,280)	1:680:A:LEU:N	1:680:A:LEU:CA	1:680:A:LEU:C	1:681:A:VAL:N	2	72.95
(1,122)	1:601:A:VAL:N	1:601:A:VAL:CA	1:601:A:VAL:C	1:602:A:VAL:N	1	72.93
(1,122)	1:601:A:VAL:N	1:601:A:VAL:CA	1:601:A:VAL:C	1:602:A:VAL:N	3	72.84
(1,122)	1:601:A:VAL:N	1:601:A:VAL:CA	1:601:A:VAL:C	1:602:A:VAL:N	6	72.83
(1,216)	1:694:A:GLU:N	1:694:A:GLU:CA	1:694:A:GLU:C	1:695:A:VAL:N	7	72.66
(1,122)	1:601:A:VAL:N	1:601:A:VAL:CA	1:601:A:VAL:C	1:602:A:VAL:N	7	72.49
(1,78)	1:563:A:ASP:N	1:563:A:ASP:CA	1:563:A:ASP:C	1:564:A:LEU:N	4	71.91
(1,216)	1:694:A:GLU:N	1:694:A:GLU:CA	1:694:A:GLU:C	1:695:A:VAL:N	2	71.81
(1,26)	1:504:A:VAL:N	1:504:A:VAL:CA	1:504:A:VAL:C	1:505:A:CYS:N	2	71.46
(1,204)	1:684:A:ALA:N	1:684:A:ALA:CA	1:684:A:ALA:C	1:685:A:LYS:N	9	71.4
(1,204)	1:684:A:ALA:N	1:684:A:ALA:CA	1:684:A:ALA:C	1:685:A:LYS:N	1	71.36
(1,280)	1:680:A:LEU:N	1:680:A:LEU:CA	1:680:A:LEU:C	1:681:A:VAL:N	8	71.33
(1,110)	1:592:A:VAL:N	1:592:A:VAL:CA	1:592:A:VAL:C	1:593:A:VAL:N	2	71.32
(1,216)	1:694:A:GLU:N	1:694:A:GLU:CA	1:694:A:GLU:C	1:695:A:VAL:N	8	71.23
(1,72)	1:553:A:VAL:N	1:553:A:VAL:CA	1:553:A:VAL:C	1:554:A:LYS:N	8	71.18
(1,216)	1:694:A:GLU:N	1:694:A:GLU:CA	1:694:A:GLU:C	1:695:A:VAL:N	1	71.13
(1,26)	1:504:A:VAL:N	1:504:A:VAL:CA	1:504:A:VAL:C	1:505:A:CYS:N	8	71.05
(1,52)	1:525:A:ASP:N	1:525:A:ASP:CA	1:525:A:ASP:C	1:526:A:GLU:N	3	70.98
(1,216)	1:694:A:GLU:N	1:694:A:GLU:CA	1:694:A:GLU:C	1:695:A:VAL:N	9	70.89
(1,72)	1:553:A:VAL:N	1:553:A:VAL:CA	1:553:A:VAL:C	1:554:A:LYS:N	4	70.75
(1,26)	1:504:A:VAL:N	1:504:A:VAL:CA	1:504:A:VAL:C	1:505:A:CYS:N	7	70.68

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,78)	1:563:A:ASP:N	1:563:A:ASP:CA	1:563:A:ASP:C	1:564:A:LEU:N	5	70.66
(1,110)	1:592:A:VAL:N	1:592:A:VAL:CA	1:592:A:VAL:C	1:593:A:VAL:N	3	70.63
(1,216)	1:694:A:GLU:N	1:694:A:GLU:CA	1:694:A:GLU:C	1:695:A:VAL:N	4	70.58
(1,204)	1:684:A:ALA:N	1:684:A:ALA:CA	1:684:A:ALA:C	1:685:A:LYS:N	8	70.55
(1,26)	1:504:A:VAL:N	1:504:A:VAL:CA	1:504:A:VAL:C	1:505:A:CYS:N	1	70.54
(1,110)	1:592:A:VAL:N	1:592:A:VAL:CA	1:592:A:VAL:C	1:593:A:VAL:N	1	70.46
(1,78)	1:563:A:ASP:N	1:563:A:ASP:CA	1:563:A:ASP:C	1:564:A:LEU:N	8	70.45
(1,216)	1:694:A:GLU:N	1:694:A:GLU:CA	1:694:A:GLU:C	1:695:A:VAL:N	3	70.41
(1,204)	1:684:A:ALA:N	1:684:A:ALA:CA	1:684:A:ALA:C	1:685:A:LYS:N	10	70.37
(1,26)	1:504:A:VAL:N	1:504:A:VAL:CA	1:504:A:VAL:C	1:505:A:CYS:N	6	70.02
(1,116)	1:595:A:LYS:N	1:595:A:LYS:CA	1:595:A:LYS:C	1:596:A:ALA:N	6	69.89
(1,78)	1:563:A:ASP:N	1:563:A:ASP:CA	1:563:A:ASP:C	1:564:A:LEU:N	10	69.89
(1,204)	1:684:A:ALA:N	1:684:A:ALA:CA	1:684:A:ALA:C	1:685:A:LYS:N	2	69.88
(1,110)	1:592:A:VAL:N	1:592:A:VAL:CA	1:592:A:VAL:C	1:593:A:VAL:N	9	69.87
(1,204)	1:684:A:ALA:N	1:684:A:ALA:CA	1:684:A:ALA:C	1:685:A:LYS:N	7	69.83
(1,26)	1:504:A:VAL:N	1:504:A:VAL:CA	1:504:A:VAL:C	1:505:A:CYS:N	5	69.7
(1,78)	1:563:A:ASP:N	1:563:A:ASP:CA	1:563:A:ASP:C	1:564:A:LEU:N	6	69.69
(1,204)	1:684:A:ALA:N	1:684:A:ALA:CA	1:684:A:ALA:C	1:685:A:LYS:N	4	69.66
(1,72)	1:553:A:VAL:N	1:553:A:VAL:CA	1:553:A:VAL:C	1:554:A:LYS:N	10	69.6
(1,78)	1:563:A:ASP:N	1:563:A:ASP:CA	1:563:A:ASP:C	1:564:A:LEU:N	7	69.55
(1,78)	1:563:A:ASP:N	1:563:A:ASP:CA	1:563:A:ASP:C	1:564:A:LEU:N	2	69.44
(1,72)	1:553:A:VAL:N	1:553:A:VAL:CA	1:553:A:VAL:C	1:554:A:LYS:N	2	69.36
(1,72)	1:553:A:VAL:N	1:553:A:VAL:CA	1:553:A:VAL:C	1:554:A:LYS:N	9	69.34
(1,26)	1:504:A:VAL:N	1:504:A:VAL:CA	1:504:A:VAL:C	1:505:A:CYS:N	3	69.25
(1,216)	1:694:A:GLU:N	1:694:A:GLU:CA	1:694:A:GLU:C	1:695:A:VAL:N	10	69.04
(1,72)	1:553:A:VAL:N	1:553:A:VAL:CA	1:553:A:VAL:C	1:554:A:LYS:N	7	68.99
(1,26)	1:504:A:VAL:N	1:504:A:VAL:CA	1:504:A:VAL:C	1:505:A:CYS:N	9	68.99
(1,72)	1:553:A:VAL:N	1:553:A:VAL:CA	1:553:A:VAL:C	1:554:A:LYS:N	5	68.96
(1,110)	1:592:A:VAL:N	1:592:A:VAL:CA	1:592:A:VAL:C	1:593:A:VAL:N	7	68.87
(1,72)	1:553:A:VAL:N	1:553:A:VAL:CA	1:553:A:VAL:C	1:554:A:LYS:N	6	68.84
(1,72)	1:553:A:VAL:N	1:553:A:VAL:CA	1:553:A:VAL:C	1:554:A:LYS:N	1	68.73
(1,78)	1:563:A:ASP:N	1:563:A:ASP:CA	1:563:A:ASP:C	1:564:A:LEU:N	1	68.72
(1,72)	1:553:A:VAL:N	1:553:A:VAL:CA	1:553:A:VAL:C	1:554:A:LYS:N	3	68.63
(1,26)	1:504:A:VAL:N	1:504:A:VAL:CA	1:504:A:VAL:C	1:505:A:CYS:N	4	68.52
(1,110)	1:592:A:VAL:N	1:592:A:VAL:CA	1:592:A:VAL:C	1:593:A:VAL:N	4	68.31
(1,84)	1:570:A:GLY:N	1:570:A:GLY:CA	1:570:A:GLY:C	1:571:A:ALA:N	8	67.85
(1,78)	1:563:A:ASP:N	1:563:A:ASP:CA	1:563:A:ASP:C	1:564:A:LEU:N	9	67.83
(1,110)	1:592:A:VAL:N	1:592:A:VAL:CA	1:592:A:VAL:C	1:593:A:VAL:N	8	67.7
(1,84)	1:570:A:GLY:N	1:570:A:GLY:CA	1:570:A:GLY:C	1:571:A:ALA:N	4	67.44
(1,84)	1:570:A:GLY:N	1:570:A:GLY:CA	1:570:A:GLY:C	1:571:A:ALA:N	5	67.33
(1,84)	1:570:A:GLY:N	1:570:A:GLY:CA	1:570:A:GLY:C	1:571:A:ALA:N	7	67.19
(1,84)	1:570:A:GLY:N	1:570:A:GLY:CA	1:570:A:GLY:C	1:571:A:ALA:N	10	67.08
(1,84)	1:570:A:GLY:N	1:570:A:GLY:CA	1:570:A:GLY:C	1:571:A:ALA:N	6	66.8
(1,52)	1:525:A:ASP:N	1:525:A:ASP:CA	1:525:A:ASP:C	1:526:A:GLU:N	7	66.8
(1,84)	1:570:A:GLY:N	1:570:A:GLY:CA	1:570:A:GLY:C	1:571:A:ALA:N	9	66.79
(1,84)	1:570:A:GLY:N	1:570:A:GLY:CA	1:570:A:GLY:C	1:571:A:ALA:N	1	66.26
(1,84)	1:570:A:GLY:N	1:570:A:GLY:CA	1:570:A:GLY:C	1:571:A:ALA:N	2	66.1
(1,222)	1:698:A:SER:N	1:698:A:SER:CA	1:698:A:SER:C	1:699:A:ASP:N	3	66.0
(1,116)	1:595:A:LYS:N	1:595:A:LYS:CA	1:595:A:LYS:C	1:596:A:ALA:N	10	65.56
(1,84)	1:570:A:GLY:N	1:570:A:GLY:CA	1:570:A:GLY:C	1:571:A:ALA:N	3	65.53
(1,222)	1:698:A:SER:N	1:698:A:SER:CA	1:698:A:SER:C	1:699:A:ASP:N	9	65.12

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,212)	1:690:A:TYR:N	1:690:A:TYR:CA	1:690:A:TYR:C	1:691:A:ARG:N	6	64.02
(1,222)	1:698:A:SER:N	1:698:A:SER:CA	1:698:A:SER:C	1:699:A:ASP:N	5	63.96
(1,222)	1:698:A:SER:N	1:698:A:SER:CA	1:698:A:SER:C	1:699:A:ASP:N	7	63.89
(1,222)	1:698:A:SER:N	1:698:A:SER:CA	1:698:A:SER:C	1:699:A:ASP:N	4	63.87
(1,212)	1:690:A:TYR:N	1:690:A:TYR:CA	1:690:A:TYR:C	1:691:A:ARG:N	5	63.8
(1,110)	1:592:A:VAL:N	1:592:A:VAL:CA	1:592:A:VAL:C	1:593:A:VAL:N	10	63.75
(1,78)	1:563:A:ASP:N	1:563:A:ASP:CA	1:563:A:ASP:C	1:564:A:LEU:N	3	63.71
(1,222)	1:698:A:SER:N	1:698:A:SER:CA	1:698:A:SER:C	1:699:A:ASP:N	6	63.47
(1,222)	1:698:A:SER:N	1:698:A:SER:CA	1:698:A:SER:C	1:699:A:ASP:N	1	62.82
(1,222)	1:698:A:SER:N	1:698:A:SER:CA	1:698:A:SER:C	1:699:A:ASP:N	8	62.67
(1,116)	1:595:A:LYS:N	1:595:A:LYS:CA	1:595:A:LYS:C	1:596:A:ALA:N	5	61.7
(1,212)	1:690:A:TYR:N	1:690:A:TYR:CA	1:690:A:TYR:C	1:691:A:ARG:N	7	61.57
(1,222)	1:698:A:SER:N	1:698:A:SER:CA	1:698:A:SER:C	1:699:A:ASP:N	2	60.88
(1,110)	1:592:A:VAL:N	1:592:A:VAL:CA	1:592:A:VAL:C	1:593:A:VAL:N	5	60.54
(1,212)	1:690:A:TYR:N	1:690:A:TYR:CA	1:690:A:TYR:C	1:691:A:ARG:N	1	60.52
(1,222)	1:698:A:SER:N	1:698:A:SER:CA	1:698:A:SER:C	1:699:A:ASP:N	10	60.23
(1,110)	1:592:A:VAL:N	1:592:A:VAL:CA	1:592:A:VAL:C	1:593:A:VAL:N	6	60.12
(1,212)	1:690:A:TYR:N	1:690:A:TYR:CA	1:690:A:TYR:C	1:691:A:ARG:N	2	59.96
(1,212)	1:690:A:TYR:N	1:690:A:TYR:CA	1:690:A:TYR:C	1:691:A:ARG:N	8	59.61
(1,212)	1:690:A:TYR:N	1:690:A:TYR:CA	1:690:A:TYR:C	1:691:A:ARG:N	4	59.37
(1,212)	1:690:A:TYR:N	1:690:A:TYR:CA	1:690:A:TYR:C	1:691:A:ARG:N	10	59.26
(1,212)	1:690:A:TYR:N	1:690:A:TYR:CA	1:690:A:TYR:C	1:691:A:ARG:N	9	58.87
(1,117)	1:598:A:PRO:C	1:599:A:ASN:N	1:599:A:ASN:CA	1:599:A:ASN:C	4	57.91
(1,117)	1:598:A:PRO:C	1:599:A:ASN:N	1:599:A:ASN:CA	1:599:A:ASN:C	7	57.89
(1,117)	1:598:A:PRO:C	1:599:A:ASN:N	1:599:A:ASN:CA	1:599:A:ASN:C	1	57.65
(1,118)	1:599:A:ASN:N	1:599:A:ASN:CA	1:599:A:ASN:C	1:600:A:THR:N	6	57.54
(1,117)	1:598:A:PRO:C	1:599:A:ASN:N	1:599:A:ASN:CA	1:599:A:ASN:C	2	57.29
(1,212)	1:690:A:TYR:N	1:690:A:TYR:CA	1:690:A:TYR:C	1:691:A:ARG:N	3	57.06
(1,285)	1:696:A:LYS:C	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:CA	1:697:A:ALA:C	5	56.92
(1,117)	1:598:A:PRO:C	1:599:A:ASN:N	1:599:A:ASN:CA	1:599:A:ASN:C	9	56.6
(1,285)	1:696:A:LYS:C	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:CA	1:697:A:ALA:C	6	56.53
(1,117)	1:598:A:PRO:C	1:599:A:ASN:N	1:599:A:ASN:CA	1:599:A:ASN:C	3	56.24
(1,117)	1:598:A:PRO:C	1:599:A:ASN:N	1:599:A:ASN:CA	1:599:A:ASN:C	5	56.07
(1,118)	1:599:A:ASN:N	1:599:A:ASN:CA	1:599:A:ASN:C	1:600:A:THR:N	10	55.95
(1,83)	1:569:A:ARG:C	1:570:A:GLY:N	1:570:A:GLY:CA	1:570:A:GLY:C	5	55.48
(1,221)	1:697:A:ALA:C	1:698:A:SER:N	1:698:A:SER:CA	1:698:A:SER:C	6	55.4
(1,117)	1:598:A:PRO:C	1:599:A:ASN:N	1:599:A:ASN:CA	1:599:A:ASN:C	8	55.16
(1,83)	1:569:A:ARG:C	1:570:A:GLY:N	1:570:A:GLY:CA	1:570:A:GLY:C	9	55.05
(1,83)	1:569:A:ARG:C	1:570:A:GLY:N	1:570:A:GLY:CA	1:570:A:GLY:C	6	55.03
(1,221)	1:697:A:ALA:C	1:698:A:SER:N	1:698:A:SER:CA	1:698:A:SER:C	5	54.66
(1,83)	1:569:A:ARG:C	1:570:A:GLY:N	1:570:A:GLY:CA	1:570:A:GLY:C	1	54.53
(1,83)	1:569:A:ARG:C	1:570:A:GLY:N	1:570:A:GLY:CA	1:570:A:GLY:C	8	54.3
(1,117)	1:598:A:PRO:C	1:599:A:ASN:N	1:599:A:ASN:CA	1:599:A:ASN:C	10	54.15
(1,118)	1:599:A:ASN:N	1:599:A:ASN:CA	1:599:A:ASN:C	1:600:A:THR:N	7	53.99
(1,83)	1:569:A:ARG:C	1:570:A:GLY:N	1:570:A:GLY:CA	1:570:A:GLY:C	4	53.75
(1,83)	1:569:A:ARG:C	1:570:A:GLY:N	1:570:A:GLY:CA	1:570:A:GLY:C	2	53.67
(1,83)	1:569:A:ARG:C	1:570:A:GLY:N	1:570:A:GLY:CA	1:570:A:GLY:C	10	53.45
(1,118)	1:599:A:ASN:N	1:599:A:ASN:CA	1:599:A:ASN:C	1:600:A:THR:N	3	53.17
(1,118)	1:599:A:ASN:N	1:599:A:ASN:CA	1:599:A:ASN:C	1:600:A:THR:N	9	53.15
(1,118)	1:599:A:ASN:N	1:599:A:ASN:CA	1:599:A:ASN:C	1:600:A:THR:N	1	53.1
(1,118)	1:599:A:ASN:N	1:599:A:ASN:CA	1:599:A:ASN:C	1:600:A:THR:N	2	53.09

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,83)	1:569:A:ARG:C	1:570:A:GLY:N	1:570:A:GLY:CA	1:570:A:GLY:C	7	52.64
(1,117)	1:598:A:PRO:C	1:599:A:ASN:N	1:599:A:ASN:CA	1:599:A:ASN:C	6	52.56
(1,116)	1:595:A:LYS:N	1:595:A:LYS:CA	1:595:A:LYS:C	1:596:A:ALA:N	7	52.44
(1,118)	1:599:A:ASN:N	1:599:A:ASN:CA	1:599:A:ASN:C	1:600:A:THR:N	4	52.42
(1,118)	1:599:A:ASN:N	1:599:A:ASN:CA	1:599:A:ASN:C	1:600:A:THR:N	8	51.45
(1,124)	1:602:A:VAL:N	1:602:A:VAL:CA	1:602:A:VAL:C	1:603:A:HIS:N	3	51.25
(1,124)	1:602:A:VAL:N	1:602:A:VAL:CA	1:602:A:VAL:C	1:603:A:HIS:N	8	50.92
(1,118)	1:599:A:ASN:N	1:599:A:ASN:CA	1:599:A:ASN:C	1:600:A:THR:N	5	50.81
(1,116)	1:595:A:LYS:N	1:595:A:LYS:CA	1:595:A:LYS:C	1:596:A:ALA:N	3	50.33
(1,49)	1:523:A:ARG:C	1:524:A:LEU:N	1:524:A:LEU:CA	1:524:A:LEU:C	8	49.05
(1,49)	1:523:A:ARG:C	1:524:A:LEU:N	1:524:A:LEU:CA	1:524:A:LEU:C	4	48.75
(1,83)	1:569:A:ARG:C	1:570:A:GLY:N	1:570:A:GLY:CA	1:570:A:GLY:C	3	48.4
(1,124)	1:602:A:VAL:N	1:602:A:VAL:CA	1:602:A:VAL:C	1:603:A:HIS:N	7	48.13
(1,124)	1:602:A:VAL:N	1:602:A:VAL:CA	1:602:A:VAL:C	1:603:A:HIS:N	6	48.01
(1,124)	1:602:A:VAL:N	1:602:A:VAL:CA	1:602:A:VAL:C	1:603:A:HIS:N	10	47.92
(1,124)	1:602:A:VAL:N	1:602:A:VAL:CA	1:602:A:VAL:C	1:603:A:HIS:N	2	47.76
(1,124)	1:602:A:VAL:N	1:602:A:VAL:CA	1:602:A:VAL:C	1:603:A:HIS:N	1	47.71
(1,244)	1:481:A:LYS:N	1:481:A:LYS:CA	1:481:A:LYS:C	1:482:A:ALA:N	3	46.98
(1,124)	1:602:A:VAL:N	1:602:A:VAL:CA	1:602:A:VAL:C	1:603:A:HIS:N	4	46.63
(1,244)	1:481:A:LYS:N	1:481:A:LYS:CA	1:481:A:LYS:C	1:482:A:ALA:N	9	46.37
(1,49)	1:523:A:ARG:C	1:524:A:LEU:N	1:524:A:LEU:CA	1:524:A:LEU:C	5	45.74
(1,116)	1:595:A:LYS:N	1:595:A:LYS:CA	1:595:A:LYS:C	1:596:A:ALA:N	1	45.57
(1,124)	1:602:A:VAL:N	1:602:A:VAL:CA	1:602:A:VAL:C	1:603:A:HIS:N	9	45.47
(1,244)	1:481:A:LYS:N	1:481:A:LYS:CA	1:481:A:LYS:C	1:482:A:ALA:N	1	44.41
(1,221)	1:697:A:ALA:C	1:698:A:SER:N	1:698:A:SER:CA	1:698:A:SER:C	10	44.22
(1,49)	1:523:A:ARG:C	1:524:A:LEU:N	1:524:A:LEU:CA	1:524:A:LEU:C	1	44.01
(1,244)	1:481:A:LYS:N	1:481:A:LYS:CA	1:481:A:LYS:C	1:482:A:ALA:N	10	43.81
(1,124)	1:602:A:VAL:N	1:602:A:VAL:CA	1:602:A:VAL:C	1:603:A:HIS:N	5	43.67
(1,49)	1:523:A:ARG:C	1:524:A:LEU:N	1:524:A:LEU:CA	1:524:A:LEU:C	3	43.65
(1,116)	1:595:A:LYS:N	1:595:A:LYS:CA	1:595:A:LYS:C	1:596:A:ALA:N	2	43.64
(1,49)	1:523:A:ARG:C	1:524:A:LEU:N	1:524:A:LEU:CA	1:524:A:LEU:C	2	43.59
(1,49)	1:523:A:ARG:C	1:524:A:LEU:N	1:524:A:LEU:CA	1:524:A:LEU:C	9	43.57
(1,244)	1:481:A:LYS:N	1:481:A:LYS:CA	1:481:A:LYS:C	1:482:A:ALA:N	2	43.43
(1,49)	1:523:A:ARG:C	1:524:A:LEU:N	1:524:A:LEU:CA	1:524:A:LEU:C	10	42.6
(1,221)	1:697:A:ALA:C	1:698:A:SER:N	1:698:A:SER:CA	1:698:A:SER:C	2	42.52
(1,221)	1:697:A:ALA:C	1:698:A:SER:N	1:698:A:SER:CA	1:698:A:SER:C	3	42.42
(1,220)	1:696:A:LYS:N	1:696:A:LYS:CA	1:696:A:LYS:C	1:697:A:ALA:N	6	42.1
(1,116)	1:595:A:LYS:N	1:595:A:LYS:CA	1:595:A:LYS:C	1:596:A:ALA:N	9	42.06
(1,220)	1:696:A:LYS:N	1:696:A:LYS:CA	1:696:A:LYS:C	1:697:A:ALA:N	5	41.68
(1,244)	1:481:A:LYS:N	1:481:A:LYS:CA	1:481:A:LYS:C	1:482:A:ALA:N	8	41.6
(1,244)	1:481:A:LYS:N	1:481:A:LYS:CA	1:481:A:LYS:C	1:482:A:ALA:N	4	41.51
(1,49)	1:523:A:ARG:C	1:524:A:LEU:N	1:524:A:LEU:CA	1:524:A:LEU:C	6	41.34
(1,221)	1:697:A:ALA:C	1:698:A:SER:N	1:698:A:SER:CA	1:698:A:SER:C	4	41.27
(1,221)	1:697:A:ALA:C	1:698:A:SER:N	1:698:A:SER:CA	1:698:A:SER:C	8	41.25
(1,221)	1:697:A:ALA:C	1:698:A:SER:N	1:698:A:SER:CA	1:698:A:SER:C	9	41.16
(1,244)	1:481:A:LYS:N	1:481:A:LYS:CA	1:481:A:LYS:C	1:482:A:ALA:N	6	40.84
(1,244)	1:481:A:LYS:N	1:481:A:LYS:CA	1:481:A:LYS:C	1:482:A:ALA:N	5	40.68
(1,126)	1:606:A:PRO:N	1:606:A:PRO:CA	1:606:A:PRO:C	1:607:A:PHE:N	3	40.42
(1,116)	1:595:A:LYS:N	1:595:A:LYS:CA	1:595:A:LYS:C	1:596:A:ALA:N	4	40.36
(1,244)	1:481:A:LYS:N	1:481:A:LYS:CA	1:481:A:LYS:C	1:482:A:ALA:N	7	40.2
(1,116)	1:595:A:LYS:N	1:595:A:LYS:CA	1:595:A:LYS:C	1:596:A:ALA:N	8	40.18

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,144)	1:625:A:VAL:N	1:625:A:VAL:CA	1:625:A:VAL:C	1:626:A:GLN:N	8	40.15
(1,9)	1:488:A:TYR:C	1:489:A:GLY:N	1:489:A:GLY:CA	1:489:A:GLY:C	1	39.97
(1,221)	1:697:A:ALA:C	1:698:A:SER:N	1:698:A:SER:CA	1:698:A:SER:C	7	39.9
(1,221)	1:697:A:ALA:C	1:698:A:SER:N	1:698:A:SER:CA	1:698:A:SER:C	1	39.79
(1,49)	1:523:A:ARG:C	1:524:A:LEU:N	1:524:A:LEU:CA	1:524:A:LEU:C	7	39.76
(1,126)	1:606:A:PRO:N	1:606:A:PRO:CA	1:606:A:PRO:C	1:607:A:PHE:N	9	39.14
(1,144)	1:625:A:VAL:N	1:625:A:VAL:CA	1:625:A:VAL:C	1:626:A:GLN:N	6	38.72
(1,144)	1:625:A:VAL:N	1:625:A:VAL:CA	1:625:A:VAL:C	1:626:A:GLN:N	10	38.59
(1,126)	1:606:A:PRO:N	1:606:A:PRO:CA	1:606:A:PRO:C	1:607:A:PHE:N	6	38.34
(1,144)	1:625:A:VAL:N	1:625:A:VAL:CA	1:625:A:VAL:C	1:626:A:GLN:N	5	38.32
(1,126)	1:606:A:PRO:N	1:606:A:PRO:CA	1:606:A:PRO:C	1:607:A:PHE:N	10	38.23
(1,248)	1:488:A:TYR:N	1:488:A:TYR:CA	1:488:A:TYR:C	1:489:A:GLY:N	1	38.09
(1,144)	1:625:A:VAL:N	1:625:A:VAL:CA	1:625:A:VAL:C	1:626:A:GLN:N	2	38.04
(1,144)	1:625:A:VAL:N	1:625:A:VAL:CA	1:625:A:VAL:C	1:626:A:GLN:N	1	38.03
(1,126)	1:606:A:PRO:N	1:606:A:PRO:CA	1:606:A:PRO:C	1:607:A:PHE:N	8	37.93
(1,144)	1:625:A:VAL:N	1:625:A:VAL:CA	1:625:A:VAL:C	1:626:A:GLN:N	9	37.92
(1,144)	1:625:A:VAL:N	1:625:A:VAL:CA	1:625:A:VAL:C	1:626:A:GLN:N	3	37.7
(1,144)	1:625:A:VAL:N	1:625:A:VAL:CA	1:625:A:VAL:C	1:626:A:GLN:N	4	37.38
(1,144)	1:625:A:VAL:N	1:625:A:VAL:CA	1:625:A:VAL:C	1:626:A:GLN:N	7	36.47
(1,248)	1:488:A:TYR:N	1:488:A:TYR:CA	1:488:A:TYR:C	1:489:A:GLY:N	3	36.15
(1,9)	1:488:A:TYR:C	1:489:A:GLY:N	1:489:A:GLY:CA	1:489:A:GLY:C	4	35.89
(1,9)	1:488:A:TYR:C	1:489:A:GLY:N	1:489:A:GLY:CA	1:489:A:GLY:C	10	35.75
(1,126)	1:606:A:PRO:N	1:606:A:PRO:CA	1:606:A:PRO:C	1:607:A:PHE:N	1	35.66
(1,126)	1:606:A:PRO:N	1:606:A:PRO:CA	1:606:A:PRO:C	1:607:A:PHE:N	2	35.42
(1,126)	1:606:A:PRO:N	1:606:A:PRO:CA	1:606:A:PRO:C	1:607:A:PHE:N	4	35.17
(1,248)	1:488:A:TYR:N	1:488:A:TYR:CA	1:488:A:TYR:C	1:489:A:GLY:N	6	34.51
(1,248)	1:488:A:TYR:N	1:488:A:TYR:CA	1:488:A:TYR:C	1:489:A:GLY:N	10	34.48
(1,126)	1:606:A:PRO:N	1:606:A:PRO:CA	1:606:A:PRO:C	1:607:A:PHE:N	7	34.39
(1,9)	1:488:A:TYR:C	1:489:A:GLY:N	1:489:A:GLY:CA	1:489:A:GLY:C	3	33.75
(1,248)	1:488:A:TYR:N	1:488:A:TYR:CA	1:488:A:TYR:C	1:489:A:GLY:N	5	33.73
(1,145)	1:625:A:VAL:C	1:626:A:GLN:N	1:626:A:GLN:CA	1:626:A:GLN:C	8	33.34
(1,248)	1:488:A:TYR:N	1:488:A:TYR:CA	1:488:A:TYR:C	1:489:A:GLY:N	2	33.14
(1,9)	1:488:A:TYR:C	1:489:A:GLY:N	1:489:A:GLY:CA	1:489:A:GLY:C	5	33.04
(1,9)	1:488:A:TYR:C	1:489:A:GLY:N	1:489:A:GLY:CA	1:489:A:GLY:C	8	32.86
(1,215)	1:693:A:VAL:C	1:694:A:GLU:N	1:694:A:GLU:CA	1:694:A:GLU:C	7	32.79
(1,9)	1:488:A:TYR:C	1:489:A:GLY:N	1:489:A:GLY:CA	1:489:A:GLY:C	6	32.68
(1,9)	1:488:A:TYR:C	1:489:A:GLY:N	1:489:A:GLY:CA	1:489:A:GLY:C	2	32.61
(1,215)	1:693:A:VAL:C	1:694:A:GLU:N	1:694:A:GLU:CA	1:694:A:GLU:C	4	32.06
(1,215)	1:693:A:VAL:C	1:694:A:GLU:N	1:694:A:GLU:CA	1:694:A:GLU:C	1	32.03
(1,126)	1:606:A:PRO:N	1:606:A:PRO:CA	1:606:A:PRO:C	1:607:A:PHE:N	5	31.83
(1,9)	1:488:A:TYR:C	1:489:A:GLY:N	1:489:A:GLY:CA	1:489:A:GLY:C	9	31.54
(1,248)	1:488:A:TYR:N	1:488:A:TYR:CA	1:488:A:TYR:C	1:489:A:GLY:N	4	31.35
(1,215)	1:693:A:VAL:C	1:694:A:GLU:N	1:694:A:GLU:CA	1:694:A:GLU:C	2	31.15
(1,215)	1:693:A:VAL:C	1:694:A:GLU:N	1:694:A:GLU:CA	1:694:A:GLU:C	8	31.15
(1,215)	1:693:A:VAL:C	1:694:A:GLU:N	1:694:A:GLU:CA	1:694:A:GLU:C	6	31.12
(1,215)	1:693:A:VAL:C	1:694:A:GLU:N	1:694:A:GLU:CA	1:694:A:GLU:C	3	31.03
(1,215)	1:693:A:VAL:C	1:694:A:GLU:N	1:694:A:GLU:CA	1:694:A:GLU:C	5	31.01
(1,215)	1:693:A:VAL:C	1:694:A:GLU:N	1:694:A:GLU:CA	1:694:A:GLU:C	10	30.89
(1,248)	1:488:A:TYR:N	1:488:A:TYR:CA	1:488:A:TYR:C	1:489:A:GLY:N	9	30.82
(1,285)	1:696:A:LYS:C	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:CA	1:697:A:ALA:C	3	30.68
(1,205)	1:684:A:ALA:C	1:685:A:LYS:N	1:685:A:LYS:CA	1:685:A:LYS:C	2	30.46

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,285)	1:696:A:LYS:C	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:CA	1:697:A:ALA:C	7	30.33
(1,215)	1:693:A:VAL:C	1:694:A:GLU:N	1:694:A:GLU:CA	1:694:A:GLU:C	9	30.19
(1,28)	1:505:A:CYS:N	1:505:A:CYS:CA	1:505:A:CYS:C	1:506:A:PRO:N	3	30.18
(1,248)	1:488:A:TYR:N	1:488:A:TYR:CA	1:488:A:TYR:C	1:489:A:GLY:N	8	29.96
(1,28)	1:505:A:CYS:N	1:505:A:CYS:CA	1:505:A:CYS:C	1:506:A:PRO:N	2	29.79
(1,145)	1:625:A:VAL:C	1:626:A:GLN:N	1:626:A:GLN:CA	1:626:A:GLN:C	7	29.71
(1,28)	1:505:A:CYS:N	1:505:A:CYS:CA	1:505:A:CYS:C	1:506:A:PRO:N	10	29.58
(1,205)	1:684:A:ALA:C	1:685:A:LYS:N	1:685:A:LYS:CA	1:685:A:LYS:C	10	29.52
(1,205)	1:684:A:ALA:C	1:685:A:LYS:N	1:685:A:LYS:CA	1:685:A:LYS:C	4	29.33
(1,28)	1:505:A:CYS:N	1:505:A:CYS:CA	1:505:A:CYS:C	1:506:A:PRO:N	7	29.31
(1,145)	1:625:A:VAL:C	1:626:A:GLN:N	1:626:A:GLN:CA	1:626:A:GLN:C	1	29.19
(1,5)	1:481:A:LYS:C	1:482:A:ALA:N	1:482:A:ALA:CA	1:482:A:ALA:C	9	29.09
(1,28)	1:505:A:CYS:N	1:505:A:CYS:CA	1:505:A:CYS:C	1:506:A:PRO:N	6	29.03
(1,5)	1:481:A:LYS:C	1:482:A:ALA:N	1:482:A:ALA:CA	1:482:A:ALA:C	3	29.01
(1,205)	1:684:A:ALA:C	1:685:A:LYS:N	1:685:A:LYS:CA	1:685:A:LYS:C	7	29.0
(1,205)	1:684:A:ALA:C	1:685:A:LYS:N	1:685:A:LYS:CA	1:685:A:LYS:C	8	28.98
(1,135)	1:617:A:THR:C	1:618:A:GLU:N	1:618:A:GLU:CA	1:618:A:GLU:C	6	28.93
(1,285)	1:696:A:LYS:C	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:CA	1:697:A:ALA:C	2	28.83
(1,285)	1:696:A:LYS:C	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:CA	1:697:A:ALA:C	8	28.82
(1,145)	1:625:A:VAL:C	1:626:A:GLN:N	1:626:A:GLN:CA	1:626:A:GLN:C	2	28.82
(1,205)	1:684:A:ALA:C	1:685:A:LYS:N	1:685:A:LYS:CA	1:685:A:LYS:C	1	28.81
(1,285)	1:696:A:LYS:C	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:CA	1:697:A:ALA:C	10	28.67
(1,28)	1:505:A:CYS:N	1:505:A:CYS:CA	1:505:A:CYS:C	1:506:A:PRO:N	5	28.66
(1,285)	1:696:A:LYS:C	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:CA	1:697:A:ALA:C	1	28.57
(1,285)	1:696:A:LYS:C	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:CA	1:697:A:ALA:C	9	28.55
(1,285)	1:696:A:LYS:C	1:697:A:ALA:N	1:697:A:ALA:CA	1:697:A:ALA:C	4	28.5
(1,145)	1:625:A:VAL:C	1:626:A:GLN:N	1:626:A:GLN:CA	1:626:A:GLN:C	4	28.3
(1,28)	1:505:A:CYS:N	1:505:A:CYS:CA	1:505:A:CYS:C	1:506:A:PRO:N	4	28.28
(1,200)	1:678:A:GLN:N	1:678:A:GLN:CA	1:678:A:GLN:C	1:679:A:GLU:N	3	28.2
(1,28)	1:505:A:CYS:N	1:505:A:CYS:CA	1:505:A:CYS:C	1:506:A:PRO:N	9	28.19
(1,28)	1:505:A:CYS:N	1:505:A:CYS:CA	1:505:A:CYS:C	1:506:A:PRO:N	8	27.88
(1,5)	1:481:A:LYS:C	1:482:A:ALA:N	1:482:A:ALA:CA	1:482:A:ALA:C	8	27.24
(1,5)	1:481:A:LYS:C	1:482:A:ALA:N	1:482:A:ALA:CA	1:482:A:ALA:C	5	27.21
(1,268)	1:613:A:ASN:N	1:613:A:ASN:CA	1:613:A:ASN:C	1:614:A:ARG:N	2	27.13
(1,5)	1:481:A:LYS:C	1:482:A:ALA:N	1:482:A:ALA:CA	1:482:A:ALA:C	1	27.08
(1,268)	1:613:A:ASN:N	1:613:A:ASN:CA	1:613:A:ASN:C	1:614:A:ARG:N	1	27.05
(1,248)	1:488:A:TYR:N	1:488:A:TYR:CA	1:488:A:TYR:C	1:489:A:GLY:N	7	26.87
(1,268)	1:613:A:ASN:N	1:613:A:ASN:CA	1:613:A:ASN:C	1:614:A:ARG:N	4	26.63
(1,268)	1:613:A:ASN:N	1:613:A:ASN:CA	1:613:A:ASN:C	1:614:A:ARG:N	3	26.61
(1,5)	1:481:A:LYS:C	1:482:A:ALA:N	1:482:A:ALA:CA	1:482:A:ALA:C	10	26.58
(1,205)	1:684:A:ALA:C	1:685:A:LYS:N	1:685:A:LYS:CA	1:685:A:LYS:C	9	26.51
(1,145)	1:625:A:VAL:C	1:626:A:GLN:N	1:626:A:GLN:CA	1:626:A:GLN:C	5	26.51
(1,75)	1:561:A:PRO:C	1:562:A:PHE:N	1:562:A:PHE:CA	1:562:A:PHE:C	5	26.32
(1,268)	1:613:A:ASN:N	1:613:A:ASN:CA	1:613:A:ASN:C	1:614:A:ARG:N	8	26.25
(1,149)	1:627:A:GLU:C	1:628:A:GLY:N	1:628:A:GLY:CA	1:628:A:GLY:C	9	26.25
(1,5)	1:481:A:LYS:C	1:482:A:ALA:N	1:482:A:ALA:CA	1:482:A:ALA:C	6	26.17
(1,268)	1:613:A:ASN:N	1:613:A:ASN:CA	1:613:A:ASN:C	1:614:A:ARG:N	6	26.16
(1,75)	1:561:A:PRO:C	1:562:A:PHE:N	1:562:A:PHE:CA	1:562:A:PHE:C	4	25.96
(1,149)	1:627:A:GLU:C	1:628:A:GLY:N	1:628:A:GLY:CA	1:628:A:GLY:C	10	25.89
(1,268)	1:613:A:ASN:N	1:613:A:ASN:CA	1:613:A:ASN:C	1:614:A:ARG:N	9	25.83
(1,75)	1:561:A:PRO:C	1:562:A:PHE:N	1:562:A:PHE:CA	1:562:A:PHE:C	10	25.78

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,28)	1:505:A:CYS:N	1:505:A:CYS:CA	1:505:A:CYS:C	1:506:A:PRO:N	1	25.76
(1,14)	1:491:A:PRO:N	1:491:A:PRO:CA	1:491:A:PRO:C	1:492:A:PHE:N	9	25.69
(1,214)	1:691:A:ARG:N	1:691:A:ARG:CA	1:691:A:ARG:C	1:692:A:ALA:N	6	25.64
(1,147)	1:626:A:GLN:C	1:627:A:GLU:N	1:627:A:GLU:CA	1:627:A:GLU:C	5	25.59
(1,268)	1:613:A:ASN:N	1:613:A:ASN:CA	1:613:A:ASN:C	1:614:A:ARG:N	10	25.55
(1,75)	1:561:A:PRO:C	1:562:A:PHE:N	1:562:A:PHE:CA	1:562:A:PHE:C	7	25.53
(1,145)	1:625:A:VAL:C	1:626:A:GLN:N	1:626:A:GLN:CA	1:626:A:GLN:C	3	25.4
(1,22)	1:497:A:VAL:N	1:497:A:VAL:CA	1:497:A:VAL:C	1:498:A:GLU:N	10	25.37
(1,214)	1:691:A:ARG:N	1:691:A:ARG:CA	1:691:A:ARG:C	1:692:A:ALA:N	5	25.34
(1,75)	1:561:A:PRO:C	1:562:A:PHE:N	1:562:A:PHE:CA	1:562:A:PHE:C	1	24.74
(1,5)	1:481:A:LYS:C	1:482:A:ALA:N	1:482:A:ALA:CA	1:482:A:ALA:C	2	24.72
(1,5)	1:481:A:LYS:C	1:482:A:ALA:N	1:482:A:ALA:CA	1:482:A:ALA:C	4	24.7
(1,268)	1:613:A:ASN:N	1:613:A:ASN:CA	1:613:A:ASN:C	1:614:A:ARG:N	7	24.66
(1,145)	1:625:A:VAL:C	1:626:A:GLN:N	1:626:A:GLN:CA	1:626:A:GLN:C	9	24.57
(1,3)	1:479:A:VAL:C	1:480:A:ILE:N	1:480:A:ILE:CA	1:480:A:ILE:C	1	24.56
(1,3)	1:479:A:VAL:C	1:480:A:ILE:N	1:480:A:ILE:CA	1:480:A:ILE:C	8	24.53
(1,9)	1:488:A:TYR:C	1:489:A:GLY:N	1:489:A:GLY:CA	1:489:A:GLY:C	7	24.35
(1,200)	1:678:A:GLN:N	1:678:A:GLN:CA	1:678:A:GLN:C	1:679:A:GLU:N	9	24.27
(1,75)	1:561:A:PRO:C	1:562:A:PHE:N	1:562:A:PHE:CA	1:562:A:PHE:C	2	24.2
(1,149)	1:627:A:GLU:C	1:628:A:GLY:N	1:628:A:GLY:CA	1:628:A:GLY:C	2	24.17
(1,75)	1:561:A:PRO:C	1:562:A:PHE:N	1:562:A:PHE:CA	1:562:A:PHE:C	8	24.07
(1,75)	1:561:A:PRO:C	1:562:A:PHE:N	1:562:A:PHE:CA	1:562:A:PHE:C	9	24.0
(1,205)	1:684:A:ALA:C	1:685:A:LYS:N	1:685:A:LYS:CA	1:685:A:LYS:C	3	23.88
(1,75)	1:561:A:PRO:C	1:562:A:PHE:N	1:562:A:PHE:CA	1:562:A:PHE:C	6	23.82
(1,3)	1:479:A:VAL:C	1:480:A:ILE:N	1:480:A:ILE:CA	1:480:A:ILE:C	4	23.75
(1,151)	1:629:A:PHE:C	1:630:A:GLU:N	1:630:A:GLU:CA	1:630:A:GLU:C	8	23.43
(1,151)	1:629:A:PHE:C	1:630:A:GLU:N	1:630:A:GLU:CA	1:630:A:GLU:C	4	23.36
(1,27)	1:504:A:VAL:C	1:505:A:CYS:N	1:505:A:CYS:CA	1:505:A:CYS:C	10	23.27
(1,151)	1:629:A:PHE:C	1:630:A:GLU:N	1:630:A:GLU:CA	1:630:A:GLU:C	7	23.23
(1,135)	1:617:A:THR:C	1:618:A:GLU:N	1:618:A:GLU:CA	1:618:A:GLU:C	9	23.08
(1,151)	1:629:A:PHE:C	1:630:A:GLU:N	1:630:A:GLU:CA	1:630:A:GLU:C	1	23.07
(1,149)	1:627:A:GLU:C	1:628:A:GLY:N	1:628:A:GLY:CA	1:628:A:GLY:C	7	23.05
(1,282)	1:682:A:HIS:N	1:682:A:HIS:CA	1:682:A:HIS:C	1:683:A:LYS:N	9	22.87
(1,5)	1:481:A:LYS:C	1:482:A:ALA:N	1:482:A:ALA:CA	1:482:A:ALA:C	7	22.86
(1,135)	1:617:A:THR:C	1:618:A:GLU:N	1:618:A:GLU:CA	1:618:A:GLU:C	3	22.78
(1,200)	1:678:A:GLN:N	1:678:A:GLN:CA	1:678:A:GLN:C	1:679:A:GLU:N	7	22.76
(1,145)	1:625:A:VAL:C	1:626:A:GLN:N	1:626:A:GLN:CA	1:626:A:GLN:C	6	22.71
(1,3)	1:479:A:VAL:C	1:480:A:ILE:N	1:480:A:ILE:CA	1:480:A:ILE:C	2	22.68
(1,149)	1:627:A:GLU:C	1:628:A:GLY:N	1:628:A:GLY:CA	1:628:A:GLY:C	1	22.62
(1,150)	1:628:A:GLY:N	1:628:A:GLY:CA	1:628:A:GLY:C	1:629:A:PHE:N	8	22.49
(1,149)	1:627:A:GLU:C	1:628:A:GLY:N	1:628:A:GLY:CA	1:628:A:GLY:C	4	22.3
(1,151)	1:629:A:PHE:C	1:630:A:GLU:N	1:630:A:GLU:CA	1:630:A:GLU:C	2	22.27
(1,27)	1:504:A:VAL:C	1:505:A:CYS:N	1:505:A:CYS:CA	1:505:A:CYS:C	8	22.27
(1,131)	1:615:A:SER:C	1:616:A:LEU:N	1:616:A:LEU:CA	1:616:A:LEU:C	2	22.26
(1,131)	1:615:A:SER:C	1:616:A:LEU:N	1:616:A:LEU:CA	1:616:A:LEU:C	1	22.16
(1,27)	1:504:A:VAL:C	1:505:A:CYS:N	1:505:A:CYS:CA	1:505:A:CYS:C	7	21.94
(1,217)	1:694:A:GLU:C	1:695:A:VAL:N	1:695:A:VAL:CA	1:695:A:VAL:C	6	21.93
(1,131)	1:615:A:SER:C	1:616:A:LEU:N	1:616:A:LEU:CA	1:616:A:LEU:C	6	21.91
(1,151)	1:629:A:PHE:C	1:630:A:GLU:N	1:630:A:GLU:CA	1:630:A:GLU:C	9	21.8
(1,56)	1:527:A:LEU:N	1:527:A:LEU:CA	1:527:A:LEU:C	1:528:A:ARG:N	10	21.74
(1,200)	1:678:A:GLN:N	1:678:A:GLN:CA	1:678:A:GLN:C	1:679:A:GLU:N	10	21.68

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,200)	1:678:A:GLN:N	1:678:A:GLN:CA	1:678:A:GLN:C	1:679:A:GLU:N	6	21.67
(1,150)	1:628:A:GLY:N	1:628:A:GLY:CA	1:628:A:GLY:C	1:629:A:PHE:N	1	21.58
(1,131)	1:615:A:SER:C	1:616:A:LEU:N	1:616:A:LEU:CA	1:616:A:LEU:C	4	21.58
(1,27)	1:504:A:VAL:C	1:505:A:CYS:N	1:505:A:CYS:CA	1:505:A:CYS:C	9	21.49
(1,3)	1:479:A:VAL:C	1:480:A:ILE:N	1:480:A:ILE:CA	1:480:A:ILE:C	10	21.39
(1,217)	1:694:A:GLU:C	1:695:A:VAL:N	1:695:A:VAL:CA	1:695:A:VAL:C	5	21.28
(1,268)	1:613:A:ASN:N	1:613:A:ASN:CA	1:613:A:ASN:C	1:614:A:ARG:N	5	21.22
(1,151)	1:629:A:PHE:C	1:630:A:GLU:N	1:630:A:GLU:CA	1:630:A:GLU:C	3	21.2
(1,131)	1:615:A:SER:C	1:616:A:LEU:N	1:616:A:LEU:CA	1:616:A:LEU:C	10	21.18
(1,131)	1:615:A:SER:C	1:616:A:LEU:N	1:616:A:LEU:CA	1:616:A:LEU:C	8	21.15
(1,51)	1:524:A:LEU:C	1:525:A:ASP:N	1:525:A:ASP:CA	1:525:A:ASP:C	5	21.14
(1,150)	1:628:A:GLY:N	1:628:A:GLY:CA	1:628:A:GLY:C	1:629:A:PHE:N	4	21.08
(1,27)	1:504:A:VAL:C	1:505:A:CYS:N	1:505:A:CYS:CA	1:505:A:CYS:C	2	21.05
(1,200)	1:678:A:GLN:N	1:678:A:GLN:CA	1:678:A:GLN:C	1:679:A:GLU:N	2	21.03
(1,27)	1:504:A:VAL:C	1:505:A:CYS:N	1:505:A:CYS:CA	1:505:A:CYS:C	6	21.01
(1,67)	1:539:A:PRO:C	1:540:A:LEU:N	1:540:A:LEU:CA	1:540:A:LEU:C	4	21.0
(1,131)	1:615:A:SER:C	1:616:A:LEU:N	1:616:A:LEU:CA	1:616:A:LEU:C	7	20.97
(1,27)	1:504:A:VAL:C	1:505:A:CYS:N	1:505:A:CYS:CA	1:505:A:CYS:C	3	20.92
(1,145)	1:625:A:VAL:C	1:626:A:GLN:N	1:626:A:GLN:CA	1:626:A:GLN:C	10	20.88
(1,200)	1:678:A:GLN:N	1:678:A:GLN:CA	1:678:A:GLN:C	1:679:A:GLU:N	5	20.87
(1,150)	1:628:A:GLY:N	1:628:A:GLY:CA	1:628:A:GLY:C	1:629:A:PHE:N	2	20.74
(1,150)	1:628:A:GLY:N	1:628:A:GLY:CA	1:628:A:GLY:C	1:629:A:PHE:N	7	20.66
(1,213)	1:690:A:TYR:C	1:691:A:ARG:N	1:691:A:ARG:CA	1:691:A:ARG:C	6	20.62
(1,213)	1:690:A:TYR:C	1:691:A:ARG:N	1:691:A:ARG:CA	1:691:A:ARG:C	5	20.56
(1,15)	1:491:A:PRO:C	1:492:A:PHE:N	1:492:A:PHE:CA	1:492:A:PHE:C	9	20.47
(1,202)	1:679:A:GLU:N	1:679:A:GLU:CA	1:679:A:GLU:C	1:680:A:LEU:N	2	20.45
(1,200)	1:678:A:GLN:N	1:678:A:GLN:CA	1:678:A:GLN:C	1:679:A:GLU:N	4	20.44
(1,23)	1:497:A:VAL:C	1:498:A:GLU:N	1:498:A:GLU:CA	1:498:A:GLU:C	10	20.43
(1,131)	1:615:A:SER:C	1:616:A:LEU:N	1:616:A:LEU:CA	1:616:A:LEU:C	9	20.4
(1,149)	1:627:A:GLU:C	1:628:A:GLY:N	1:628:A:GLY:CA	1:628:A:GLY:C	8	20.31
(1,56)	1:527:A:LEU:N	1:527:A:LEU:CA	1:527:A:LEU:C	1:528:A:ARG:N	1	20.17
(1,282)	1:682:A:HIS:N	1:682:A:HIS:CA	1:682:A:HIS:C	1:683:A:LYS:N	3	20.16
(1,27)	1:504:A:VAL:C	1:505:A:CYS:N	1:505:A:CYS:CA	1:505:A:CYS:C	1	20.15
(1,198)	1:677:A:ARG:N	1:677:A:ARG:CA	1:677:A:ARG:C	1:678:A:GLN:N	9	20.08
(1,151)	1:629:A:PHE:C	1:630:A:GLU:N	1:630:A:GLU:CA	1:630:A:GLU:C	10	20.03
(1,56)	1:527:A:LEU:N	1:527:A:LEU:CA	1:527:A:LEU:C	1:528:A:ARG:N	6	19.91
(1,135)	1:617:A:THR:C	1:618:A:GLU:N	1:618:A:GLU:CA	1:618:A:GLU:C	1	19.88
(1,36)	1:516:A:ARG:N	1:516:A:ARG:CA	1:516:A:ARG:C	1:517:A:GLN:N	4	19.88
(1,202)	1:679:A:GLU:N	1:679:A:GLU:CA	1:679:A:GLU:C	1:680:A:LEU:N	5	19.82
(1,200)	1:678:A:GLN:N	1:678:A:GLN:CA	1:678:A:GLN:C	1:679:A:GLU:N	8	19.61
(1,27)	1:504:A:VAL:C	1:505:A:CYS:N	1:505:A:CYS:CA	1:505:A:CYS:C	5	19.6
(1,56)	1:527:A:LEU:N	1:527:A:LEU:CA	1:527:A:LEU:C	1:528:A:ARG:N	2	19.53
(1,66)	1:539:A:PRO:N	1:539:A:PRO:CA	1:539:A:PRO:C	1:540:A:LEU:N	4	19.47
(1,27)	1:504:A:VAL:C	1:505:A:CYS:N	1:505:A:CYS:CA	1:505:A:CYS:C	4	19.47
(1,198)	1:677:A:ARG:N	1:677:A:ARG:CA	1:677:A:ARG:C	1:678:A:GLN:N	1	19.41
(1,16)	1:492:A:PHE:N	1:492:A:PHE:CA	1:492:A:PHE:C	1:493:A:LYS:N	4	19.41
(1,202)	1:679:A:GLU:N	1:679:A:GLU:CA	1:679:A:GLU:C	1:680:A:LEU:N	10	19.4
(1,75)	1:561:A:PRO:C	1:562:A:PHE:N	1:562:A:PHE:CA	1:562:A:PHE:C	3	19.11
(1,3)	1:479:A:VAL:C	1:480:A:ILE:N	1:480:A:ILE:CA	1:480:A:ILE:C	7	19.1
(1,135)	1:617:A:THR:C	1:618:A:GLU:N	1:618:A:GLU:CA	1:618:A:GLU:C	2	19.07
(1,135)	1:617:A:THR:C	1:618:A:GLU:N	1:618:A:GLU:CA	1:618:A:GLU:C	10	18.93

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,127)	1:607:A:PHE:C	1:608:A:VAL:N	1:608:A:VAL:CA	1:608:A:VAL:C	7	18.85
(1,282)	1:682:A:HIS:N	1:682:A:HIS:CA	1:682:A:HIS:C	1:683:A:LYS:N	5	18.82
(1,165)	1:643:A:PHE:C	1:644:A:ASP:N	1:644:A:ASP:CA	1:644:A:ASP:C	9	18.82
(1,149)	1:627:A:GLU:C	1:628:A:GLY:N	1:628:A:GLY:CA	1:628:A:GLY:C	6	18.77
(1,225)	1:699:A:ASP:C	1:700:A:VAL:N	1:700:A:VAL:CA	1:700:A:VAL:C	5	18.74
(1,165)	1:643:A:PHE:C	1:644:A:ASP:N	1:644:A:ASP:CA	1:644:A:ASP:C	5	18.63
(1,65)	1:538:A:GLN:C	1:539:A:PRO:N	1:539:A:PRO:CA	1:539:A:PRO:C	6	18.56
(1,51)	1:524:A:LEU:C	1:525:A:ASP:N	1:525:A:ASP:CA	1:525:A:ASP:C	6	18.39
(1,3)	1:479:A:VAL:C	1:480:A:ILE:N	1:480:A:ILE:CA	1:480:A:ILE:C	5	18.37
(1,205)	1:684:A:ALA:C	1:685:A:LYS:N	1:685:A:LYS:CA	1:685:A:LYS:C	5	18.35
(1,127)	1:607:A:PHE:C	1:608:A:VAL:N	1:608:A:VAL:CA	1:608:A:VAL:C	3	18.3
(1,282)	1:682:A:HIS:N	1:682:A:HIS:CA	1:682:A:HIS:C	1:683:A:LYS:N	6	18.21
(1,131)	1:615:A:SER:C	1:616:A:LEU:N	1:616:A:LEU:CA	1:616:A:LEU:C	3	18.21
(1,202)	1:679:A:GLU:N	1:679:A:GLU:CA	1:679:A:GLU:C	1:680:A:LEU:N	3	18.1
(1,51)	1:524:A:LEU:C	1:525:A:ASP:N	1:525:A:ASP:CA	1:525:A:ASP:C	2	17.99
(1,67)	1:539:A:PRO:C	1:540:A:LEU:N	1:540:A:LEU:CA	1:540:A:LEU:C	3	17.95
(1,151)	1:629:A:PHE:C	1:630:A:GLU:N	1:630:A:GLU:CA	1:630:A:GLU:C	6	17.89
(1,150)	1:628:A:GLY:N	1:628:A:GLY:CA	1:628:A:GLY:C	1:629:A:PHE:N	9	17.88
(1,65)	1:538:A:GLN:C	1:539:A:PRO:N	1:539:A:PRO:CA	1:539:A:PRO:C	9	17.85
(1,202)	1:679:A:GLU:N	1:679:A:GLU:CA	1:679:A:GLU:C	1:680:A:LEU:N	6	17.79
(1,51)	1:524:A:LEU:C	1:525:A:ASP:N	1:525:A:ASP:CA	1:525:A:ASP:C	10	17.74
(1,165)	1:643:A:PHE:C	1:644:A:ASP:N	1:644:A:ASP:CA	1:644:A:ASP:C	3	17.7
(1,202)	1:679:A:GLU:N	1:679:A:GLU:CA	1:679:A:GLU:C	1:680:A:LEU:N	1	17.65
(1,202)	1:679:A:GLU:N	1:679:A:GLU:CA	1:679:A:GLU:C	1:680:A:LEU:N	7	17.58
(1,147)	1:626:A:GLN:C	1:627:A:GLU:N	1:627:A:GLU:CA	1:627:A:GLU:C	3	17.58
(1,205)	1:684:A:ALA:C	1:685:A:LYS:N	1:685:A:LYS:CA	1:685:A:LYS:C	6	17.48
(1,135)	1:617:A:THR:C	1:618:A:GLU:N	1:618:A:GLU:CA	1:618:A:GLU:C	4	17.48
(1,14)	1:491:A:PRO:N	1:491:A:PRO:CA	1:491:A:PRO:C	1:492:A:PHE:N	8	17.45
(1,65)	1:538:A:GLN:C	1:539:A:PRO:N	1:539:A:PRO:CA	1:539:A:PRO:C	3	17.41
(1,147)	1:626:A:GLN:C	1:627:A:GLU:N	1:627:A:GLU:CA	1:627:A:GLU:C	1	17.35
(1,147)	1:626:A:GLN:C	1:627:A:GLU:N	1:627:A:GLU:CA	1:627:A:GLU:C	2	17.3
(1,127)	1:607:A:PHE:C	1:608:A:VAL:N	1:608:A:VAL:CA	1:608:A:VAL:C	9	17.27
(1,146)	1:626:A:GLN:N	1:626:A:GLN:CA	1:626:A:GLN:C	1:627:A:GLU:N	5	17.22
(1,15)	1:491:A:PRO:C	1:492:A:PHE:N	1:492:A:PHE:CA	1:492:A:PHE:C	8	17.13
(1,56)	1:527:A:LEU:N	1:527:A:LEU:CA	1:527:A:LEU:C	1:528:A:ARG:N	4	17.12
(1,51)	1:524:A:LEU:C	1:525:A:ASP:N	1:525:A:ASP:CA	1:525:A:ASP:C	1	17.03
(1,135)	1:617:A:THR:C	1:618:A:GLU:N	1:618:A:GLU:CA	1:618:A:GLU:C	8	17.0
(1,147)	1:626:A:GLN:C	1:627:A:GLU:N	1:627:A:GLU:CA	1:627:A:GLU:C	6	16.83
(1,8)	1:487:A:HIS:N	1:487:A:HIS:CA	1:487:A:HIS:C	1:488:A:TYR:N	10	16.75
(1,56)	1:527:A:LEU:N	1:527:A:LEU:CA	1:527:A:LEU:C	1:528:A:ARG:N	9	16.73
(1,56)	1:527:A:LEU:N	1:527:A:LEU:CA	1:527:A:LEU:C	1:528:A:ARG:N	5	16.72
(1,147)	1:626:A:GLN:C	1:627:A:GLU:N	1:627:A:GLU:CA	1:627:A:GLU:C	7	16.66
(1,67)	1:539:A:PRO:C	1:540:A:LEU:N	1:540:A:LEU:CA	1:540:A:LEU:C	6	16.59
(1,51)	1:524:A:LEU:C	1:525:A:ASP:N	1:525:A:ASP:CA	1:525:A:ASP:C	4	16.58
(1,202)	1:679:A:GLU:N	1:679:A:GLU:CA	1:679:A:GLU:C	1:680:A:LEU:N	8	16.55
(1,141)	1:623:A:SER:C	1:624:A:ILE:N	1:624:A:ILE:CA	1:624:A:ILE:C	8	16.54
(1,108)	1:585:A:LEU:N	1:585:A:LEU:CA	1:585:A:LEU:C	1:586:A:LYS:N	7	16.49
(1,147)	1:626:A:GLN:C	1:627:A:GLU:N	1:627:A:GLU:CA	1:627:A:GLU:C	4	16.32
(1,59)	1:532:A:VAL:C	1:533:A:PRO:N	1:533:A:PRO:CA	1:533:A:PRO:C	8	16.3
(1,198)	1:677:A:ARG:N	1:677:A:ARG:CA	1:677:A:ARG:C	1:678:A:GLN:N	4	16.15
(1,3)	1:479:A:VAL:C	1:480:A:ILE:N	1:480:A:ILE:CA	1:480:A:ILE:C	9	16.11

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,200)	1:678:A:GLN:N	1:678:A:GLN:CA	1:678:A:GLN:C	1:679:A:GLU:N	1	16.09
(1,51)	1:524:A:LEU:C	1:525:A:ASP:N	1:525:A:ASP:CA	1:525:A:ASP:C	8	16.06
(1,141)	1:623:A:SER:C	1:624:A:ILE:N	1:624:A:ILE:CA	1:624:A:ILE:C	1	16.04
(1,165)	1:643:A:PHE:C	1:644:A:ASP:N	1:644:A:ASP:CA	1:644:A:ASP:C	10	15.98
(1,135)	1:617:A:THR:C	1:618:A:GLU:N	1:618:A:GLU:CA	1:618:A:GLU:C	7	15.98
(1,67)	1:539:A:PRO:C	1:540:A:LEU:N	1:540:A:LEU:CA	1:540:A:LEU:C	8	15.92
(1,151)	1:629:A:PHE:C	1:630:A:GLU:N	1:630:A:GLU:CA	1:630:A:GLU:C	5	15.91
(1,225)	1:699:A:ASP:C	1:700:A:VAL:N	1:700:A:VAL:CA	1:700:A:VAL:C	6	15.86
(1,146)	1:626:A:GLN:N	1:626:A:GLN:CA	1:626:A:GLN:C	1:627:A:GLU:N	3	15.78
(1,66)	1:539:A:PRO:N	1:539:A:PRO:CA	1:539:A:PRO:C	1:540:A:LEU:N	8	15.67
(1,198)	1:677:A:ARG:N	1:677:A:ARG:CA	1:677:A:ARG:C	1:678:A:GLN:N	3	15.64
(1,198)	1:677:A:ARG:N	1:677:A:ARG:CA	1:677:A:ARG:C	1:678:A:GLN:N	5	15.62
(1,141)	1:623:A:SER:C	1:624:A:ILE:N	1:624:A:ILE:CA	1:624:A:ILE:C	2	15.56
(1,16)	1:492:A:PHE:N	1:492:A:PHE:CA	1:492:A:PHE:C	1:493:A:LYS:N	2	15.54
(1,257)	1:543:A:PHE:C	1:544:A:ASP:N	1:544:A:ASP:CA	1:544:A:ASP:C	2	15.52
(1,202)	1:679:A:GLU:N	1:679:A:GLU:CA	1:679:A:GLU:C	1:680:A:LEU:N	4	15.49
(1,3)	1:479:A:VAL:C	1:480:A:ILE:N	1:480:A:ILE:CA	1:480:A:ILE:C	3	15.41
(1,150)	1:628:A:GLY:N	1:628:A:GLY:CA	1:628:A:GLY:C	1:629:A:PHE:N	10	15.39
(1,210)	1:689:A:LYS:N	1:689:A:LYS:CA	1:689:A:LYS:C	1:690:A:TYR:N	4	15.36
(1,165)	1:643:A:PHE:C	1:644:A:ASP:N	1:644:A:ASP:CA	1:644:A:ASP:C	8	15.23
(1,14)	1:491:A:PRO:N	1:491:A:PRO:CA	1:491:A:PRO:C	1:492:A:PHE:N	3	15.2
(1,22)	1:497:A:VAL:N	1:497:A:VAL:CA	1:497:A:VAL:C	1:498:A:GLU:N	3	15.09
(1,165)	1:643:A:PHE:C	1:644:A:ASP:N	1:644:A:ASP:CA	1:644:A:ASP:C	6	15.04
(1,165)	1:643:A:PHE:C	1:644:A:ASP:N	1:644:A:ASP:CA	1:644:A:ASP:C	4	15.03
(1,165)	1:643:A:PHE:C	1:644:A:ASP:N	1:644:A:ASP:CA	1:644:A:ASP:C	2	14.96
(1,69)	1:551:A:LYS:C	1:552:A:LYS:N	1:552:A:LYS:CA	1:552:A:LYS:C	7	14.96
(1,24)	1:498:A:GLU:N	1:498:A:GLU:CA	1:498:A:GLU:C	1:499:A:GLN:N	10	14.93
(1,198)	1:677:A:ARG:N	1:677:A:ARG:CA	1:677:A:ARG:C	1:678:A:GLN:N	2	14.9
(1,23)	1:497:A:VAL:C	1:498:A:GLU:N	1:498:A:GLU:CA	1:498:A:GLU:C	3	14.9
(1,198)	1:677:A:ARG:N	1:677:A:ARG:CA	1:677:A:ARG:C	1:678:A:GLN:N	7	14.85
(1,127)	1:607:A:PHE:C	1:608:A:VAL:N	1:608:A:VAL:CA	1:608:A:VAL:C	1	14.75
(1,67)	1:539:A:PRO:C	1:540:A:LEU:N	1:540:A:LEU:CA	1:540:A:LEU:C	7	14.72
(1,14)	1:491:A:PRO:N	1:491:A:PRO:CA	1:491:A:PRO:C	1:492:A:PHE:N	6	14.7
(1,165)	1:643:A:PHE:C	1:644:A:ASP:N	1:644:A:ASP:CA	1:644:A:ASP:C	7	14.64
(1,282)	1:682:A:HIS:N	1:682:A:HIS:CA	1:682:A:HIS:C	1:683:A:LYS:N	1	14.62
(1,282)	1:682:A:HIS:N	1:682:A:HIS:CA	1:682:A:HIS:C	1:683:A:LYS:N	2	14.61
(1,147)	1:626:A:GLN:C	1:627:A:GLU:N	1:627:A:GLU:CA	1:627:A:GLU:C	10	14.61
(1,69)	1:551:A:LYS:C	1:552:A:LYS:N	1:552:A:LYS:CA	1:552:A:LYS:C	2	14.6
(1,165)	1:643:A:PHE:C	1:644:A:ASP:N	1:644:A:ASP:CA	1:644:A:ASP:C	1	14.59
(1,271)	1:632:A:ALA:C	1:633:A:THR:N	1:633:A:THR:CA	1:633:A:THR:C	6	14.58
(1,36)	1:516:A:ARG:N	1:516:A:ARG:CA	1:516:A:ARG:C	1:517:A:GLN:N	7	14.57
(1,198)	1:677:A:ARG:N	1:677:A:ARG:CA	1:677:A:ARG:C	1:678:A:GLN:N	6	14.47
(1,69)	1:551:A:LYS:C	1:552:A:LYS:N	1:552:A:LYS:CA	1:552:A:LYS:C	6	14.45
(1,141)	1:623:A:SER:C	1:624:A:ILE:N	1:624:A:ILE:CA	1:624:A:ILE:C	4	14.44
(1,146)	1:626:A:GLN:N	1:626:A:GLN:CA	1:626:A:GLN:C	1:627:A:GLU:N	6	14.38
(1,214)	1:691:A:ARG:N	1:691:A:ARG:CA	1:691:A:ARG:C	1:692:A:ALA:N	8	14.37
(1,210)	1:689:A:LYS:N	1:689:A:LYS:CA	1:689:A:LYS:C	1:690:A:TYR:N	8	14.33
(1,282)	1:682:A:HIS:N	1:682:A:HIS:CA	1:682:A:HIS:C	1:683:A:LYS:N	10	14.31
(1,210)	1:689:A:LYS:N	1:689:A:LYS:CA	1:689:A:LYS:C	1:690:A:TYR:N	2	14.23
(1,62)	1:535:A:PHE:N	1:535:A:PHE:CA	1:535:A:PHE:C	1:536:A:LYS:N	4	14.23
(1,147)	1:626:A:GLN:C	1:627:A:GLU:N	1:627:A:GLU:CA	1:627:A:GLU:C	8	14.2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,214)	1:691:A:ARG:N	1:691:A:ARG:CA	1:691:A:ARG:C	1:692:A:ALA:N	10	14.15
(1,210)	1:689:A:LYS:N	1:689:A:LYS:CA	1:689:A:LYS:C	1:690:A:TYR:N	1	14.05
(1,141)	1:623:A:SER:C	1:624:A:ILE:N	1:624:A:ILE:CA	1:624:A:ILE:C	7	14.05
(1,210)	1:689:A:LYS:N	1:689:A:LYS:CA	1:689:A:LYS:C	1:690:A:TYR:N	10	13.99
(1,3)	1:479:A:VAL:C	1:480:A:ILE:N	1:480:A:ILE:CA	1:480:A:ILE:C	6	13.96
(1,257)	1:543:A:PHE:C	1:544:A:ASP:N	1:544:A:ASP:CA	1:544:A:ASP:C	10	13.95
(1,282)	1:682:A:HIS:N	1:682:A:HIS:CA	1:682:A:HIS:C	1:683:A:LYS:N	8	13.93
(1,56)	1:527:A:LEU:N	1:527:A:LEU:CA	1:527:A:LEU:C	1:528:A:ARG:N	3	13.92
(1,41)	1:518:A:LEU:C	1:519:A:GLN:N	1:519:A:GLN:CA	1:519:A:GLN:C	9	13.92
(1,36)	1:516:A:ARG:N	1:516:A:ARG:CA	1:516:A:ARG:C	1:517:A:GLN:N	10	13.83
(1,135)	1:617:A:THR:C	1:618:A:GLU:N	1:618:A:GLU:CA	1:618:A:GLU:C	5	13.76
(1,127)	1:607:A:PHE:C	1:608:A:VAL:N	1:608:A:VAL:CA	1:608:A:VAL:C	5	13.75
(1,198)	1:677:A:ARG:N	1:677:A:ARG:CA	1:677:A:ARG:C	1:678:A:GLN:N	10	13.7
(1,257)	1:543:A:PHE:C	1:544:A:ASP:N	1:544:A:ASP:CA	1:544:A:ASP:C	8	13.59
(1,127)	1:607:A:PHE:C	1:608:A:VAL:N	1:608:A:VAL:CA	1:608:A:VAL:C	2	13.57
(1,69)	1:551:A:LYS:C	1:552:A:LYS:N	1:552:A:LYS:CA	1:552:A:LYS:C	1	13.43
(1,198)	1:677:A:ARG:N	1:677:A:ARG:CA	1:677:A:ARG:C	1:678:A:GLN:N	8	13.37
(1,65)	1:538:A:GLN:C	1:539:A:PRO:N	1:539:A:PRO:CA	1:539:A:PRO:C	5	13.35
(1,254)	1:528:A:ARG:N	1:528:A:ARG:CA	1:528:A:ARG:C	1:529:A:LYS:N	1	13.32
(1,261)	1:583:A:GLU:C	1:584:A:GLU:N	1:584:A:GLU:CA	1:584:A:GLU:C	10	13.11
(1,254)	1:528:A:ARG:N	1:528:A:ARG:CA	1:528:A:ARG:C	1:529:A:LYS:N	2	13.07
(1,271)	1:632:A:ALA:C	1:633:A:THR:N	1:633:A:THR:CA	1:633:A:THR:C	8	13.03
(1,202)	1:679:A:GLU:N	1:679:A:GLU:CA	1:679:A:GLU:C	1:680:A:LEU:N	9	13.03
(1,127)	1:607:A:PHE:C	1:608:A:VAL:N	1:608:A:VAL:CA	1:608:A:VAL:C	4	13.01
(1,147)	1:626:A:GLN:C	1:627:A:GLU:N	1:627:A:GLU:CA	1:627:A:GLU:C	9	12.99
(1,69)	1:551:A:LYS:C	1:552:A:LYS:N	1:552:A:LYS:CA	1:552:A:LYS:C	10	12.96
(1,214)	1:691:A:ARG:N	1:691:A:ARG:CA	1:691:A:ARG:C	1:692:A:ALA:N	2	12.93
(1,271)	1:632:A:ALA:C	1:633:A:THR:N	1:633:A:THR:CA	1:633:A:THR:C	10	12.9
(1,69)	1:551:A:LYS:C	1:552:A:LYS:N	1:552:A:LYS:CA	1:552:A:LYS:C	3	12.9
(1,69)	1:551:A:LYS:C	1:552:A:LYS:N	1:552:A:LYS:CA	1:552:A:LYS:C	4	12.87
(1,36)	1:516:A:ARG:N	1:516:A:ARG:CA	1:516:A:ARG:C	1:517:A:GLN:N	8	12.87
(1,104)	1:582:A:GLN:N	1:582:A:GLN:CA	1:582:A:GLN:C	1:583:A:GLU:N	2	12.85
(1,163)	1:642:A:GLU:C	1:643:A:PHE:N	1:643:A:PHE:CA	1:643:A:PHE:C	5	12.75
(1,271)	1:632:A:ALA:C	1:633:A:THR:N	1:633:A:THR:CA	1:633:A:THR:C	4	12.66
(1,142)	1:624:A:ILE:N	1:624:A:ILE:CA	1:624:A:ILE:C	1:625:A:VAL:N	6	12.65
(1,250)	1:499:A:GLN:N	1:499:A:GLN:CA	1:499:A:GLN:C	1:500:A:ARG:N	9	12.63
(1,16)	1:492:A:PHE:N	1:492:A:PHE:CA	1:492:A:PHE:C	1:493:A:LYS:N	1	12.61
(1,8)	1:487:A:HIS:N	1:487:A:HIS:CA	1:487:A:HIS:C	1:488:A:TYR:N	2	12.54
(1,36)	1:516:A:ARG:N	1:516:A:ARG:CA	1:516:A:ARG:C	1:517:A:GLN:N	6	12.42
(1,282)	1:682:A:HIS:N	1:682:A:HIS:CA	1:682:A:HIS:C	1:683:A:LYS:N	7	12.41
(1,24)	1:498:A:GLU:N	1:498:A:GLU:CA	1:498:A:GLU:C	1:499:A:GLN:N	3	12.38
(1,69)	1:551:A:LYS:C	1:552:A:LYS:N	1:552:A:LYS:CA	1:552:A:LYS:C	9	12.36
(1,210)	1:689:A:LYS:N	1:689:A:LYS:CA	1:689:A:LYS:C	1:690:A:TYR:N	7	12.31
(1,163)	1:642:A:GLU:C	1:643:A:PHE:N	1:643:A:PHE:CA	1:643:A:PHE:C	2	12.22
(1,142)	1:624:A:ILE:N	1:624:A:ILE:CA	1:624:A:ILE:C	1:625:A:VAL:N	4	12.2
(1,271)	1:632:A:ALA:C	1:633:A:THR:N	1:633:A:THR:CA	1:633:A:THR:C	7	12.19
(1,163)	1:642:A:GLU:C	1:643:A:PHE:N	1:643:A:PHE:CA	1:643:A:PHE:C	1	12.19
(1,220)	1:696:A:LYS:N	1:696:A:LYS:CA	1:696:A:LYS:C	1:697:A:ALA:N	1	12.18
(1,163)	1:642:A:GLU:C	1:643:A:PHE:N	1:643:A:PHE:CA	1:643:A:PHE:C	10	12.15
(1,281)	1:681:A:VAL:C	1:682:A:HIS:N	1:682:A:HIS:CA	1:682:A:HIS:C	7	12.07
(1,136)	1:618:A:GLU:N	1:618:A:GLU:CA	1:618:A:GLU:C	1:619:A:SER:N	1	12.03

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,271)	1:632:A:ALA:C	1:633:A:THR:N	1:633:A:THR:CA	1:633:A:THR:C	2	11.99
(1,271)	1:632:A:ALA:C	1:633:A:THR:N	1:633:A:THR:CA	1:633:A:THR:C	5	11.99
(1,261)	1:583:A:GLU:C	1:584:A:GLU:N	1:584:A:GLU:CA	1:584:A:GLU:C	7	11.99
(1,81)	1:567:A:GLU:C	1:568:A:LYS:N	1:568:A:LYS:CA	1:568:A:LYS:C	7	11.98
(1,36)	1:516:A:ARG:N	1:516:A:ARG:CA	1:516:A:ARG:C	1:517:A:GLN:N	9	11.98
(1,214)	1:691:A:ARG:N	1:691:A:ARG:CA	1:691:A:ARG:C	1:692:A:ALA:N	7	11.94
(1,210)	1:689:A:LYS:N	1:689:A:LYS:CA	1:689:A:LYS:C	1:690:A:TYR:N	5	11.92
(1,69)	1:551:A:LYS:C	1:552:A:LYS:N	1:552:A:LYS:CA	1:552:A:LYS:C	8	11.91
(1,271)	1:632:A:ALA:C	1:633:A:THR:N	1:633:A:THR:CA	1:633:A:THR:C	1	11.9
(1,56)	1:527:A:LEU:N	1:527:A:LEU:CA	1:527:A:LEU:C	1:528:A:ARG:N	7	11.9
(1,254)	1:528:A:ARG:N	1:528:A:ARG:CA	1:528:A:ARG:C	1:529:A:LYS:N	9	11.68
(1,136)	1:618:A:GLU:N	1:618:A:GLU:CA	1:618:A:GLU:C	1:619:A:SER:N	2	11.67
(1,16)	1:492:A:PHE:N	1:492:A:PHE:CA	1:492:A:PHE:C	1:493:A:LYS:N	5	11.6
(1,64)	1:538:A:GLN:N	1:538:A:GLN:CA	1:538:A:GLN:C	1:539:A:PRO:N	6	11.59
(1,62)	1:535:A:PHE:N	1:535:A:PHE:CA	1:535:A:PHE:C	1:536:A:LYS:N	7	11.57
(1,64)	1:538:A:GLN:N	1:538:A:GLN:CA	1:538:A:GLN:C	1:539:A:PRO:N	3	11.5
(1,51)	1:524:A:LEU:C	1:525:A:ASP:N	1:525:A:ASP:CA	1:525:A:ASP:C	7	11.47
(1,36)	1:516:A:ARG:N	1:516:A:ARG:CA	1:516:A:ARG:C	1:517:A:GLN:N	5	11.42
(1,141)	1:623:A:SER:C	1:624:A:ILE:N	1:624:A:ILE:CA	1:624:A:ILE:C	10	11.4
(1,163)	1:642:A:GLU:C	1:643:A:PHE:N	1:643:A:PHE:CA	1:643:A:PHE:C	4	11.35
(1,265)	1:595:A:LYS:C	1:596:A:ALA:N	1:596:A:ALA:CA	1:596:A:ALA:C	6	11.21
(1,81)	1:567:A:GLU:C	1:568:A:LYS:N	1:568:A:LYS:CA	1:568:A:LYS:C	2	11.21
(1,210)	1:689:A:LYS:N	1:689:A:LYS:CA	1:689:A:LYS:C	1:690:A:TYR:N	6	11.16
(1,261)	1:583:A:GLU:C	1:584:A:GLU:N	1:584:A:GLU:CA	1:584:A:GLU:C	5	11.09
(1,136)	1:618:A:GLU:N	1:618:A:GLU:CA	1:618:A:GLU:C	1:619:A:SER:N	4	11.06
(1,81)	1:567:A:GLU:C	1:568:A:LYS:N	1:568:A:LYS:CA	1:568:A:LYS:C	10	11.05
(1,282)	1:682:A:HIS:N	1:682:A:HIS:CA	1:682:A:HIS:C	1:683:A:LYS:N	4	11.04
(1,62)	1:535:A:PHE:N	1:535:A:PHE:CA	1:535:A:PHE:C	1:536:A:LYS:N	2	11.01
(1,220)	1:696:A:LYS:N	1:696:A:LYS:CA	1:696:A:LYS:C	1:697:A:ALA:N	4	10.98
(1,163)	1:642:A:GLU:C	1:643:A:PHE:N	1:643:A:PHE:CA	1:643:A:PHE:C	8	10.98
(1,163)	1:642:A:GLU:C	1:643:A:PHE:N	1:643:A:PHE:CA	1:643:A:PHE:C	6	10.93
(1,271)	1:632:A:ALA:C	1:633:A:THR:N	1:633:A:THR:CA	1:633:A:THR:C	3	10.92
(1,253)	1:527:A:LEU:C	1:528:A:ARG:N	1:528:A:ARG:CA	1:528:A:ARG:C	1	10.92
(1,256)	1:537:A:ALA:N	1:537:A:ALA:CA	1:537:A:ALA:C	1:538:A:GLN:N	4	10.9
(1,136)	1:618:A:GLU:N	1:618:A:GLU:CA	1:618:A:GLU:C	1:619:A:SER:N	8	10.85
(1,271)	1:632:A:ALA:C	1:633:A:THR:N	1:633:A:THR:CA	1:633:A:THR:C	9	10.84
(1,136)	1:618:A:GLU:N	1:618:A:GLU:CA	1:618:A:GLU:C	1:619:A:SER:N	10	10.81
(1,141)	1:623:A:SER:C	1:624:A:ILE:N	1:624:A:ILE:CA	1:624:A:ILE:C	6	10.8
(1,127)	1:607:A:PHE:C	1:608:A:VAL:N	1:608:A:VAL:CA	1:608:A:VAL:C	6	10.8
(1,41)	1:518:A:LEU:C	1:519:A:GLN:N	1:519:A:GLN:CA	1:519:A:GLN:C	3	10.77
(1,142)	1:624:A:ILE:N	1:624:A:ILE:CA	1:624:A:ILE:C	1:625:A:VAL:N	2	10.76
(1,281)	1:681:A:VAL:C	1:682:A:HIS:N	1:682:A:HIS:CA	1:682:A:HIS:C	4	10.73
(1,64)	1:538:A:GLN:N	1:538:A:GLN:CA	1:538:A:GLN:C	1:539:A:PRO:N	4	10.65
(1,22)	1:497:A:VAL:N	1:497:A:VAL:CA	1:497:A:VAL:C	1:498:A:GLU:N	5	10.65
(1,256)	1:537:A:ALA:N	1:537:A:ALA:CA	1:537:A:ALA:C	1:538:A:GLN:N	8	10.64
(1,214)	1:691:A:ARG:N	1:691:A:ARG:CA	1:691:A:ARG:C	1:692:A:ALA:N	4	10.61
(1,220)	1:696:A:LYS:N	1:696:A:LYS:CA	1:696:A:LYS:C	1:697:A:ALA:N	8	10.6
(1,142)	1:624:A:ILE:N	1:624:A:ILE:CA	1:624:A:ILE:C	1:625:A:VAL:N	7	10.59
(1,127)	1:607:A:PHE:C	1:608:A:VAL:N	1:608:A:VAL:CA	1:608:A:VAL:C	10	10.55
(1,142)	1:624:A:ILE:N	1:624:A:ILE:CA	1:624:A:ILE:C	1:625:A:VAL:N	10	10.48
(1,197)	1:676:A:LEU:C	1:677:A:ARG:N	1:677:A:ARG:CA	1:677:A:ARG:C	9	10.44

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,67)	1:539:A:PRO:C	1:540:A:LEU:N	1:540:A:LEU:CA	1:540:A:LEU:C	9	10.43
(1,64)	1:538:A:GLN:N	1:538:A:GLN:CA	1:538:A:GLN:C	1:539:A:PRO:N	9	10.41
(1,64)	1:538:A:GLN:N	1:538:A:GLN:CA	1:538:A:GLN:C	1:539:A:PRO:N	7	10.36
(1,199)	1:677:A:ARG:C	1:678:A:GLN:N	1:678:A:GLN:CA	1:678:A:GLN:C	4	10.35
(1,163)	1:642:A:GLU:C	1:643:A:PHE:N	1:643:A:PHE:CA	1:643:A:PHE:C	7	10.32
(1,142)	1:624:A:ILE:N	1:624:A:ILE:CA	1:624:A:ILE:C	1:625:A:VAL:N	1	10.32
(1,56)	1:527:A:LEU:N	1:527:A:LEU:CA	1:527:A:LEU:C	1:528:A:ARG:N	8	10.31
(1,265)	1:595:A:LYS:C	1:596:A:ALA:N	1:596:A:ALA:CA	1:596:A:ALA:C	10	10.29
(1,203)	1:683:A:LYS:C	1:684:A:ALA:N	1:684:A:ALA:CA	1:684:A:ALA:C	1	10.18
(1,253)	1:527:A:LEU:C	1:528:A:ARG:N	1:528:A:ARG:CA	1:528:A:ARG:C	2	10.13
(1,136)	1:618:A:GLU:N	1:618:A:GLU:CA	1:618:A:GLU:C	1:619:A:SER:N	7	10.13
(1,163)	1:642:A:GLU:C	1:643:A:PHE:N	1:643:A:PHE:CA	1:643:A:PHE:C	3	10.04
(1,249)	1:498:A:GLU:C	1:499:A:GLN:N	1:499:A:GLN:CA	1:499:A:GLN:C	1	10.03
(1,199)	1:677:A:ARG:C	1:678:A:GLN:N	1:678:A:GLN:CA	1:678:A:GLN:C	1	10.03
(1,69)	1:551:A:LYS:C	1:552:A:LYS:N	1:552:A:LYS:CA	1:552:A:LYS:C	5	10.02
(1,214)	1:691:A:ARG:N	1:691:A:ARG:CA	1:691:A:ARG:C	1:692:A:ALA:N	3	10.0
(1,255)	1:536:A:LYS:C	1:537:A:ALA:N	1:537:A:ALA:CA	1:537:A:ALA:C	6	9.95
(1,142)	1:624:A:ILE:N	1:624:A:ILE:CA	1:624:A:ILE:C	1:625:A:VAL:N	8	9.93
(1,220)	1:696:A:LYS:N	1:696:A:LYS:CA	1:696:A:LYS:C	1:697:A:ALA:N	7	9.92
(1,81)	1:567:A:GLU:C	1:568:A:LYS:N	1:568:A:LYS:CA	1:568:A:LYS:C	3	9.91
(1,220)	1:696:A:LYS:N	1:696:A:LYS:CA	1:696:A:LYS:C	1:697:A:ALA:N	9	9.84
(1,131)	1:615:A:SER:C	1:616:A:LEU:N	1:616:A:LEU:CA	1:616:A:LEU:C	5	9.84
(1,81)	1:567:A:GLU:C	1:568:A:LYS:N	1:568:A:LYS:CA	1:568:A:LYS:C	6	9.81
(1,163)	1:642:A:GLU:C	1:643:A:PHE:N	1:643:A:PHE:CA	1:643:A:PHE:C	9	9.8
(1,281)	1:681:A:VAL:C	1:682:A:HIS:N	1:682:A:HIS:CA	1:682:A:HIS:C	6	9.79
(1,225)	1:699:A:ASP:C	1:700:A:VAL:N	1:700:A:VAL:CA	1:700:A:VAL:C	4	9.79
(1,81)	1:567:A:GLU:C	1:568:A:LYS:N	1:568:A:LYS:CA	1:568:A:LYS:C	5	9.78
(1,81)	1:567:A:GLU:C	1:568:A:LYS:N	1:568:A:LYS:CA	1:568:A:LYS:C	9	9.69
(1,65)	1:538:A:GLN:C	1:539:A:PRO:N	1:539:A:PRO:CA	1:539:A:PRO:C	7	9.66
(1,36)	1:516:A:ARG:N	1:516:A:ARG:CA	1:516:A:ARG:C	1:517:A:GLN:N	2	9.66
(1,256)	1:537:A:ALA:N	1:537:A:ALA:CA	1:537:A:ALA:C	1:538:A:GLN:N	9	9.6
(1,51)	1:524:A:LEU:C	1:525:A:ASP:N	1:525:A:ASP:CA	1:525:A:ASP:C	3	9.6
(1,208)	1:686:A:PRO:N	1:686:A:PRO:CA	1:686:A:PRO:C	1:687:A:ILE:N	3	9.59
(1,226)	1:700:A:VAL:N	1:700:A:VAL:CA	1:700:A:VAL:C	1:701:A:PRO:N	6	9.56
(1,199)	1:677:A:ARG:C	1:678:A:GLN:N	1:678:A:GLN:CA	1:678:A:GLN:C	8	9.49
(1,142)	1:624:A:ILE:N	1:624:A:ILE:CA	1:624:A:ILE:C	1:625:A:VAL:N	3	9.42
(1,261)	1:583:A:GLU:C	1:584:A:GLU:N	1:584:A:GLU:CA	1:584:A:GLU:C	2	9.38
(1,17)	1:492:A:PHE:C	1:493:A:LYS:N	1:493:A:LYS:CA	1:493:A:LYS:C	4	9.37
(1,220)	1:696:A:LYS:N	1:696:A:LYS:CA	1:696:A:LYS:C	1:697:A:ALA:N	10	9.35
(1,203)	1:683:A:LYS:C	1:684:A:ALA:N	1:684:A:ALA:CA	1:684:A:ALA:C	2	9.32
(1,65)	1:538:A:GLN:C	1:539:A:PRO:N	1:539:A:PRO:CA	1:539:A:PRO:C	10	9.27
(1,250)	1:499:A:GLN:N	1:499:A:GLN:CA	1:499:A:GLN:C	1:500:A:ARG:N	8	9.25
(1,16)	1:492:A:PHE:N	1:492:A:PHE:CA	1:492:A:PHE:C	1:493:A:LYS:N	8	9.24
(1,199)	1:677:A:ARG:C	1:678:A:GLN:N	1:678:A:GLN:CA	1:678:A:GLN:C	6	9.22
(1,281)	1:681:A:VAL:C	1:682:A:HIS:N	1:682:A:HIS:CA	1:682:A:HIS:C	3	9.21
(1,15)	1:491:A:PRO:C	1:492:A:PHE:N	1:492:A:PHE:CA	1:492:A:PHE:C	3	9.21
(1,265)	1:595:A:LYS:C	1:596:A:ALA:N	1:596:A:ALA:CA	1:596:A:ALA:C	5	9.18
(1,81)	1:567:A:GLU:C	1:568:A:LYS:N	1:568:A:LYS:CA	1:568:A:LYS:C	4	9.17
(1,203)	1:683:A:LYS:C	1:684:A:ALA:N	1:684:A:ALA:CA	1:684:A:ALA:C	8	9.11
(1,281)	1:681:A:VAL:C	1:682:A:HIS:N	1:682:A:HIS:CA	1:682:A:HIS:C	5	9.09
(1,127)	1:607:A:PHE:C	1:608:A:VAL:N	1:608:A:VAL:CA	1:608:A:VAL:C	8	9.07

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,208)	1:686:A:PRO:N	1:686:A:PRO:CA	1:686:A:PRO:C	1:687:A:ILE:N	9	9.04
(1,81)	1:567:A:GLU:C	1:568:A:LYS:N	1:568:A:LYS:CA	1:568:A:LYS:C	8	9.03
(1,281)	1:681:A:VAL:C	1:682:A:HIS:N	1:682:A:HIS:CA	1:682:A:HIS:C	10	9.02
(1,220)	1:696:A:LYS:N	1:696:A:LYS:CA	1:696:A:LYS:C	1:697:A:ALA:N	2	9.02
(1,281)	1:681:A:VAL:C	1:682:A:HIS:N	1:682:A:HIS:CA	1:682:A:HIS:C	2	8.95
(1,24)	1:498:A:GLU:N	1:498:A:GLU:CA	1:498:A:GLU:C	1:499:A:GLN:N	6	8.95
(1,261)	1:583:A:GLU:C	1:584:A:GLU:N	1:584:A:GLU:CA	1:584:A:GLU:C	1	8.92
(1,203)	1:683:A:LYS:C	1:684:A:ALA:N	1:684:A:ALA:CA	1:684:A:ALA:C	9	8.91
(1,65)	1:538:A:GLN:C	1:539:A:PRO:N	1:539:A:PRO:CA	1:539:A:PRO:C	2	8.88
(1,203)	1:683:A:LYS:C	1:684:A:ALA:N	1:684:A:ALA:CA	1:684:A:ALA:C	4	8.86
(1,261)	1:583:A:GLU:C	1:584:A:GLU:N	1:584:A:GLU:CA	1:584:A:GLU:C	8	8.82
(1,142)	1:624:A:ILE:N	1:624:A:ILE:CA	1:624:A:ILE:C	1:625:A:VAL:N	5	8.76
(1,214)	1:691:A:ARG:N	1:691:A:ARG:CA	1:691:A:ARG:C	1:692:A:ALA:N	1	8.61
(1,37)	1:516:A:ARG:C	1:517:A:GLN:N	1:517:A:GLN:CA	1:517:A:GLN:C	4	8.61
(1,226)	1:700:A:VAL:N	1:700:A:VAL:CA	1:700:A:VAL:C	1:701:A:PRO:N	5	8.6
(1,81)	1:567:A:GLU:C	1:568:A:LYS:N	1:568:A:LYS:CA	1:568:A:LYS:C	1	8.6
(1,254)	1:528:A:ARG:N	1:528:A:ARG:CA	1:528:A:ARG:C	1:529:A:LYS:N	4	8.46
(1,43)	1:519:A:GLN:C	1:520:A:LYS:N	1:520:A:LYS:CA	1:520:A:LYS:C	9	8.43
(1,37)	1:516:A:ARG:C	1:517:A:GLN:N	1:517:A:GLN:CA	1:517:A:GLN:C	6	8.42
(1,199)	1:677:A:ARG:C	1:678:A:GLN:N	1:678:A:GLN:CA	1:678:A:GLN:C	7	8.4
(1,36)	1:516:A:ARG:N	1:516:A:ARG:CA	1:516:A:ARG:C	1:517:A:GLN:N	1	8.39
(1,199)	1:677:A:ARG:C	1:678:A:GLN:N	1:678:A:GLN:CA	1:678:A:GLN:C	5	8.38
(1,162)	1:641:A:GLN:N	1:641:A:GLN:CA	1:641:A:GLN:C	1:642:A:GLU:N	3	8.37
(1,254)	1:528:A:ARG:N	1:528:A:ARG:CA	1:528:A:ARG:C	1:529:A:LYS:N	8	8.29
(1,19)	1:495:A:LYS:C	1:496:A:LEU:N	1:496:A:LEU:CA	1:496:A:LEU:C	4	8.23
(1,192)	1:674:A:SER:N	1:674:A:SER:CA	1:674:A:SER:C	1:675:A:GLN:N	9	8.14
(1,253)	1:527:A:LEU:C	1:528:A:ARG:N	1:528:A:ARG:CA	1:528:A:ARG:C	10	8.11
(1,253)	1:527:A:LEU:C	1:528:A:ARG:N	1:528:A:ARG:CA	1:528:A:ARG:C	9	8.06
(1,261)	1:583:A:GLU:C	1:584:A:GLU:N	1:584:A:GLU:CA	1:584:A:GLU:C	4	8.04
(1,250)	1:499:A:GLN:N	1:499:A:GLN:CA	1:499:A:GLN:C	1:500:A:ARG:N	4	8.02
(1,261)	1:583:A:GLU:C	1:584:A:GLU:N	1:584:A:GLU:CA	1:584:A:GLU:C	6	8.0
(1,20)	1:496:A:LEU:N	1:496:A:LEU:CA	1:496:A:LEU:C	1:497:A:VAL:N	4	7.96
(1,136)	1:618:A:GLU:N	1:618:A:GLU:CA	1:618:A:GLU:C	1:619:A:SER:N	6	7.93
(1,203)	1:683:A:LYS:C	1:684:A:ALA:N	1:684:A:ALA:CA	1:684:A:ALA:C	3	7.9
(1,149)	1:627:A:GLU:C	1:628:A:GLY:N	1:628:A:GLY:CA	1:628:A:GLY:C	3	7.89
(1,213)	1:690:A:TYR:C	1:691:A:ARG:N	1:691:A:ARG:CA	1:691:A:ARG:C	7	7.87
(1,59)	1:532:A:VAL:C	1:533:A:PRO:N	1:533:A:PRO:CA	1:533:A:PRO:C	10	7.87
(1,8)	1:487:A:HIS:N	1:487:A:HIS:CA	1:487:A:HIS:C	1:488:A:TYR:N	5	7.86
(1,15)	1:491:A:PRO:C	1:492:A:PHE:N	1:492:A:PHE:CA	1:492:A:PHE:C	6	7.85
(1,281)	1:681:A:VAL:C	1:682:A:HIS:N	1:682:A:HIS:CA	1:682:A:HIS:C	1	7.83
(1,58)	1:532:A:VAL:N	1:532:A:VAL:CA	1:532:A:VAL:C	1:533:A:PRO:N	8	7.82
(1,19)	1:495:A:LYS:C	1:496:A:LEU:N	1:496:A:LEU:CA	1:496:A:LEU:C	1	7.76
(1,66)	1:539:A:PRO:N	1:539:A:PRO:CA	1:539:A:PRO:C	1:540:A:LEU:N	7	7.75
(1,65)	1:538:A:GLN:C	1:539:A:PRO:N	1:539:A:PRO:CA	1:539:A:PRO:C	4	7.74
(1,62)	1:535:A:PHE:N	1:535:A:PHE:CA	1:535:A:PHE:C	1:536:A:LYS:N	1	7.74
(1,208)	1:686:A:PRO:N	1:686:A:PRO:CA	1:686:A:PRO:C	1:687:A:ILE:N	7	7.7
(1,37)	1:516:A:ARG:C	1:517:A:GLN:N	1:517:A:GLN:CA	1:517:A:GLN:C	10	7.65
(1,22)	1:497:A:VAL:N	1:497:A:VAL:CA	1:497:A:VAL:C	1:498:A:GLU:N	6	7.64
(1,51)	1:524:A:LEU:C	1:525:A:ASP:N	1:525:A:ASP:CA	1:525:A:ASP:C	9	7.59
(1,253)	1:527:A:LEU:C	1:528:A:ARG:N	1:528:A:ARG:CA	1:528:A:ARG:C	4	7.56
(1,214)	1:691:A:ARG:N	1:691:A:ARG:CA	1:691:A:ARG:C	1:692:A:ALA:N	9	7.56

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,203)	1:683:A:LYS:C	1:684:A:ALA:N	1:684:A:ALA:CA	1:684:A:ALA:C	7	7.56
(1,203)	1:683:A:LYS:C	1:684:A:ALA:N	1:684:A:ALA:CA	1:684:A:ALA:C	10	7.52
(1,256)	1:537:A:ALA:N	1:537:A:ALA:CA	1:537:A:ALA:C	1:538:A:GLN:N	2	7.46
(1,137)	1:618:A:GLU:C	1:619:A:SER:N	1:619:A:SER:CA	1:619:A:SER:C	2	7.46
(1,253)	1:527:A:LEU:C	1:528:A:ARG:N	1:528:A:ARG:CA	1:528:A:ARG:C	3	7.45
(1,199)	1:677:A:ARG:C	1:678:A:GLN:N	1:678:A:GLN:CA	1:678:A:GLN:C	2	7.44
(1,59)	1:532:A:VAL:C	1:533:A:PRO:N	1:533:A:PRO:CA	1:533:A:PRO:C	6	7.43
(1,59)	1:532:A:VAL:C	1:533:A:PRO:N	1:533:A:PRO:CA	1:533:A:PRO:C	3	7.38
(1,67)	1:539:A:PRO:C	1:540:A:LEU:N	1:540:A:LEU:CA	1:540:A:LEU:C	2	7.36
(1,24)	1:498:A:GLU:N	1:498:A:GLU:CA	1:498:A:GLU:C	1:499:A:GLN:N	7	7.31
(1,218)	1:695:A:VAL:N	1:695:A:VAL:CA	1:695:A:VAL:C	1:696:A:LYS:N	3	7.28
(1,208)	1:686:A:PRO:N	1:686:A:PRO:CA	1:686:A:PRO:C	1:687:A:ILE:N	8	7.16
(1,265)	1:595:A:LYS:C	1:596:A:ALA:N	1:596:A:ALA:CA	1:596:A:ALA:C	7	7.15
(1,208)	1:686:A:PRO:N	1:686:A:PRO:CA	1:686:A:PRO:C	1:687:A:ILE:N	2	7.1
(1,208)	1:686:A:PRO:N	1:686:A:PRO:CA	1:686:A:PRO:C	1:687:A:ILE:N	4	7.08
(1,162)	1:641:A:GLN:N	1:641:A:GLN:CA	1:641:A:GLN:C	1:642:A:GLU:N	7	7.08
(1,253)	1:527:A:LEU:C	1:528:A:ARG:N	1:528:A:ARG:CA	1:528:A:ARG:C	6	7.07
(1,254)	1:528:A:ARG:N	1:528:A:ARG:CA	1:528:A:ARG:C	1:529:A:LYS:N	3	7.06
(1,249)	1:498:A:GLU:C	1:499:A:GLN:N	1:499:A:GLN:CA	1:499:A:GLN:C	10	7.04
(1,208)	1:686:A:PRO:N	1:686:A:PRO:CA	1:686:A:PRO:C	1:687:A:ILE:N	1	7.02
(1,208)	1:686:A:PRO:N	1:686:A:PRO:CA	1:686:A:PRO:C	1:687:A:ILE:N	10	7.02
(1,213)	1:690:A:TYR:C	1:691:A:ARG:N	1:691:A:ARG:CA	1:691:A:ARG:C	1	7.01
(1,162)	1:641:A:GLN:N	1:641:A:GLN:CA	1:641:A:GLN:C	1:642:A:GLU:N	5	7.01
(1,36)	1:516:A:ARG:N	1:516:A:ARG:CA	1:516:A:ARG:C	1:517:A:GLN:N	3	7.01
(1,137)	1:618:A:GLU:C	1:619:A:SER:N	1:619:A:SER:CA	1:619:A:SER:C	1	7.0
(1,136)	1:618:A:GLU:N	1:618:A:GLU:CA	1:618:A:GLU:C	1:619:A:SER:N	5	7.0
(1,64)	1:538:A:GLN:N	1:538:A:GLN:CA	1:538:A:GLN:C	1:539:A:PRO:N	1	6.98
(1,137)	1:618:A:GLU:C	1:619:A:SER:N	1:619:A:SER:CA	1:619:A:SER:C	10	6.92
(1,199)	1:677:A:ARG:C	1:678:A:GLN:N	1:678:A:GLN:CA	1:678:A:GLN:C	10	6.91
(1,138)	1:619:A:SER:N	1:619:A:SER:CA	1:619:A:SER:C	1:620:A:LEU:N	10	6.84
(1,256)	1:537:A:ALA:N	1:537:A:ALA:CA	1:537:A:ALA:C	1:538:A:GLN:N	1	6.82
(1,8)	1:487:A:HIS:N	1:487:A:HIS:CA	1:487:A:HIS:C	1:488:A:TYR:N	3	6.77
(1,8)	1:487:A:HIS:N	1:487:A:HIS:CA	1:487:A:HIS:C	1:488:A:TYR:N	6	6.75
(1,64)	1:538:A:GLN:N	1:538:A:GLN:CA	1:538:A:GLN:C	1:539:A:PRO:N	5	6.71
(1,142)	1:624:A:ILE:N	1:624:A:ILE:CA	1:624:A:ILE:C	1:625:A:VAL:N	9	6.66
(1,59)	1:532:A:VAL:C	1:533:A:PRO:N	1:533:A:PRO:CA	1:533:A:PRO:C	4	6.64
(1,137)	1:618:A:GLU:C	1:619:A:SER:N	1:619:A:SER:CA	1:619:A:SER:C	8	6.56
(1,162)	1:641:A:GLN:N	1:641:A:GLN:CA	1:641:A:GLN:C	1:642:A:GLU:N	8	6.55
(1,153)	1:635:A:LYS:C	1:636:A:ARG:N	1:636:A:ARG:CA	1:636:A:ARG:C	10	6.49
(1,213)	1:690:A:TYR:C	1:691:A:ARG:N	1:691:A:ARG:CA	1:691:A:ARG:C	4	6.48
(1,197)	1:676:A:LEU:C	1:677:A:ARG:N	1:677:A:ARG:CA	1:677:A:ARG:C	7	6.46
(1,162)	1:641:A:GLN:N	1:641:A:GLN:CA	1:641:A:GLN:C	1:642:A:GLU:N	9	6.45
(1,141)	1:623:A:SER:C	1:624:A:ILE:N	1:624:A:ILE:CA	1:624:A:ILE:C	9	6.45
(1,137)	1:618:A:GLU:C	1:619:A:SER:N	1:619:A:SER:CA	1:619:A:SER:C	4	6.43
(1,281)	1:681:A:VAL:C	1:682:A:HIS:N	1:682:A:HIS:CA	1:682:A:HIS:C	8	6.41
(1,16)	1:492:A:PHE:N	1:492:A:PHE:CA	1:492:A:PHE:C	1:493:A:LYS:N	7	6.4
(1,197)	1:676:A:LEU:C	1:677:A:ARG:N	1:677:A:ARG:CA	1:677:A:ARG:C	8	6.35
(1,162)	1:641:A:GLN:N	1:641:A:GLN:CA	1:641:A:GLN:C	1:642:A:GLU:N	6	6.33
(1,62)	1:535:A:PHE:N	1:535:A:PHE:CA	1:535:A:PHE:C	1:536:A:LYS:N	10	6.33
(1,60)	1:533:A:PRO:N	1:533:A:PRO:CA	1:533:A:PRO:C	1:534:A:LYS:N	5	6.33
(1,141)	1:623:A:SER:C	1:624:A:ILE:N	1:624:A:ILE:CA	1:624:A:ILE:C	5	6.31

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,40)	1:518:A:LEU:N	1:518:A:LEU:CA	1:518:A:LEU:C	1:519:A:GLN:N	9	6.31
(1,265)	1:595:A:LYS:C	1:596:A:ALA:N	1:596:A:ALA:CA	1:596:A:ALA:C	3	6.3
(1,140)	1:623:A:SER:N	1:623:A:SER:CA	1:623:A:SER:C	1:624:A:ILE:N	8	6.27
(1,153)	1:635:A:LYS:C	1:636:A:ARG:N	1:636:A:ARG:CA	1:636:A:ARG:C	3	6.22
(1,197)	1:676:A:LEU:C	1:677:A:ARG:N	1:677:A:ARG:CA	1:677:A:ARG:C	2	6.2
(1,64)	1:538:A:GLN:N	1:538:A:GLN:CA	1:538:A:GLN:C	1:539:A:PRO:N	10	6.18
(1,138)	1:619:A:SER:N	1:619:A:SER:CA	1:619:A:SER:C	1:620:A:LEU:N	7	6.17
(1,20)	1:496:A:LEU:N	1:496:A:LEU:CA	1:496:A:LEU:C	1:497:A:VAL:N	1	6.13
(1,225)	1:699:A:ASP:C	1:700:A:VAL:N	1:700:A:VAL:CA	1:700:A:VAL:C	9	6.11
(1,197)	1:676:A:LEU:C	1:677:A:ARG:N	1:677:A:ARG:CA	1:677:A:ARG:C	3	6.08
(1,153)	1:635:A:LYS:C	1:636:A:ARG:N	1:636:A:ARG:CA	1:636:A:ARG:C	6	6.05
(1,100)	1:580:A:GLN:N	1:580:A:GLN:CA	1:580:A:GLN:C	1:581:A:ILE:N	6	6.04
(1,137)	1:618:A:GLU:C	1:619:A:SER:N	1:619:A:SER:CA	1:619:A:SER:C	7	6.03
(1,225)	1:699:A:ASP:C	1:700:A:VAL:N	1:700:A:VAL:CA	1:700:A:VAL:C	10	6.01
(1,140)	1:623:A:SER:N	1:623:A:SER:CA	1:623:A:SER:C	1:624:A:ILE:N	1	5.99
(1,37)	1:516:A:ARG:C	1:517:A:GLN:N	1:517:A:GLN:CA	1:517:A:GLN:C	5	5.95
(1,37)	1:516:A:ARG:C	1:517:A:GLN:N	1:517:A:GLN:CA	1:517:A:GLN:C	7	5.93
(1,86)	1:573:A:LYS:N	1:573:A:LYS:CA	1:573:A:LYS:C	1:574:A:LEU:N	8	5.84
(1,162)	1:641:A:GLN:N	1:641:A:GLN:CA	1:641:A:GLN:C	1:642:A:GLU:N	4	5.83
(1,108)	1:585:A:LEU:N	1:585:A:LEU:CA	1:585:A:LEU:C	1:586:A:LYS:N	5	5.81
(1,59)	1:532:A:VAL:C	1:533:A:PRO:N	1:533:A:PRO:CA	1:533:A:PRO:C	2	5.78
(1,43)	1:519:A:GLN:C	1:520:A:LYS:N	1:520:A:LYS:CA	1:520:A:LYS:C	3	5.77
(1,66)	1:539:A:PRO:N	1:539:A:PRO:CA	1:539:A:PRO:C	1:540:A:LEU:N	2	5.76
(1,249)	1:498:A:GLU:C	1:499:A:GLN:N	1:499:A:GLN:CA	1:499:A:GLN:C	3	5.75
(1,24)	1:498:A:GLU:N	1:498:A:GLU:CA	1:498:A:GLU:C	1:499:A:GLN:N	5	5.69
(1,86)	1:573:A:LYS:N	1:573:A:LYS:CA	1:573:A:LYS:C	1:574:A:LEU:N	4	5.66
(1,256)	1:537:A:ALA:N	1:537:A:ALA:CA	1:537:A:ALA:C	1:538:A:GLN:N	10	5.64
(1,59)	1:532:A:VAL:C	1:533:A:PRO:N	1:533:A:PRO:CA	1:533:A:PRO:C	9	5.62
(1,8)	1:487:A:HIS:N	1:487:A:HIS:CA	1:487:A:HIS:C	1:488:A:TYR:N	4	5.62
(1,30)	1:508:A:SER:N	1:508:A:SER:CA	1:508:A:SER:C	1:509:A:PHE:N	8	5.61
(1,19)	1:495:A:LYS:C	1:496:A:LEU:N	1:496:A:LEU:CA	1:496:A:LEU:C	2	5.6
(1,20)	1:496:A:LEU:N	1:496:A:LEU:CA	1:496:A:LEU:C	1:497:A:VAL:N	2	5.59
(1,203)	1:683:A:LYS:C	1:684:A:ALA:N	1:684:A:ALA:CA	1:684:A:ALA:C	6	5.58
(1,138)	1:619:A:SER:N	1:619:A:SER:CA	1:619:A:SER:C	1:620:A:LEU:N	4	5.54
(1,250)	1:499:A:GLN:N	1:499:A:GLN:CA	1:499:A:GLN:C	1:500:A:ARG:N	10	5.51
(1,65)	1:538:A:GLN:C	1:539:A:PRO:N	1:539:A:PRO:CA	1:539:A:PRO:C	1	5.49
(1,136)	1:618:A:GLU:N	1:618:A:GLU:CA	1:618:A:GLU:C	1:619:A:SER:N	3	5.45
(1,255)	1:536:A:LYS:C	1:537:A:ALA:N	1:537:A:ALA:CA	1:537:A:ALA:C	7	5.42
(1,108)	1:585:A:LEU:N	1:585:A:LEU:CA	1:585:A:LEU:C	1:586:A:LYS:N	4	5.42
(1,218)	1:695:A:VAL:N	1:695:A:VAL:CA	1:695:A:VAL:C	1:696:A:LYS:N	7	5.41
(1,192)	1:674:A:SER:N	1:674:A:SER:CA	1:674:A:SER:C	1:675:A:GLN:N	3	5.41
(1,150)	1:628:A:GLY:N	1:628:A:GLY:CA	1:628:A:GLY:C	1:629:A:PHE:N	6	5.41
(1,37)	1:516:A:ARG:C	1:517:A:GLN:N	1:517:A:GLN:CA	1:517:A:GLN:C	2	5.41
(1,162)	1:641:A:GLN:N	1:641:A:GLN:CA	1:641:A:GLN:C	1:642:A:GLU:N	10	5.4
(1,225)	1:699:A:ASP:C	1:700:A:VAL:N	1:700:A:VAL:CA	1:700:A:VAL:C	8	5.37
(1,8)	1:487:A:HIS:N	1:487:A:HIS:CA	1:487:A:HIS:C	1:488:A:TYR:N	1	5.32
(1,197)	1:676:A:LEU:C	1:677:A:ARG:N	1:677:A:ARG:CA	1:677:A:ARG:C	10	5.3
(1,184)	1:653:A:GLN:N	1:653:A:GLN:CA	1:653:A:GLN:C	1:654:A:LYS:N	7	5.28
(1,140)	1:623:A:SER:N	1:623:A:SER:CA	1:623:A:SER:C	1:624:A:ILE:N	2	5.27
(1,22)	1:497:A:VAL:N	1:497:A:VAL:CA	1:497:A:VAL:C	1:498:A:GLU:N	1	5.27
(1,162)	1:641:A:GLN:N	1:641:A:GLN:CA	1:641:A:GLN:C	1:642:A:GLU:N	2	5.26

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,213)	1:690:A:TYR:C	1:691:A:ARG:N	1:691:A:ARG:CA	1:691:A:ARG:C	9	5.24
(1,153)	1:635:A:LYS:C	1:636:A:ARG:N	1:636:A:ARG:CA	1:636:A:ARG:C	7	5.24
(1,64)	1:538:A:GLN:N	1:538:A:GLN:CA	1:538:A:GLN:C	1:539:A:PRO:N	2	5.24
(1,140)	1:623:A:SER:N	1:623:A:SER:CA	1:623:A:SER:C	1:624:A:ILE:N	7	5.23
(1,100)	1:580:A:GLN:N	1:580:A:GLN:CA	1:580:A:GLN:C	1:581:A:ILE:N	5	5.19
(1,162)	1:641:A:GLN:N	1:641:A:GLN:CA	1:641:A:GLN:C	1:642:A:GLU:N	1	5.18
(1,138)	1:619:A:SER:N	1:619:A:SER:CA	1:619:A:SER:C	1:620:A:LEU:N	1	5.18
(1,225)	1:699:A:ASP:C	1:700:A:VAL:N	1:700:A:VAL:CA	1:700:A:VAL:C	2	5.14
(1,225)	1:699:A:ASP:C	1:700:A:VAL:N	1:700:A:VAL:CA	1:700:A:VAL:C	1	5.11
(1,37)	1:516:A:ARG:C	1:517:A:GLN:N	1:517:A:GLN:CA	1:517:A:GLN:C	8	5.11
(1,218)	1:695:A:VAL:N	1:695:A:VAL:CA	1:695:A:VAL:C	1:696:A:LYS:N	9	5.1
(1,261)	1:583:A:GLU:C	1:584:A:GLU:N	1:584:A:GLU:CA	1:584:A:GLU:C	9	5.07
(1,67)	1:539:A:PRO:C	1:540:A:LEU:N	1:540:A:LEU:CA	1:540:A:LEU:C	5	5.07
(1,109)	1:591:A:MET:C	1:592:A:VAL:N	1:592:A:VAL:CA	1:592:A:VAL:C	9	5.05
(1,125)	1:605:A:GLU:C	1:606:A:PRO:N	1:606:A:PRO:CA	1:606:A:PRO:C	5	5.04
(1,256)	1:537:A:ALA:N	1:537:A:ALA:CA	1:537:A:ALA:C	1:538:A:GLN:N	3	5.0
(1,218)	1:695:A:VAL:N	1:695:A:VAL:CA	1:695:A:VAL:C	1:696:A:LYS:N	4	4.96
(1,141)	1:623:A:SER:C	1:624:A:ILE:N	1:624:A:ILE:CA	1:624:A:ILE:C	3	4.96
(1,138)	1:619:A:SER:N	1:619:A:SER:CA	1:619:A:SER:C	1:620:A:LEU:N	8	4.95
(1,203)	1:683:A:LYS:C	1:684:A:ALA:N	1:684:A:ALA:CA	1:684:A:ALA:C	5	4.94
(1,197)	1:676:A:LEU:C	1:677:A:ARG:N	1:677:A:ARG:CA	1:677:A:ARG:C	6	4.94
(1,14)	1:491:A:PRO:N	1:491:A:PRO:CA	1:491:A:PRO:C	1:492:A:PHE:N	10	4.92
(1,232)	1:703:A:THR:N	1:703:A:THR:CA	1:703:A:THR:C	1:704:A:VAL:N	2	4.9
(1,153)	1:635:A:LYS:C	1:636:A:ARG:N	1:636:A:ARG:CA	1:636:A:ARG:C	4	4.9
(1,258)	1:544:A:ASP:N	1:544:A:ASP:CA	1:544:A:ASP:C	1:545:A:ASN:N	2	4.89
(1,61)	1:534:A:LYS:C	1:535:A:PHE:N	1:535:A:PHE:CA	1:535:A:PHE:C	3	4.87
(1,136)	1:618:A:GLU:N	1:618:A:GLU:CA	1:618:A:GLU:C	1:619:A:SER:N	9	4.83
(1,104)	1:582:A:GLN:N	1:582:A:GLN:CA	1:582:A:GLN:C	1:583:A:GLU:N	1	4.83
(1,224)	1:699:A:ASP:N	1:699:A:ASP:CA	1:699:A:ASP:C	1:700:A:VAL:N	6	4.82
(1,100)	1:580:A:GLN:N	1:580:A:GLN:CA	1:580:A:GLN:C	1:581:A:ILE:N	8	4.77
(1,100)	1:580:A:GLN:N	1:580:A:GLN:CA	1:580:A:GLN:C	1:581:A:ILE:N	10	4.77
(1,225)	1:699:A:ASP:C	1:700:A:VAL:N	1:700:A:VAL:CA	1:700:A:VAL:C	7	4.71
(1,86)	1:573:A:LYS:N	1:573:A:LYS:CA	1:573:A:LYS:C	1:574:A:LEU:N	2	4.7
(1,232)	1:703:A:THR:N	1:703:A:THR:CA	1:703:A:THR:C	1:704:A:VAL:N	4	4.62
(1,12)	1:490:A:VAL:N	1:490:A:VAL:CA	1:490:A:VAL:C	1:491:A:PRO:N	5	4.53
(1,58)	1:532:A:VAL:N	1:532:A:VAL:CA	1:532:A:VAL:C	1:533:A:PRO:N	5	4.52
(1,225)	1:699:A:ASP:C	1:700:A:VAL:N	1:700:A:VAL:CA	1:700:A:VAL:C	3	4.5
(1,24)	1:498:A:GLU:N	1:498:A:GLU:CA	1:498:A:GLU:C	1:499:A:GLN:N	1	4.49
(1,37)	1:516:A:ARG:C	1:517:A:GLN:N	1:517:A:GLN:CA	1:517:A:GLN:C	1	4.44
(1,153)	1:635:A:LYS:C	1:636:A:ARG:N	1:636:A:ARG:CA	1:636:A:ARG:C	2	4.38
(1,254)	1:528:A:ARG:N	1:528:A:ARG:CA	1:528:A:ARG:C	1:529:A:LYS:N	10	4.33
(1,64)	1:538:A:GLN:N	1:538:A:GLN:CA	1:538:A:GLN:C	1:539:A:PRO:N	8	4.33
(1,191)	1:673:A:ILE:C	1:674:A:SER:N	1:674:A:SER:CA	1:674:A:SER:C	9	4.31
(1,16)	1:492:A:PHE:N	1:492:A:PHE:CA	1:492:A:PHE:C	1:493:A:LYS:N	3	4.28
(1,218)	1:695:A:VAL:N	1:695:A:VAL:CA	1:695:A:VAL:C	1:696:A:LYS:N	2	4.27
(1,191)	1:673:A:ILE:C	1:674:A:SER:N	1:674:A:SER:CA	1:674:A:SER:C	3	4.27
(1,15)	1:491:A:PRO:C	1:492:A:PHE:N	1:492:A:PHE:CA	1:492:A:PHE:C	1	4.27
(1,254)	1:528:A:ARG:N	1:528:A:ARG:CA	1:528:A:ARG:C	1:529:A:LYS:N	6	4.26
(1,138)	1:619:A:SER:N	1:619:A:SER:CA	1:619:A:SER:C	1:620:A:LEU:N	2	4.25
(1,24)	1:498:A:GLU:N	1:498:A:GLU:CA	1:498:A:GLU:C	1:499:A:GLN:N	2	4.21
(1,197)	1:676:A:LEU:C	1:677:A:ARG:N	1:677:A:ARG:CA	1:677:A:ARG:C	1	4.18

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,256)	1:537:A:ALA:N	1:537:A:ALA:CA	1:537:A:ALA:C	1:538:A:GLN:N	5	4.17
(1,153)	1:635:A:LYS:C	1:636:A:ARG:N	1:636:A:ARG:CA	1:636:A:ARG:C	9	4.16
(1,254)	1:528:A:ARG:N	1:528:A:ARG:CA	1:528:A:ARG:C	1:529:A:LYS:N	5	4.12
(1,208)	1:686:A:PRO:N	1:686:A:PRO:CA	1:686:A:PRO:C	1:687:A:ILE:N	6	4.11
(1,10)	1:489:A:GLY:N	1:489:A:GLY:CA	1:489:A:GLY:C	1:490:A:VAL:N	6	4.1
(1,25)	1:503:A:ASP:C	1:504:A:VAL:N	1:504:A:VAL:CA	1:504:A:VAL:C	10	4.07
(1,39)	1:517:A:GLN:C	1:518:A:LEU:N	1:518:A:LEU:CA	1:518:A:LEU:C	9	4.05
(1,30)	1:508:A:SER:N	1:508:A:SER:CA	1:508:A:SER:C	1:509:A:PHE:N	9	4.04
(1,218)	1:695:A:VAL:N	1:695:A:VAL:CA	1:695:A:VAL:C	1:696:A:LYS:N	1	4.03
(1,48)	1:522:A:LYS:N	1:522:A:LYS:CA	1:522:A:LYS:C	1:523:A:ARG:N	7	4.02
(1,281)	1:681:A:VAL:C	1:682:A:HIS:N	1:682:A:HIS:CA	1:682:A:HIS:C	9	4.01
(1,95)	1:577:A:TRP:C	1:578:A:GLN:N	1:578:A:GLN:CA	1:578:A:GLN:C	5	4.0
(1,213)	1:690:A:TYR:C	1:691:A:ARG:N	1:691:A:ARG:CA	1:691:A:ARG:C	3	3.96
(1,43)	1:519:A:GLN:C	1:520:A:LYS:N	1:520:A:LYS:CA	1:520:A:LYS:C	7	3.96
(1,253)	1:527:A:LEU:C	1:528:A:ARG:N	1:528:A:ARG:CA	1:528:A:ARG:C	5	3.95
(1,197)	1:676:A:LEU:C	1:677:A:ARG:N	1:677:A:ARG:CA	1:677:A:ARG:C	4	3.86
(1,153)	1:635:A:LYS:C	1:636:A:ARG:N	1:636:A:ARG:CA	1:636:A:ARG:C	1	3.86
(1,108)	1:585:A:LEU:N	1:585:A:LEU:CA	1:585:A:LEU:C	1:586:A:LYS:N	6	3.86
(1,66)	1:539:A:PRO:N	1:539:A:PRO:CA	1:539:A:PRO:C	1:540:A:LEU:N	5	3.86
(1,10)	1:489:A:GLY:N	1:489:A:GLY:CA	1:489:A:GLY:C	1:490:A:VAL:N	1	3.86
(1,153)	1:635:A:LYS:C	1:636:A:ARG:N	1:636:A:ARG:CA	1:636:A:ARG:C	8	3.85
(1,258)	1:544:A:ASP:N	1:544:A:ASP:CA	1:544:A:ASP:C	1:545:A:ASN:N	7	3.83
(1,30)	1:508:A:SER:N	1:508:A:SER:CA	1:508:A:SER:C	1:509:A:PHE:N	1	3.82
(1,261)	1:583:A:GLU:C	1:584:A:GLU:N	1:584:A:GLU:CA	1:584:A:GLU:C	3	3.79
(1,86)	1:573:A:LYS:N	1:573:A:LYS:CA	1:573:A:LYS:C	1:574:A:LEU:N	7	3.78
(1,30)	1:508:A:SER:N	1:508:A:SER:CA	1:508:A:SER:C	1:509:A:PHE:N	7	3.78
(1,125)	1:605:A:GLU:C	1:606:A:PRO:N	1:606:A:PRO:CA	1:606:A:PRO:C	8	3.76
(1,208)	1:686:A:PRO:N	1:686:A:PRO:CA	1:686:A:PRO:C	1:687:A:ILE:N	5	3.75
(1,67)	1:539:A:PRO:C	1:540:A:LEU:N	1:540:A:LEU:CA	1:540:A:LEU:C	10	3.73
(1,197)	1:676:A:LEU:C	1:677:A:ARG:N	1:677:A:ARG:CA	1:677:A:ARG:C	5	3.68
(1,86)	1:573:A:LYS:N	1:573:A:LYS:CA	1:573:A:LYS:C	1:574:A:LEU:N	1	3.66
(1,140)	1:623:A:SER:N	1:623:A:SER:CA	1:623:A:SER:C	1:624:A:ILE:N	4	3.65
(1,8)	1:487:A:HIS:N	1:487:A:HIS:CA	1:487:A:HIS:C	1:488:A:TYR:N	9	3.63
(1,12)	1:490:A:VAL:N	1:490:A:VAL:CA	1:490:A:VAL:C	1:491:A:PRO:N	2	3.61
(1,185)	1:654:A:LYS:C	1:655:A:SER:N	1:655:A:SER:CA	1:655:A:SER:C	6	3.6
(1,255)	1:536:A:LYS:C	1:537:A:ALA:N	1:537:A:ALA:CA	1:537:A:ALA:C	4	3.57
(1,228)	1:701:A:PRO:N	1:701:A:PRO:CA	1:701:A:PRO:C	1:702:A:LEU:N	2	3.56
(1,284)	1:692:A:ALA:N	1:692:A:ALA:CA	1:692:A:ALA:C	1:693:A:VAL:N	6	3.54
(1,224)	1:699:A:ASP:N	1:699:A:ASP:CA	1:699:A:ASP:C	1:700:A:VAL:N	5	3.52
(1,218)	1:695:A:VAL:N	1:695:A:VAL:CA	1:695:A:VAL:C	1:696:A:LYS:N	10	3.5
(1,86)	1:573:A:LYS:N	1:573:A:LYS:CA	1:573:A:LYS:C	1:574:A:LEU:N	3	3.49
(1,218)	1:695:A:VAL:N	1:695:A:VAL:CA	1:695:A:VAL:C	1:696:A:LYS:N	8	3.48
(1,61)	1:534:A:LYS:C	1:535:A:PHE:N	1:535:A:PHE:CA	1:535:A:PHE:C	5	3.42
(1,109)	1:591:A:MET:C	1:592:A:VAL:N	1:592:A:VAL:CA	1:592:A:VAL:C	5	3.39
(1,74)	1:557:A:THR:N	1:557:A:THR:CA	1:557:A:THR:C	1:558:A:GLN:N	1	3.34
(1,61)	1:534:A:LYS:C	1:535:A:PHE:N	1:535:A:PHE:CA	1:535:A:PHE:C	10	3.34
(1,30)	1:508:A:SER:N	1:508:A:SER:CA	1:508:A:SER:C	1:509:A:PHE:N	6	3.31
(1,125)	1:605:A:GLU:C	1:606:A:PRO:N	1:606:A:PRO:CA	1:606:A:PRO:C	4	3.3
(1,109)	1:591:A:MET:C	1:592:A:VAL:N	1:592:A:VAL:CA	1:592:A:VAL:C	6	3.3
(1,95)	1:577:A:TRP:C	1:578:A:GLN:N	1:578:A:GLN:CA	1:578:A:GLN:C	10	3.3
(1,209)	1:688:A:ARG:C	1:689:A:LYS:N	1:689:A:LYS:CA	1:689:A:LYS:C	7	3.28

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,231)	1:702:A:LEU:C	1:703:A:THR:N	1:703:A:THR:CA	1:703:A:THR:C	6	3.26
(1,228)	1:701:A:PRO:N	1:701:A:PRO:CA	1:701:A:PRO:C	1:702:A:LEU:N	10	3.26
(1,133)	1:616:A:LEU:C	1:617:A:THR:N	1:617:A:THR:CA	1:617:A:THR:C	5	3.19
(1,107)	1:584:A:GLU:C	1:585:A:LEU:N	1:585:A:LEU:CA	1:585:A:LEU:C	8	3.17
(1,213)	1:690:A:TYR:C	1:691:A:ARG:N	1:691:A:ARG:CA	1:691:A:ARG:C	2	3.15
(1,284)	1:692:A:ALA:N	1:692:A:ALA:CA	1:692:A:ALA:C	1:693:A:VAL:N	5	3.12
(1,231)	1:702:A:LEU:C	1:703:A:THR:N	1:703:A:THR:CA	1:703:A:THR:C	5	3.11
(1,20)	1:496:A:LEU:N	1:496:A:LEU:CA	1:496:A:LEU:C	1:497:A:VAL:N	9	3.05
(1,19)	1:495:A:LYS:C	1:496:A:LEU:N	1:496:A:LEU:CA	1:496:A:LEU:C	8	3.05
(1,287)	1:705:A:PRO:C	1:706:A:ARG:N	1:706:A:ARG:CA	1:706:A:ARG:C	7	3.02
(1,10)	1:489:A:GLY:N	1:489:A:GLY:CA	1:489:A:GLY:C	1:490:A:VAL:N	5	3.01
(1,223)	1:698:A:SER:C	1:699:A:ASP:N	1:699:A:ASP:CA	1:699:A:ASP:C	5	3.0
(1,58)	1:532:A:VAL:N	1:532:A:VAL:CA	1:532:A:VAL:C	1:533:A:PRO:N	1	2.99
(1,213)	1:690:A:TYR:C	1:691:A:ARG:N	1:691:A:ARG:CA	1:691:A:ARG:C	8	2.98
(1,284)	1:692:A:ALA:N	1:692:A:ALA:CA	1:692:A:ALA:C	1:693:A:VAL:N	7	2.97
(1,232)	1:703:A:THR:N	1:703:A:THR:CA	1:703:A:THR:C	1:704:A:VAL:N	8	2.97
(1,150)	1:628:A:GLY:N	1:628:A:GLY:CA	1:628:A:GLY:C	1:629:A:PHE:N	5	2.95
(1,39)	1:517:A:GLN:C	1:518:A:LEU:N	1:518:A:LEU:CA	1:518:A:LEU:C	3	2.92
(1,255)	1:536:A:LYS:C	1:537:A:ALA:N	1:537:A:ALA:CA	1:537:A:ALA:C	10	2.91
(1,255)	1:536:A:LYS:C	1:537:A:ALA:N	1:537:A:ALA:CA	1:537:A:ALA:C	3	2.9
(1,104)	1:582:A:GLN:N	1:582:A:GLN:CA	1:582:A:GLN:C	1:583:A:GLU:N	9	2.89
(1,7)	1:486:A:PRO:C	1:487:A:HIS:N	1:487:A:HIS:CA	1:487:A:HIS:C	4	2.89
(1,48)	1:522:A:LYS:N	1:522:A:LYS:CA	1:522:A:LYS:C	1:523:A:ARG:N	4	2.84
(1,10)	1:489:A:GLY:N	1:489:A:GLY:CA	1:489:A:GLY:C	1:490:A:VAL:N	8	2.82
(1,231)	1:702:A:LEU:C	1:703:A:THR:N	1:703:A:THR:CA	1:703:A:THR:C	9	2.81
(1,223)	1:698:A:SER:C	1:699:A:ASP:N	1:699:A:ASP:CA	1:699:A:ASP:C	6	2.81
(1,19)	1:495:A:LYS:C	1:496:A:LEU:N	1:496:A:LEU:CA	1:496:A:LEU:C	9	2.78
(1,60)	1:533:A:PRO:N	1:533:A:PRO:CA	1:533:A:PRO:C	1:534:A:LYS:N	4	2.77
(1,60)	1:533:A:PRO:N	1:533:A:PRO:CA	1:533:A:PRO:C	1:534:A:LYS:N	6	2.77
(1,133)	1:616:A:LEU:C	1:617:A:THR:N	1:617:A:THR:CA	1:617:A:THR:C	7	2.74
(1,187)	1:655:A:SER:C	1:656:A:LEU:N	1:656:A:LEU:CA	1:656:A:LEU:C	3	2.72
(1,156)	1:637:A:ALA:N	1:637:A:ALA:CA	1:637:A:ALA:C	1:638:A:LYS:N	3	2.72
(1,95)	1:577:A:TRP:C	1:578:A:GLN:N	1:578:A:GLN:CA	1:578:A:GLN:C	6	2.72
(1,284)	1:692:A:ALA:N	1:692:A:ALA:CA	1:692:A:ALA:C	1:693:A:VAL:N	2	2.69
(1,66)	1:539:A:PRO:N	1:539:A:PRO:CA	1:539:A:PRO:C	1:540:A:LEU:N	1	2.67
(1,231)	1:702:A:LEU:C	1:703:A:THR:N	1:703:A:THR:CA	1:703:A:THR:C	1	2.64
(1,231)	1:702:A:LEU:C	1:703:A:THR:N	1:703:A:THR:CA	1:703:A:THR:C	2	2.58
(1,185)	1:654:A:LYS:C	1:655:A:SER:N	1:655:A:SER:CA	1:655:A:SER:C	10	2.58
(1,153)	1:635:A:LYS:C	1:636:A:ARG:N	1:636:A:ARG:CA	1:636:A:ARG:C	5	2.58
(1,74)	1:557:A:THR:N	1:557:A:THR:CA	1:557:A:THR:C	1:558:A:GLN:N	6	2.58
(1,146)	1:626:A:GLN:N	1:626:A:GLN:CA	1:626:A:GLN:C	1:627:A:GLU:N	10	2.57
(1,210)	1:689:A:LYS:N	1:689:A:LYS:CA	1:689:A:LYS:C	1:690:A:TYR:N	9	2.55
(1,257)	1:543:A:PHE:C	1:544:A:ASP:N	1:544:A:ASP:CA	1:544:A:ASP:C	6	2.54
(1,109)	1:591:A:MET:C	1:592:A:VAL:N	1:592:A:VAL:CA	1:592:A:VAL:C	1	2.5
(1,14)	1:491:A:PRO:N	1:491:A:PRO:CA	1:491:A:PRO:C	1:492:A:PHE:N	5	2.49
(1,14)	1:491:A:PRO:N	1:491:A:PRO:CA	1:491:A:PRO:C	1:492:A:PHE:N	7	2.49
(1,10)	1:489:A:GLY:N	1:489:A:GLY:CA	1:489:A:GLY:C	1:490:A:VAL:N	2	2.42
(1,256)	1:537:A:ALA:N	1:537:A:ALA:CA	1:537:A:ALA:C	1:538:A:GLN:N	7	2.41
(1,209)	1:688:A:ARG:C	1:689:A:LYS:N	1:689:A:LYS:CA	1:689:A:LYS:C	2	2.41
(1,154)	1:636:A:ARG:N	1:636:A:ARG:CA	1:636:A:ARG:C	1:637:A:ALA:N	5	2.39
(1,30)	1:508:A:SER:N	1:508:A:SER:CA	1:508:A:SER:C	1:509:A:PHE:N	10	2.39

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,30)	1:508:A:SER:N	1:508:A:SER:CA	1:508:A:SER:C	1:509:A:PHE:N	5	2.37
(1,17)	1:492:A:PHE:C	1:493:A:LYS:N	1:493:A:LYS:CA	1:493:A:LYS:C	3	2.37
(1,156)	1:637:A:ALA:N	1:637:A:ALA:CA	1:637:A:ALA:C	1:638:A:LYS:N	7	2.35
(1,67)	1:539:A:PRO:C	1:540:A:LEU:N	1:540:A:LEU:CA	1:540:A:LEU:C	1	2.35
(1,231)	1:702:A:LEU:C	1:703:A:THR:N	1:703:A:THR:CA	1:703:A:THR:C	3	2.34
(1,86)	1:573:A:LYS:N	1:573:A:LYS:CA	1:573:A:LYS:C	1:574:A:LEU:N	9	2.3
(1,109)	1:591:A:MET:C	1:592:A:VAL:N	1:592:A:VAL:CA	1:592:A:VAL:C	2	2.28
(1,16)	1:492:A:PHE:N	1:492:A:PHE:CA	1:492:A:PHE:C	1:493:A:LYS:N	9	2.26
(1,209)	1:688:A:ARG:C	1:689:A:LYS:N	1:689:A:LYS:CA	1:689:A:LYS:C	8	2.23
(1,231)	1:702:A:LEU:C	1:703:A:THR:N	1:703:A:THR:CA	1:703:A:THR:C	7	2.22
(1,25)	1:503:A:ASP:C	1:504:A:VAL:N	1:504:A:VAL:CA	1:504:A:VAL:C	7	2.21
(1,284)	1:692:A:ALA:N	1:692:A:ALA:CA	1:692:A:ALA:C	1:693:A:VAL:N	8	2.2
(1,156)	1:637:A:ALA:N	1:637:A:ALA:CA	1:637:A:ALA:C	1:638:A:LYS:N	8	2.17
(1,167)	1:644:A:ASP:C	1:645:A:LYS:N	1:645:A:LYS:CA	1:645:A:LYS:C	5	2.15
(1,169)	1:645:A:LYS:C	1:646:A:CYS:N	1:646:A:CYS:CA	1:646:A:CYS:C	2	2.14
(1,23)	1:497:A:VAL:C	1:498:A:GLU:N	1:498:A:GLU:CA	1:498:A:GLU:C	1	2.1
(1,125)	1:605:A:GLU:C	1:606:A:PRO:N	1:606:A:PRO:CA	1:606:A:PRO:C	10	2.06
(1,232)	1:703:A:THR:N	1:703:A:THR:CA	1:703:A:THR:C	1:704:A:VAL:N	3	2.02
(1,74)	1:557:A:THR:N	1:557:A:THR:CA	1:557:A:THR:C	1:558:A:GLN:N	7	2.02
(1,74)	1:557:A:THR:N	1:557:A:THR:CA	1:557:A:THR:C	1:558:A:GLN:N	9	2.01
(1,140)	1:623:A:SER:N	1:623:A:SER:CA	1:623:A:SER:C	1:624:A:ILE:N	10	1.99
(1,169)	1:645:A:LYS:C	1:646:A:CYS:N	1:646:A:CYS:CA	1:646:A:CYS:C	5	1.98
(1,10)	1:489:A:GLY:N	1:489:A:GLY:CA	1:489:A:GLY:C	1:490:A:VAL:N	3	1.98
(1,10)	1:489:A:GLY:N	1:489:A:GLY:CA	1:489:A:GLY:C	1:490:A:VAL:N	10	1.98
(1,192)	1:674:A:SER:N	1:674:A:SER:CA	1:674:A:SER:C	1:675:A:GLN:N	8	1.97
(1,25)	1:503:A:ASP:C	1:504:A:VAL:N	1:504:A:VAL:CA	1:504:A:VAL:C	6	1.96
(1,108)	1:585:A:LEU:N	1:585:A:LEU:CA	1:585:A:LEU:C	1:586:A:LYS:N	8	1.95
(1,264)	1:586:A:LYS:N	1:586:A:LYS:CA	1:586:A:LYS:C	1:587:A:GLN:N	5	1.94
(1,192)	1:674:A:SER:N	1:674:A:SER:CA	1:674:A:SER:C	1:675:A:GLN:N	7	1.93
(1,74)	1:557:A:THR:N	1:557:A:THR:CA	1:557:A:THR:C	1:558:A:GLN:N	10	1.93
(1,288)	1:706:A:ARG:N	1:706:A:ARG:CA	1:706:A:ARG:C	1:707:A:SER:N	10	1.92
(1,220)	1:696:A:LYS:N	1:696:A:LYS:CA	1:696:A:LYS:C	1:697:A:ALA:N	3	1.92
(1,25)	1:503:A:ASP:C	1:504:A:VAL:N	1:504:A:VAL:CA	1:504:A:VAL:C	5	1.89
(1,228)	1:701:A:PRO:N	1:701:A:PRO:CA	1:701:A:PRO:C	1:702:A:LEU:N	7	1.87
(1,60)	1:533:A:PRO:N	1:533:A:PRO:CA	1:533:A:PRO:C	1:534:A:LYS:N	8	1.82
(1,48)	1:522:A:LYS:N	1:522:A:LYS:CA	1:522:A:LYS:C	1:523:A:ARG:N	9	1.81
(1,12)	1:490:A:VAL:N	1:490:A:VAL:CA	1:490:A:VAL:C	1:491:A:PRO:N	1	1.81
(1,125)	1:605:A:GLU:C	1:606:A:PRO:N	1:606:A:PRO:CA	1:606:A:PRO:C	1	1.77
(1,125)	1:605:A:GLU:C	1:606:A:PRO:N	1:606:A:PRO:CA	1:606:A:PRO:C	7	1.76
(1,86)	1:573:A:LYS:N	1:573:A:LYS:CA	1:573:A:LYS:C	1:574:A:LEU:N	10	1.75
(1,245)	1:482:A:ALA:C	1:483:A:THR:N	1:483:A:THR:CA	1:483:A:THR:C	7	1.74
(1,119)	1:599:A:ASN:C	1:600:A:THR:N	1:600:A:THR:CA	1:600:A:THR:C	6	1.74
(1,170)	1:646:A:CYS:N	1:646:A:CYS:CA	1:646:A:CYS:C	1:647:A:LEU:N	2	1.72
(1,74)	1:557:A:THR:N	1:557:A:THR:CA	1:557:A:THR:C	1:558:A:GLN:N	4	1.72
(1,30)	1:508:A:SER:N	1:508:A:SER:CA	1:508:A:SER:C	1:509:A:PHE:N	2	1.72
(1,156)	1:637:A:ALA:N	1:637:A:ALA:CA	1:637:A:ALA:C	1:638:A:LYS:N	2	1.71
(1,231)	1:702:A:LEU:C	1:703:A:THR:N	1:703:A:THR:CA	1:703:A:THR:C	4	1.7
(1,109)	1:591:A:MET:C	1:592:A:VAL:N	1:592:A:VAL:CA	1:592:A:VAL:C	4	1.7
(1,108)	1:585:A:LEU:N	1:585:A:LEU:CA	1:585:A:LEU:C	1:586:A:LYS:N	9	1.69
(1,169)	1:645:A:LYS:C	1:646:A:CYS:N	1:646:A:CYS:CA	1:646:A:CYS:C	10	1.67
(1,232)	1:703:A:THR:N	1:703:A:THR:CA	1:703:A:THR:C	1:704:A:VAL:N	6	1.66

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,125)	1:605:A:GLU:C	1:606:A:PRO:N	1:606:A:PRO:CA	1:606:A:PRO:C	2	1.66
(1,119)	1:599:A:ASN:C	1:600:A:THR:N	1:600:A:THR:CA	1:600:A:THR:C	10	1.66
(1,73)	1:556:A:PRO:C	1:557:A:THR:N	1:557:A:THR:CA	1:557:A:THR:C	3	1.62
(1,44)	1:520:A:LYS:N	1:520:A:LYS:CA	1:520:A:LYS:C	1:521:A:GLU:N	6	1.58
(1,25)	1:503:A:ASP:C	1:504:A:VAL:N	1:504:A:VAL:CA	1:504:A:VAL:C	1	1.58
(1,213)	1:690:A:TYR:C	1:691:A:ARG:N	1:691:A:ARG:CA	1:691:A:ARG:C	10	1.57
(1,156)	1:637:A:ALA:N	1:637:A:ALA:CA	1:637:A:ALA:C	1:638:A:LYS:N	10	1.57
(1,95)	1:577:A:TRP:C	1:578:A:GLN:N	1:578:A:GLN:CA	1:578:A:GLN:C	8	1.56
(1,277)	1:671:A:GLU:C	1:672:A:GLU:N	1:672:A:GLU:CA	1:672:A:GLU:C	7	1.55
(1,16)	1:492:A:PHE:N	1:492:A:PHE:CA	1:492:A:PHE:C	1:493:A:LYS:N	10	1.54
(1,108)	1:585:A:LEU:N	1:585:A:LEU:CA	1:585:A:LEU:C	1:586:A:LYS:N	3	1.51
(1,7)	1:486:A:PRO:C	1:487:A:HIS:N	1:487:A:HIS:CA	1:487:A:HIS:C	10	1.51
(1,232)	1:703:A:THR:N	1:703:A:THR:CA	1:703:A:THR:C	1:704:A:VAL:N	7	1.48
(1,184)	1:653:A:GLN:N	1:653:A:GLN:CA	1:653:A:GLN:C	1:654:A:LYS:N	4	1.48
(1,100)	1:580:A:GLN:N	1:580:A:GLN:CA	1:580:A:GLN:C	1:581:A:ILE:N	2	1.47
(1,250)	1:499:A:GLN:N	1:499:A:GLN:CA	1:499:A:GLN:C	1:500:A:ARG:N	7	1.46
(1,184)	1:653:A:GLN:N	1:653:A:GLN:CA	1:653:A:GLN:C	1:654:A:LYS:N	10	1.46
(1,20)	1:496:A:LEU:N	1:496:A:LEU:CA	1:496:A:LEU:C	1:497:A:VAL:N	3	1.46
(1,257)	1:543:A:PHE:C	1:544:A:ASP:N	1:544:A:ASP:CA	1:544:A:ASP:C	1	1.45
(1,156)	1:637:A:ALA:N	1:637:A:ALA:CA	1:637:A:ALA:C	1:638:A:LYS:N	4	1.45
(1,255)	1:536:A:LYS:C	1:537:A:ALA:N	1:537:A:ALA:CA	1:537:A:ALA:C	2	1.44
(1,209)	1:688:A:ARG:C	1:689:A:LYS:N	1:689:A:LYS:CA	1:689:A:LYS:C	4	1.44
(1,66)	1:539:A:PRO:N	1:539:A:PRO:CA	1:539:A:PRO:C	1:540:A:LEU:N	6	1.44
(1,284)	1:692:A:ALA:N	1:692:A:ALA:CA	1:692:A:ALA:C	1:693:A:VAL:N	10	1.43
(1,245)	1:482:A:ALA:C	1:483:A:THR:N	1:483:A:THR:CA	1:483:A:THR:C	6	1.43
(1,210)	1:689:A:LYS:N	1:689:A:LYS:CA	1:689:A:LYS:C	1:690:A:TYR:N	3	1.43
(1,109)	1:591:A:MET:C	1:592:A:VAL:N	1:592:A:VAL:CA	1:592:A:VAL:C	7	1.43
(1,12)	1:490:A:VAL:N	1:490:A:VAL:CA	1:490:A:VAL:C	1:491:A:PRO:N	10	1.42
(1,209)	1:688:A:ARG:C	1:689:A:LYS:N	1:689:A:LYS:CA	1:689:A:LYS:C	10	1.41
(1,169)	1:645:A:LYS:C	1:646:A:CYS:N	1:646:A:CYS:CA	1:646:A:CYS:C	1	1.41
(1,65)	1:538:A:GLN:C	1:539:A:PRO:N	1:539:A:PRO:CA	1:539:A:PRO:C	8	1.4
(1,25)	1:503:A:ASP:C	1:504:A:VAL:N	1:504:A:VAL:CA	1:504:A:VAL:C	8	1.38
(1,253)	1:527:A:LEU:C	1:528:A:ARG:N	1:528:A:ARG:CA	1:528:A:ARG:C	8	1.36
(1,257)	1:543:A:PHE:C	1:544:A:ASP:N	1:544:A:ASP:CA	1:544:A:ASP:C	5	1.34
(1,170)	1:646:A:CYS:N	1:646:A:CYS:CA	1:646:A:CYS:C	1:647:A:LEU:N	1	1.32
(1,237)	1:706:A:ARG:C	1:707:A:SER:N	1:707:A:SER:CA	1:707:A:SER:C	9	1.28
(1,231)	1:702:A:LEU:C	1:703:A:THR:N	1:703:A:THR:CA	1:703:A:THR:C	10	1.27
(1,93)	1:576:A:ARG:C	1:577:A:TRP:N	1:577:A:TRP:CA	1:577:A:TRP:C	1	1.27
(1,156)	1:637:A:ALA:N	1:637:A:ALA:CA	1:637:A:ALA:C	1:638:A:LYS:N	1	1.26
(1,277)	1:671:A:GLU:C	1:672:A:GLU:N	1:672:A:GLU:CA	1:672:A:GLU:C	10	1.25
(1,25)	1:503:A:ASP:C	1:504:A:VAL:N	1:504:A:VAL:CA	1:504:A:VAL:C	4	1.25
(1,228)	1:701:A:PRO:N	1:701:A:PRO:CA	1:701:A:PRO:C	1:702:A:LEU:N	9	1.24
(1,29)	1:507:A:PHE:C	1:508:A:SER:N	1:508:A:SER:CA	1:508:A:SER:C	7	1.24
(1,228)	1:701:A:PRO:N	1:701:A:PRO:CA	1:701:A:PRO:C	1:702:A:LEU:N	8	1.23
(1,95)	1:577:A:TRP:C	1:578:A:GLN:N	1:578:A:GLN:CA	1:578:A:GLN:C	3	1.22
(1,103)	1:581:A:ILE:C	1:582:A:GLN:N	1:582:A:GLN:CA	1:582:A:GLN:C	7	1.21
(1,109)	1:591:A:MET:C	1:592:A:VAL:N	1:592:A:VAL:CA	1:592:A:VAL:C	8	1.19
(1,14)	1:491:A:PRO:N	1:491:A:PRO:CA	1:491:A:PRO:C	1:492:A:PHE:N	2	1.19
(1,259)	1:568:A:LYS:C	1:569:A:ARG:N	1:569:A:ARG:CA	1:569:A:ARG:C	8	1.18
(1,10)	1:489:A:GLY:N	1:489:A:GLY:CA	1:489:A:GLY:C	1:490:A:VAL:N	4	1.18
(1,250)	1:499:A:GLN:N	1:499:A:GLN:CA	1:499:A:GLN:C	1:500:A:ARG:N	6	1.15

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,217)	1:694:A:GLU:C	1:695:A:VAL:N	1:695:A:VAL:CA	1:695:A:VAL:C	2	1.15
(1,170)	1:646:A:CYS:N	1:646:A:CYS:CA	1:646:A:CYS:C	1:647:A:LEU:N	10	1.15
(1,62)	1:535:A:PHE:N	1:535:A:PHE:CA	1:535:A:PHE:C	1:536:A:LYS:N	5	1.14
(1,237)	1:706:A:ARG:C	1:707:A:SER:N	1:707:A:SER:CA	1:707:A:SER:C	3	1.13
(1,133)	1:616:A:LEU:C	1:617:A:THR:N	1:617:A:THR:CA	1:617:A:THR:C	4	1.12
(1,17)	1:492:A:PHE:C	1:493:A:LYS:N	1:493:A:LYS:CA	1:493:A:LYS:C	2	1.12
(1,170)	1:646:A:CYS:N	1:646:A:CYS:CA	1:646:A:CYS:C	1:647:A:LEU:N	5	1.1
(1,133)	1:616:A:LEU:C	1:617:A:THR:N	1:617:A:THR:CA	1:617:A:THR:C	10	1.1
(1,25)	1:503:A:ASP:C	1:504:A:VAL:N	1:504:A:VAL:CA	1:504:A:VAL:C	3	1.09
(1,19)	1:495:A:LYS:C	1:496:A:LEU:N	1:496:A:LEU:CA	1:496:A:LEU:C	7	1.08
(1,284)	1:692:A:ALA:N	1:692:A:ALA:CA	1:692:A:ALA:C	1:693:A:VAL:N	4	1.06
(1,10)	1:489:A:GLY:N	1:489:A:GLY:CA	1:489:A:GLY:C	1:490:A:VAL:N	9	1.06
(1,133)	1:616:A:LEU:C	1:617:A:THR:N	1:617:A:THR:CA	1:617:A:THR:C	9	1.04
(1,13)	1:490:A:VAL:C	1:491:A:PRO:N	1:491:A:PRO:CA	1:491:A:PRO:C	2	1.02
(1,14)	1:491:A:PRO:N	1:491:A:PRO:CA	1:491:A:PRO:C	1:492:A:PHE:N	4	1.01