



Full wwPDB NMR Structure Validation Report ⓘ

Mar 5, 2026 – 09:52 AM UTC

PDB ID : 9ONB / pdb_00009onb
BMRB ID : 31248
Title : Immature HIV-1 CACTD-SP1 lattice with Maturation inhibitor PF-46396 (S) and Inositol hexakisphosphate (IP6)
Authors : Zadorozhnyi, R.; Quinn, C.M.; Zadrozny, K.K.; Ablan, S.D.; Kennedy, B.J.; Yap, G.P.A.; Sanner, D.; Kraml, C.; Freed, E.O.; Ganser-Pornillos, B.K.; Pornillos, O.; Gronenborn, A.M.; Polenova, T.
Deposited on : 2025-05-14

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](#) ①) were used in the production of this report:

MolProbity	:	4-5-2 with Phenix2.0
Mogul	:	2022.3.0, CSD as543be (2022)
Buster-report	:	wwPDB partial adaption of 1.1.7 (2018)
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

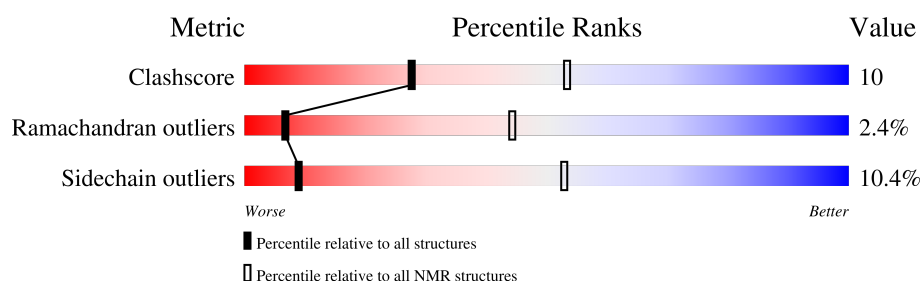
1 Overall quality at a glance

The following experimental techniques were used to determine the structure:

SOLID-STATE NMR

The overall completeness of chemical shifts assignment is 6%.

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	G	102	73% 23% ..
1	H	102	66% 26% . .
1	I	102	57% 26% 5% 12%
1	J	102	69% 22% . . 7%
1	K	102	69% 21% 5% 6%
1	L	102	68% 25% 5% .

2 Ensemble composition and analysis

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

The following residues are included in the computation of the global validation metrics.

Well-defined (core) protein residues			
Well-defined core	Residue range (total)	Backbone RMSD (Å)	Medoid model
1	G:146-G:244, H:147-H:245, I:147-I:148, I:153-I:205, I:210-I:244, J:147-J:205, J:210-J:245, K:144-K:147, K:154-K:245, L:147-L:245 (578)	0.62	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 2 single-model clusters were found.

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

3 Entry composition

There are 3 unique types of molecules in this entry. The entry contains 9410 atoms, of which 4703 are hydrogens and 0 are deuteriums.

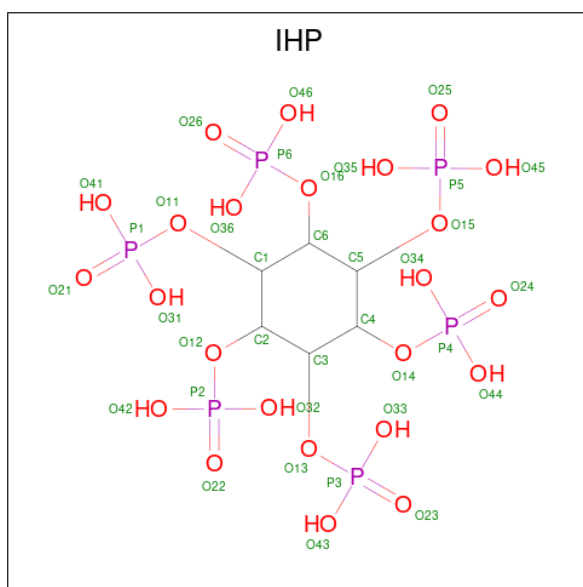
- Molecule 1 is a protein called Capsid protein p24.

Mol	Chain	Residues	Atoms						Trace
1	G	102	Total	C	H	N	O	S	0
			1551	479	778	136	151	7	
1	H	102	Total	C	H	N	O	S	0
			1551	479	778	136	151	7	
1	I	102	Total	C	H	N	O	S	0
			1551	479	778	136	151	7	
1	J	102	Total	C	H	N	O	S	0
			1551	479	778	136	151	7	
1	K	102	Total	C	H	N	O	S	0
			1551	479	778	136	151	7	
1	L	102	Total	C	H	N	O	S	0
			1551	479	778	136	151	7	

There are 18 discrepancies between the modelled and reference sequences:

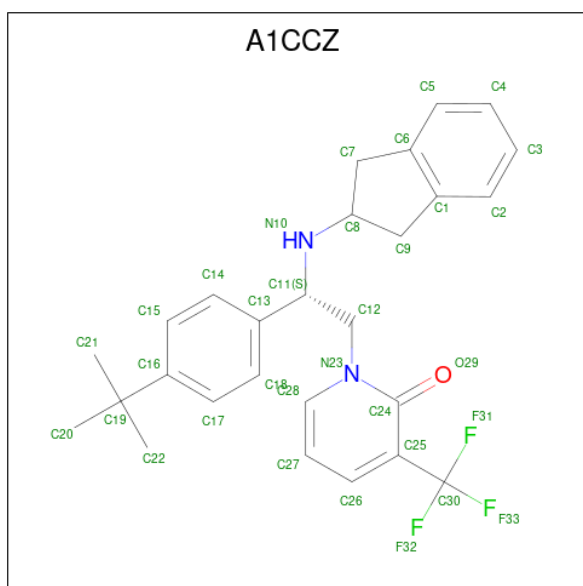
Chain	Residue	Modelled	Actual	Comment	Reference
G	144	GLY	-	expression tag	UNP P12497
G	145	GLY	-	expression tag	UNP P12497
G	241	THR	PRO	conflict	UNP P12497
H	144	GLY	-	expression tag	UNP P12497
H	145	GLY	-	expression tag	UNP P12497
H	241	THR	PRO	conflict	UNP P12497
I	144	GLY	-	expression tag	UNP P12497
I	145	GLY	-	expression tag	UNP P12497
I	241	THR	PRO	conflict	UNP P12497
J	144	GLY	-	expression tag	UNP P12497
J	145	GLY	-	expression tag	UNP P12497
J	241	THR	PRO	conflict	UNP P12497
K	144	GLY	-	expression tag	UNP P12497
K	145	GLY	-	expression tag	UNP P12497
K	241	THR	PRO	conflict	UNP P12497
L	144	GLY	-	expression tag	UNP P12497
L	145	GLY	-	expression tag	UNP P12497
L	241	THR	PRO	conflict	UNP P12497

- Molecule 2 is INOSITOL HEXAKISPHOSPHATE (CCD ID: IHP) (formula: $C_6H_{18}O_{24}P_6$) (labeled as "Ligand of Interest" by depositor).



Mol	Chain	Residues	Atoms				
2	H	1	Total	C	H	O	P
			42	6	6	24	6

- Molecule 3 is 1-{(2S)-2-(4-tert-butylphenyl)-2-[(2,3-dihydro-1H-inden-2-yl)amino]ethyl}-3-(trifluoromethyl)pyridin-2(1H)-one (CCD ID: A1CCZ) (formula: $C_{27}H_{29}F_3N_2O$) (labeled as "Ligand of Interest" by depositor).



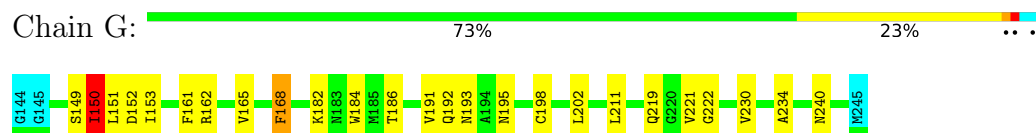
Mol	Chain	Residues	Atoms					
3	H	1	Total	C	F	H	N	O
			62	27	3	29	2	1

4 Residue-property plots [i](#)

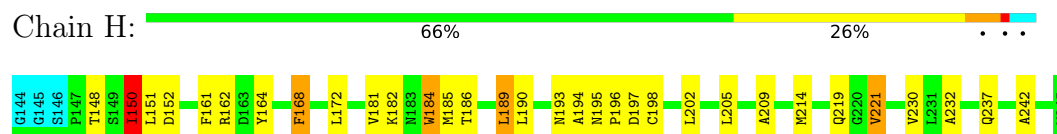
4.1 Average score per residue in the NMR ensemble

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

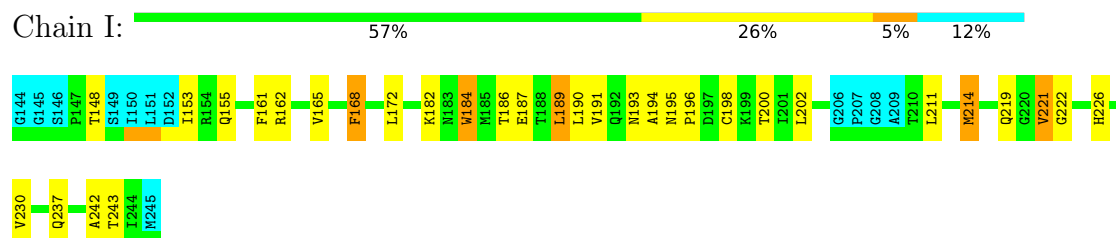
- Molecule 1: Capsid protein p24



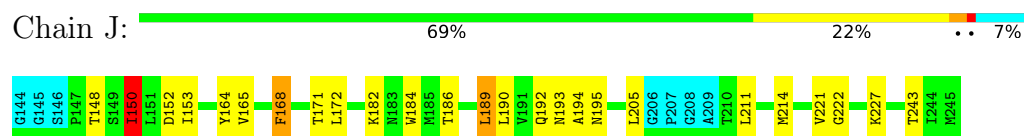
- Molecule 1: Capsid protein p24



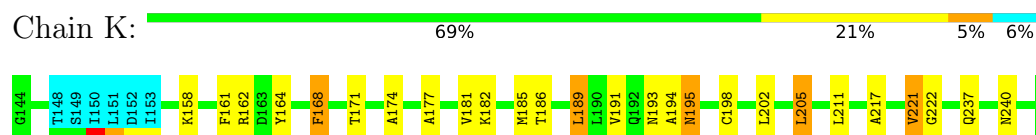
- Molecule 1: Capsid protein p24



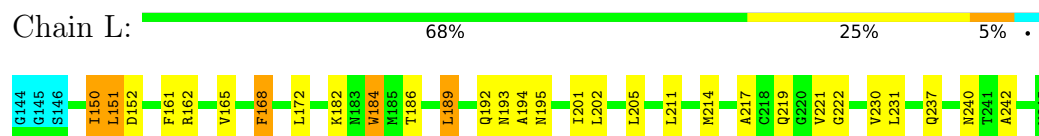
- Molecule 1: Capsid protein p24



- Molecule 1: Capsid protein p24



- Molecule 1: Capsid protein p24

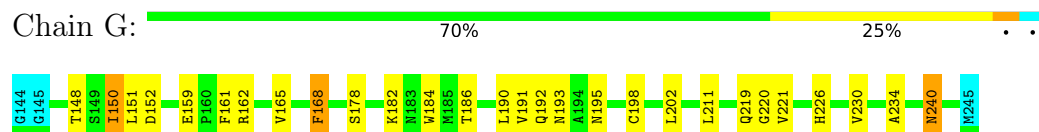


4.2 Scores per residue for each member of the ensemble

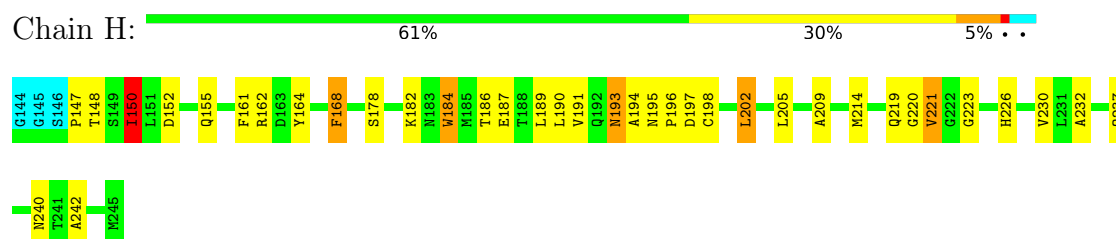
Colouring as in section 4.1 above.

4.2.1 Score per residue for model 1

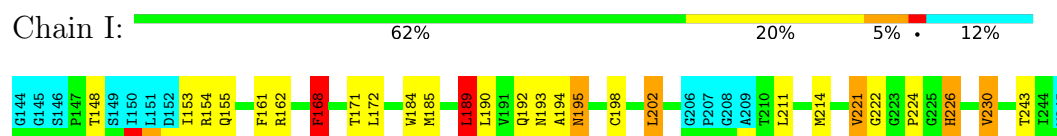
- Molecule 1: Capsid protein p24



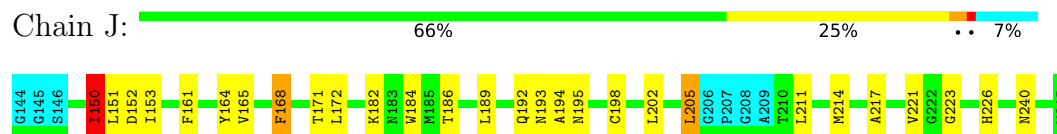
- Molecule 1: Capsid protein p24



- Molecule 1: Capsid protein p24

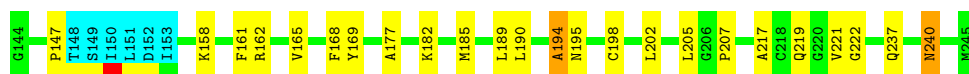


- Molecule 1: Capsid protein p24



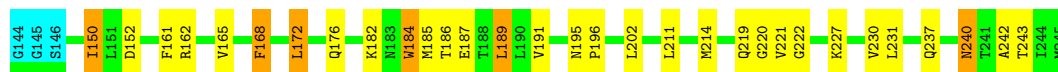
- Molecule 1: Capsid protein p24





- Molecule 1: Capsid protein p24

Chain L: 67% 25% 6%



4.2.2 Score per residue for model 2 (medoid)

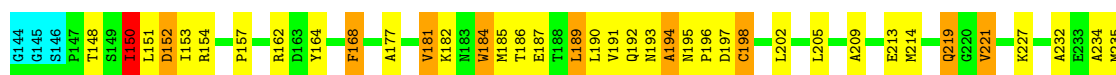
- Molecule 1: Capsid protein p24

Chain G: 66% 29% ..



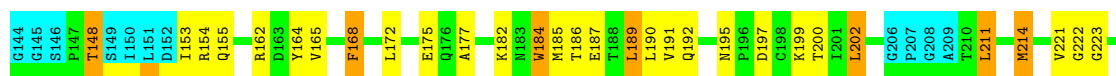
- Molecule 1: Capsid protein p24

Chain H: 60% 27% 9% ..



- Molecule 1: Capsid protein p24

Chain I: 52% 29% 7% 12%



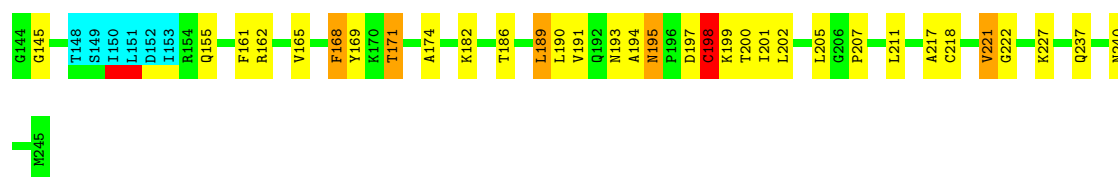
- Molecule 1: Capsid protein p24

Chain J: 64% 20% 9% 7%



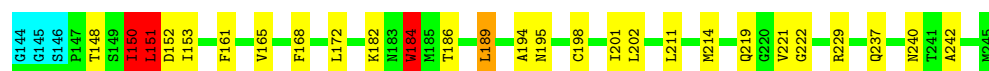
- Molecule 1: Capsid protein p24

Chain K: 62% 26% 5% 6%



- Molecule 1: Capsid protein p24

Chain L: 71% 23% ..



4.2.3 Score per residue for model 3

- Molecule 1: Capsid protein p24

Chain G: 72% 24% ..



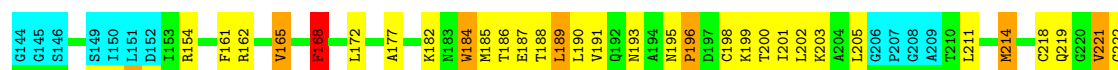
- Molecule 1: Capsid protein p24

Chain H: 65% 25% 8% .



- Molecule 1: Capsid protein p24

Chain I: 51% 30% 6% 12%

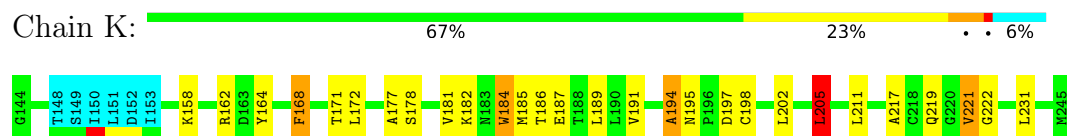


- Molecule 1: Capsid protein p24

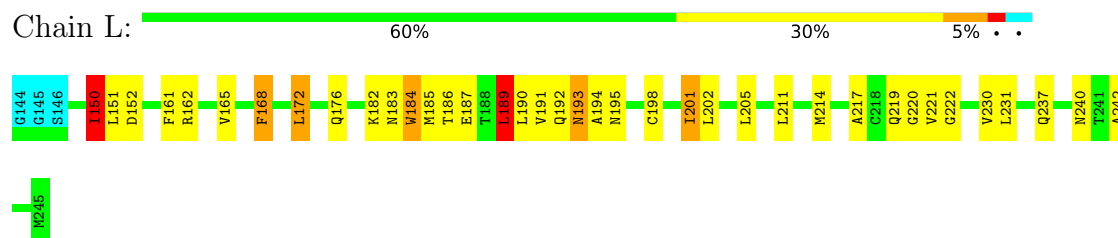
Chain J: 67% 23% 7%



- Molecule 1: Capsid protein p24

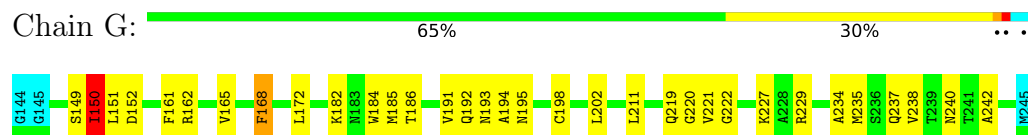


- Molecule 1: Capsid protein p24

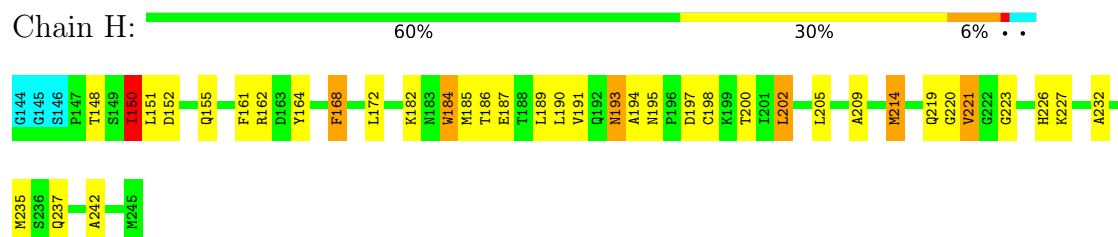


4.2.4 Score per residue for model 4

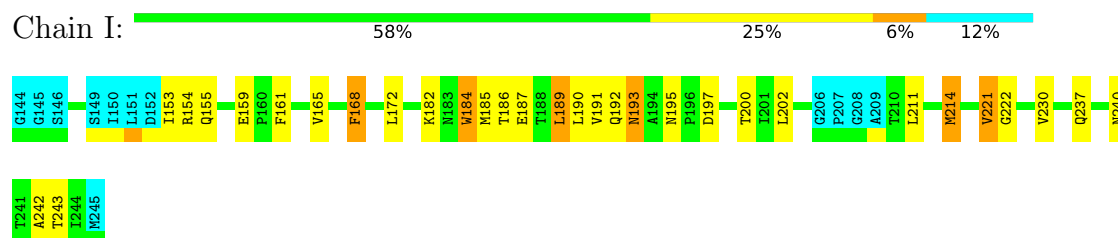
- Molecule 1: Capsid protein p24



- Molecule 1: Capsid protein p24

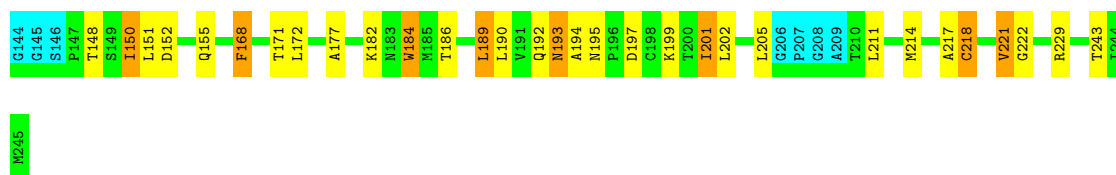


- Molecule 1: Capsid protein p24



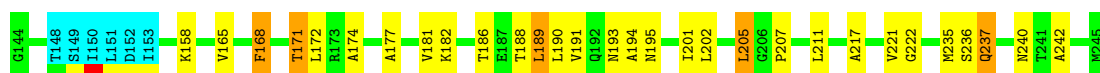
- Molecule 1: Capsid protein p24





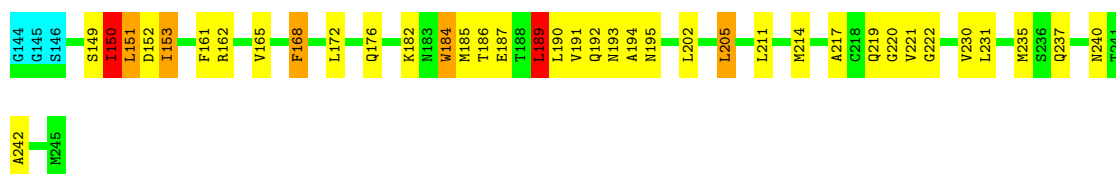
- Molecule 1: Capsid protein p24

Chain K: 65% 25% 5% 6%



- Molecule 1: Capsid protein p24

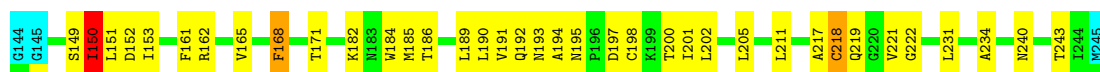
Chain L: 60% 30% 5% . .



4.2.5 Score per residue for model 5

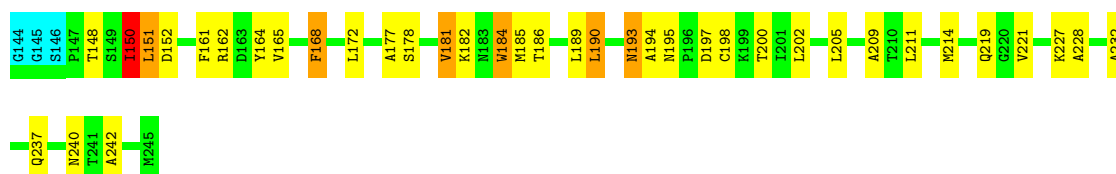
- Molecule 1: Capsid protein p24

Chain G: 61% 33% . . .



- Molecule 1: Capsid protein p24

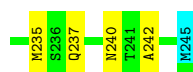
Chain H: 60% 30% 6% . .



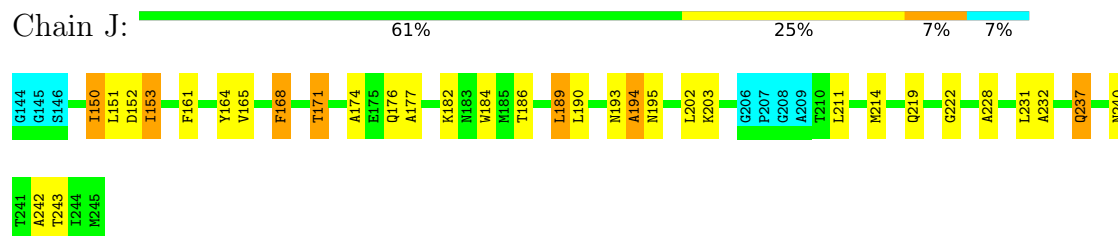
- Molecule 1: Capsid protein p24

Chain I: 55% 26% 6% . 12%

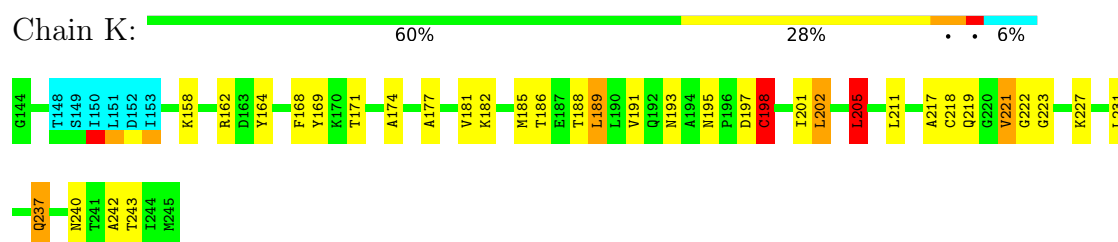




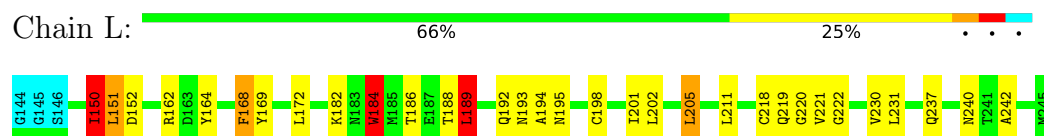
- Molecule 1: Capsid protein p24



- Molecule 1: Capsid protein p24

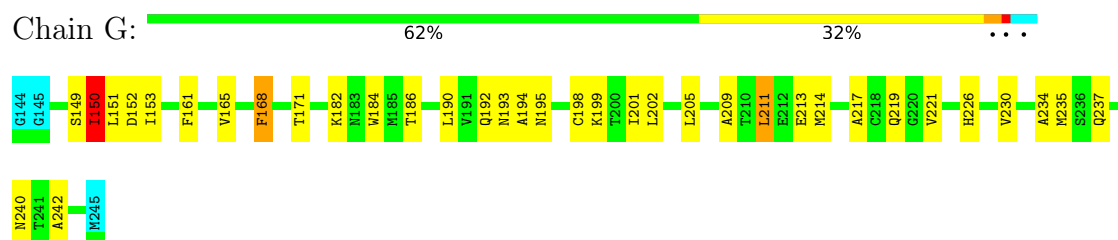


- Molecule 1: Capsid protein p24

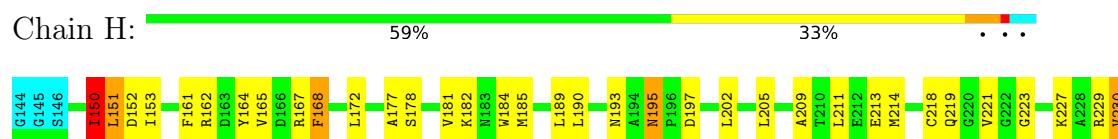


4.2.6 Score per residue for model 6

- Molecule 1: Capsid protein p24

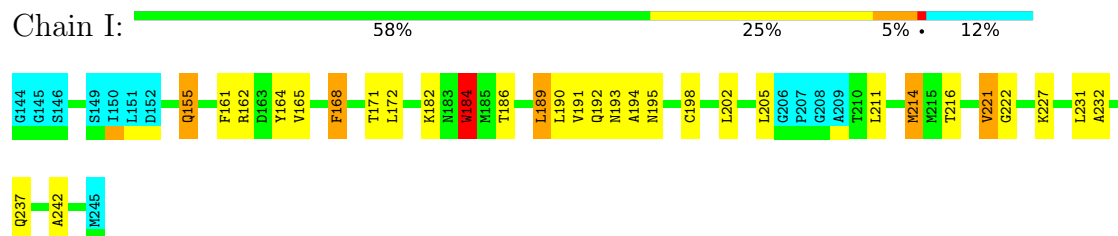


- Molecule 1: Capsid protein p24

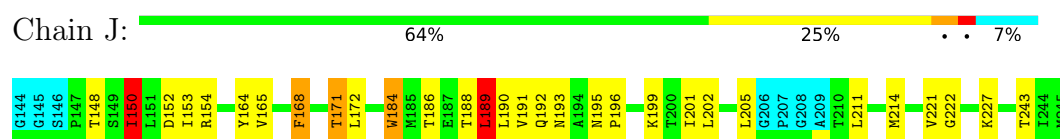




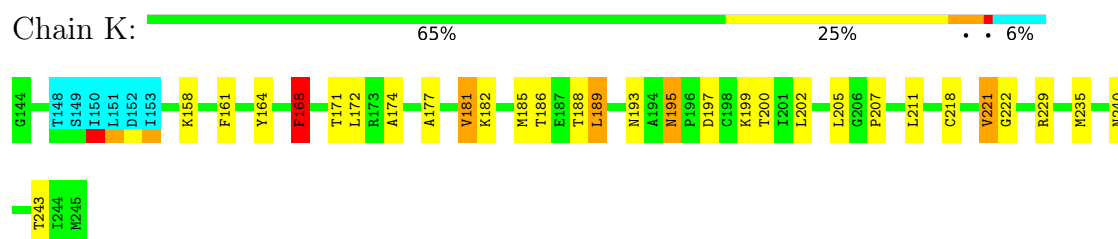
- Molecule 1: Capsid protein p24



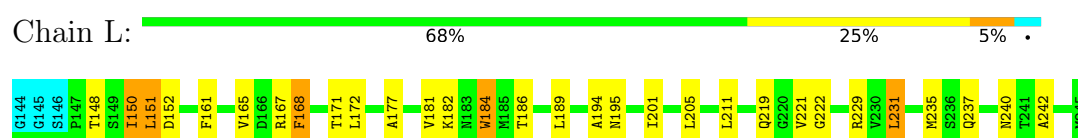
- Molecule 1: Capsid protein p24



- Molecule 1: Capsid protein p24

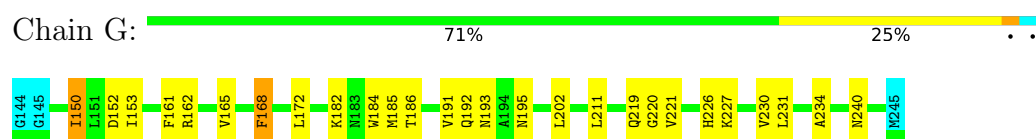


- Molecule 1: Capsid protein p24



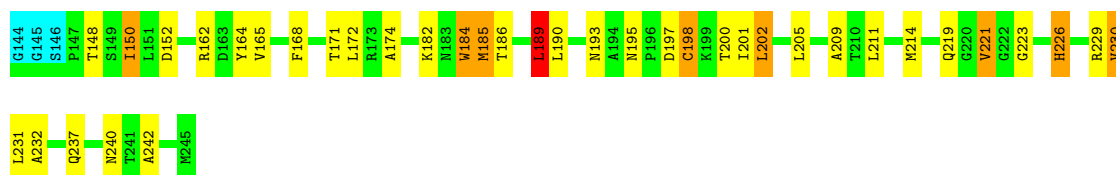
4.2.7 Score per residue for model 7

- Molecule 1: Capsid protein p24



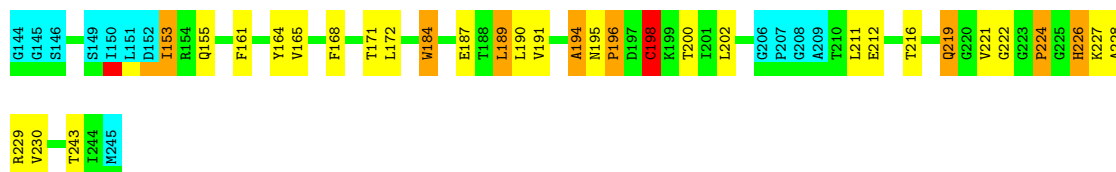
- Molecule 1: Capsid protein p24





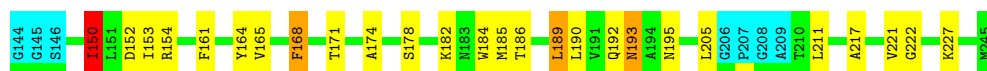
- Molecule 1: Capsid protein p24

Chain I: 57% 23% 8% • 12%



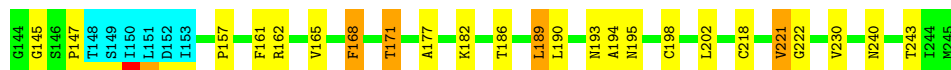
- Molecule 1: Capsid protein p24

Chain J: 68% 22% • • 7%



- Molecule 1: Capsid protein p24

Chain K: 71% 20% • 6%



- Molecule 1: Capsid protein p24

Chain L: 67% 26% • • •



4.2.8 Score per residue for model 8

- Molecule 1: Capsid protein p24

Chain G: 69% 25% • • •



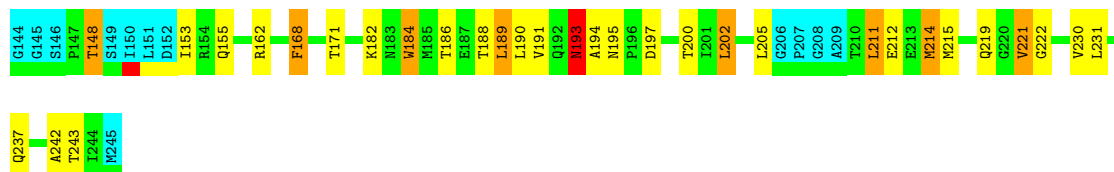
- Molecule 1: Capsid protein p24

Chain H: 64% 23% 11% •



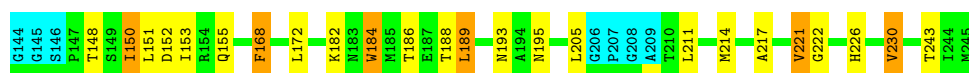
- Molecule 1: Capsid protein p24

Chain I: 57% 23% 8% 12%



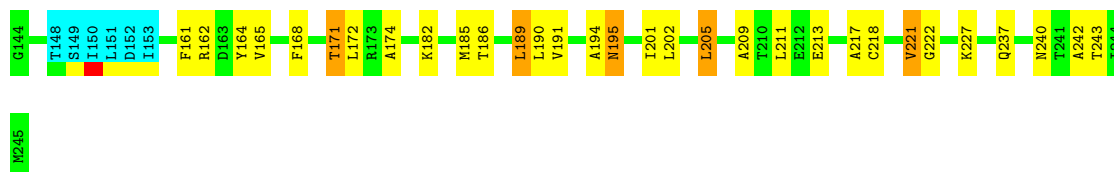
- Molecule 1: Capsid protein p24

Chain J: 70% 18% 6% 7%



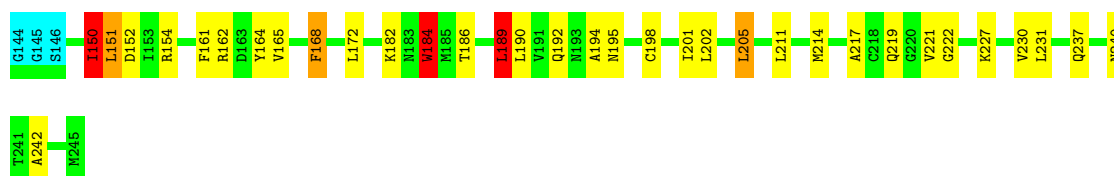
- Molecule 1: Capsid protein p24

Chain K: 64% 25% 5% 6%



- Molecule 1: Capsid protein p24

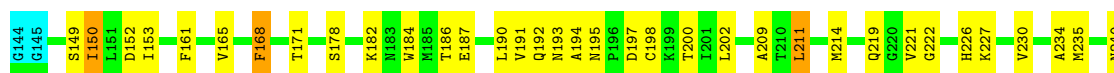
Chain L: 64% 27% . . .



4.2.9 Score per residue for model 9

- Molecule 1: Capsid protein p24

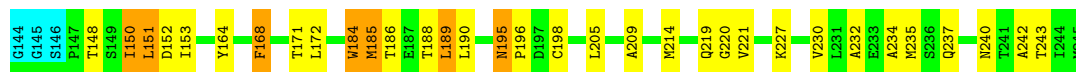
Chain G: 63% 31% . .





- Molecule 1: Capsid protein p24

Chain H: 65% 25% 7% .



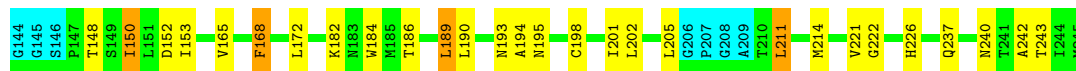
- Molecule 1: Capsid protein p24

Chain I: 58% 25% 6% 12%



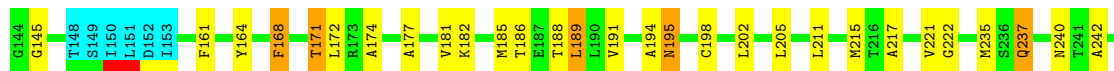
- Molecule 1: Capsid protein p24

Chain J: 66% 24% . 7%



- Molecule 1: Capsid protein p24

Chain K: 66% 24% 5% 6%



- Molecule 1: Capsid protein p24

Chain L: 64% 29% . .



4.2.10 Score per residue for model 10

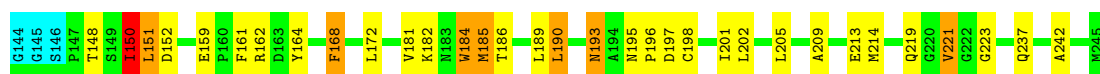
- Molecule 1: Capsid protein p24

Chain G:  71% 25% . .



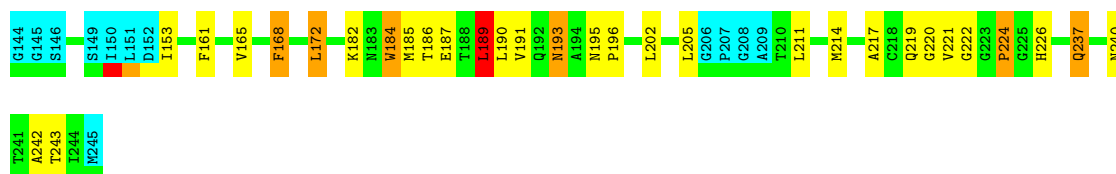
- Molecule 1: Capsid protein p24

Chain H:  65% 25% 7% . .



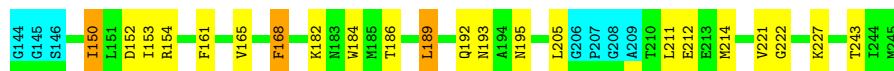
- Molecule 1: Capsid protein p24

Chain I:  58% 24% 6% . 12%



- Molecule 1: Capsid protein p24

Chain J:  72% 19% . 7%



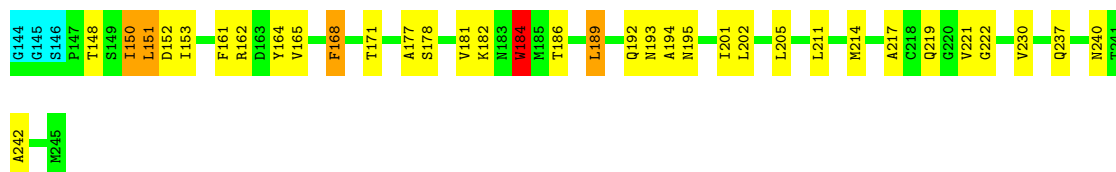
- Molecule 1: Capsid protein p24

Chain K:  68% 24% . 6%



- Molecule 1: Capsid protein p24

Chain L:  63% 29% . . .



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	

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	514
Number of shifts mapped to atoms	514
Number of unparsed shifts	0
Number of shifts with mapping errors	0
Number of shifts with mapping warnings	0
Assignment completeness (well-defined parts)	6%

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 i

6.1 Standard geometry i

Bond lengths and bond angles in the following residue types are not validated in this section: A1CCZ, IHP

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	G	1.39±0.02	6±1/769 (0.7± 0.2%)	1.50±0.02	10±2/1043 (1.0± 0.1%)
1	H	1.33±0.03	4±2/771 (0.6± 0.3%)	1.54±0.03	10±2/1041 (1.0± 0.2%)
1	I	1.27±0.05	2±2/712 (0.3± 0.2%)	1.56±0.03	11±2/964 (1.1± 0.2%)
1	J	1.17±0.02	1±1/750 (0.2± 0.1%)	1.48±0.04	11±2/1012 (1.0± 0.2%)
1	K	1.12±0.04	1±1/740 (0.2± 0.1%)	1.42±0.04	7±1/998 (0.7± 0.1%)
1	L	1.25±0.04	4±2/771 (0.5± 0.2%)	1.56±0.05	15±4/1041 (1.4± 0.4%)
All	All	1.26	185/45130 (0.4%)	1.51	635/60990 (1.0%)

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

Mol	Chain	Chirality	Planarity
1	I	0.0±0.0	0.1±0.3
All	All	0	1

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	L	221	VAL	C-N	13.95	1.44	1.33	7	10
1	I	221	VAL	C-N	9.88	1.42	1.32	10	4
1	L	152	ASP	C-N	9.85	1.43	1.33	9	6
1	J	221	VAL	C-N	9.01	1.41	1.32	9	5
1	H	152	ASP	C-N	8.13	1.41	1.33	9	2
1	J	152	ASP	C-N	8.02	1.44	1.33	8	3
1	H	198	CYS	C-O	-7.37	1.14	1.24	3	5
1	K	221	VAL	C-N	7.14	1.42	1.33	3	8
1	G	221	VAL	C-N	7.12	1.41	1.32	2	10

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)	Models	
								Worst	Total
1	I	219	GLN	C-N	6.91	1.41	1.33	10	1
1	H	185	MET	N-CA	-6.72	1.39	1.46	7	5
1	G	219	GLN	C-N	6.70	1.42	1.33	2	8
1	H	152	ASP	N-CA	-6.58	1.38	1.46	2	2
1	G	221	VAL	N-CA	6.49	1.54	1.46	1	10
1	H	151	LEU	CA-C	-6.48	1.45	1.52	2	2
1	G	150	ILE	C-N	-6.35	1.25	1.33	6	5
1	G	149	SER	C-N	6.27	1.42	1.33	2	6
1	G	198	CYS	C-O	-6.15	1.16	1.24	4	6
1	H	151	LEU	C-N	6.14	1.41	1.33	5	1
1	H	219	GLN	C-N	6.14	1.40	1.33	4	2
1	H	221	VAL	C-N	6.11	1.42	1.33	10	6
1	I	221	VAL	N-CA	6.04	1.54	1.46	1	3
1	L	152	ASP	N-CA	-6.00	1.39	1.46	8	2
1	I	196	PRO	N-CA	5.99	1.54	1.47	7	4
1	G	150	ILE	C-O	-5.99	1.17	1.24	6	5
1	H	184	TRP	N-CA	5.93	1.53	1.46	2	7
1	I	198	CYS	C-O	-5.92	1.16	1.24	7	2
1	I	202	LEU	N-CA	-5.91	1.38	1.46	9	1
1	H	150	ILE	C-N	-5.79	1.26	1.33	2	1
1	H	194	ALA	CA-C	-5.77	1.47	1.53	5	1
1	L	150	ILE	CA-C	-5.76	1.45	1.52	2	2
1	I	155	GLN	CA-C	-5.74	1.45	1.52	6	1
1	I	189	LEU	CA-C	-5.73	1.45	1.52	9	3
1	H	189	LEU	N-CA	5.70	1.53	1.46	9	2
1	G	220	GLY	C-O	-5.62	1.18	1.24	7	5
1	H	194	ALA	N-CA	-5.56	1.39	1.46	2	2
1	H	229	ARG	CA-C	5.54	1.60	1.52	7	2
1	L	221	VAL	N-CA	5.50	1.53	1.46	5	2
1	I	224	PRO	C-N	-5.43	1.26	1.33	10	1
1	K	184	TRP	CA-C	5.43	1.60	1.52	3	1
1	L	198	CYS	C-O	-5.42	1.17	1.24	2	2
1	L	151	LEU	N-CA	-5.42	1.40	1.46	4	1
1	L	194	ALA	CA-C	-5.42	1.47	1.53	7	1
1	H	150	ILE	N-CA	5.41	1.53	1.46	1	2
1	I	153	ILE	C-O	-5.39	1.17	1.24	8	1
1	L	220	GLY	C-O	-5.36	1.17	1.23	1	4
1	I	220	GLY	C-O	-5.34	1.18	1.24	10	1
1	H	196	PRO	N-CA	5.34	1.54	1.47	8	1
1	I	191	VAL	N-CA	5.32	1.53	1.46	5	1
1	L	189	LEU	CA-C	-5.30	1.46	1.52	4	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)	Models	
								Worst	Total
1	J	151	LEU	N-CA	-5.26	1.40	1.46	1	1
1	G	150	ILE	N-CA	5.25	1.52	1.46	5	1
1	H	198	CYS	N-CA	-5.25	1.39	1.46	5	1
1	K	201	ILE	C-O	-5.22	1.19	1.24	2	1
1	J	152	ASP	CA-C	5.21	1.59	1.53	9	1
1	K	223	GLY	C-N	-5.15	1.27	1.34	5	1
1	J	153	ILE	CA-CB	5.11	1.60	1.54	5	1
1	I	222	GLY	CA-C	-5.10	1.46	1.52	1	1
1	H	184	TRP	CG-CD2	5.08	1.52	1.43	3	1
1	L	169	TYR	CA-C	5.06	1.59	1.52	5	1
1	G	152	ASP	N-CA	-5.06	1.40	1.46	9	1
1	J	194	ALA	N-CA	-5.06	1.40	1.46	3	1
1	L	183	ASN	CA-C	5.02	1.59	1.52	3	1
1	K	219	GLN	C-N	5.00	1.40	1.33	3	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	L	184	TRP	N-CA-C	-10.72	99.56	111.14	5	10
1	L	151	LEU	N-CA-C	-10.49	98.72	112.68	7	6
1	I	222	GLY	CA-C-O	-10.25	115.07	122.45	1	5
1	H	151	LEU	N-CA-C	-9.94	99.46	112.68	2	3
1	H	152	ASP	N-CA-CB	-8.69	96.22	111.42	2	1
1	I	192	GLN	N-CA-C	8.63	120.30	111.07	2	4
1	I	189	LEU	N-CA-C	-8.46	102.00	111.14	1	8
1	G	192	GLN	N-CA-C	8.33	119.99	111.07	4	10
1	H	219	GLN	N-CA-C	-8.23	102.50	112.54	4	10
1	J	222	GLY	CA-C-O	-8.10	116.62	122.45	4	4
1	G	219	GLN	N-CA-C	-8.02	102.75	112.54	5	10
1	I	193	ASN	CA-CB-CG	-7.98	104.62	112.60	1	3
1	L	189	LEU	N-CA-CB	7.97	122.07	110.20	9	8
1	L	193	ASN	OD1-CG-ND2	-7.94	114.66	122.60	5	3
1	H	197	ASP	N-CA-C	-7.85	102.41	110.97	8	2
1	I	184	TRP	N-CA-C	-7.78	102.88	111.36	10	4
1	H	152	ASP	CA-C-O	-7.77	112.67	119.97	2	1
1	I	222	GLY	N-CA-C	-7.67	104.22	112.04	1	2
1	K	194	ALA	N-CA-C	7.65	120.92	107.61	3	7
1	G	152	ASP	CA-C-N	-7.55	110.42	120.91	8	10
1	G	152	ASP	C-N-CA	-7.55	110.42	120.91	8	10
1	K	221	VAL	CA-C-O	-7.51	114.61	121.97	1	9

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)	Models	
								Worst	Total
1	J	192	GLN	N-CA-C	7.42	119.00	111.07	4	7
1	J	152	ASP	CA-C-N	-7.38	110.64	120.91	9	10
1	J	152	ASP	C-N-CA	-7.38	110.64	120.91	9	10
1	I	221	VAL	CA-C-O	-7.29	114.83	121.97	8	4
1	H	221	VAL	CA-C-O	-7.28	114.30	121.58	6	10
1	I	202	LEU	N-CA-C	-7.19	103.44	111.28	1	5
1	H	192	GLN	N-CA-C	7.17	118.89	111.14	2	1
1	I	214	MET	N-CA-C	-7.12	103.45	111.07	4	6
1	J	201	ILE	CB-CA-C	-7.05	102.78	112.02	3	4
1	G	221	VAL	CA-C-O	-6.91	114.48	121.59	7	10
1	L	152	ASP	CA-C-N	-6.82	110.11	121.63	9	10
1	L	152	ASP	C-N-CA	-6.82	110.11	121.63	9	10
1	I	193	ASN	CB-CG-ND2	6.81	126.61	116.40	5	2
1	H	161	PHE	CA-CB-CG	-6.80	107.00	113.80	1	4
1	I	219	GLN	N-CA-C	-6.77	104.88	113.01	7	4
1	I	155	GLN	N-CA-CB	6.74	121.16	110.23	6	1
1	L	152	ASP	N-CA-CB	-6.72	101.79	111.54	2	4
1	J	194	ALA	N-CA-C	6.71	120.24	107.75	5	5
1	L	221	VAL	CA-C-N	-6.67	113.53	122.54	5	5
1	L	221	VAL	C-N-CA	-6.67	113.53	122.54	5	5
1	H	152	ASP	CA-C-N	-6.66	112.55	122.01	9	9
1	H	152	ASP	C-N-CA	-6.66	112.55	122.01	9	9
1	I	168	PHE	N-CA-C	-6.65	104.11	111.36	1	2
1	H	221	VAL	CA-C-N	-6.63	113.59	122.54	4	5
1	H	221	VAL	C-N-CA	-6.63	113.59	122.54	4	5
1	J	152	ASP	N-CA-CB	-6.62	101.06	111.39	10	1
1	I	222	GLY	CA-C-N	-6.58	111.54	121.87	1	9
1	I	222	GLY	C-N-CA	-6.58	111.54	121.87	1	9
1	J	221	VAL	CA-C-O	-6.49	113.82	121.80	4	6
1	H	150	ILE	CA-C-O	6.49	128.89	120.78	2	1
1	L	151	LEU	CA-C-O	-6.46	114.03	120.82	5	1
1	L	150	ILE	N-CA-CB	6.43	121.84	111.23	8	3
1	I	165	VAL	N-CA-C	-6.38	104.11	110.62	3	2
1	L	201	ILE	CB-CA-C	-6.36	103.82	111.97	2	6
1	L	193	ASN	CA-CB-CG	-6.32	106.28	112.60	5	2
1	I	228	ALA	N-CA-C	-6.26	104.46	111.28	2	3
1	J	222	GLY	CA-C-N	-6.25	112.05	121.87	6	8
1	J	222	GLY	C-N-CA	-6.25	112.05	121.87	6	8
1	H	205	LEU	CB-CA-C	-6.25	101.02	110.90	8	2
1	L	222	GLY	CA-C-O	-6.24	117.27	122.33	7	3
1	H	230	VAL	N-CA-C	6.23	117.72	110.62	1	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)	Models	
								Worst	Total
1	L	219	GLN	N-CA-C	-6.22	104.55	111.71	2	10
1	H	151	LEU	CA-C-O	-6.22	113.96	120.55	6	3
1	L	184	TRP	N-CA-CB	6.22	119.09	110.07	5	1
1	J	221	VAL	CA-C-N	-6.19	114.18	122.54	10	5
1	J	221	VAL	C-N-CA	-6.19	114.18	122.54	10	5
1	H	200	THR	N-CA-C	-6.19	104.61	111.36	3	1
1	K	222	GLY	CA-C-N	-6.18	112.16	121.87	6	9
1	K	222	GLY	C-N-CA	-6.18	112.16	121.87	6	9
1	K	221	VAL	CA-C-N	-6.18	114.20	122.54	6	2
1	K	221	VAL	C-N-CA	-6.18	114.20	122.54	6	2
1	I	189	LEU	N-CA-CB	6.17	119.28	110.16	2	2
1	J	154	ARG	N-CA-C	6.15	118.96	109.07	7	4
1	H	228	ALA	N-CA-C	-6.14	104.59	111.28	5	1
1	L	192	GLN	N-CA-C	6.12	117.95	111.28	8	5
1	H	194	ALA	CA-C-O	-6.07	114.30	122.44	5	1
1	L	194	ALA	N-CA-C	6.07	119.67	107.41	6	6
1	G	221	VAL	CA-C-N	-6.06	114.36	122.54	5	8
1	G	221	VAL	C-N-CA	-6.06	114.36	122.54	5	8
1	J	153	ILE	N-CA-C	-5.99	101.84	109.80	5	1
1	I	153	ILE	N-CA-C	-5.97	101.86	109.80	8	3
1	I	153	ILE	CA-C-O	-5.96	115.45	121.59	8	1
1	L	231	LEU	N-CA-C	-5.93	104.72	111.07	8	4
1	H	226	HIS	CA-CB-CG	-5.92	107.88	113.80	7	1
1	H	190	LEU	N-CA-C	-5.91	105.33	112.54	3	3
1	J	150	ILE	N-CA-CB	5.88	120.94	111.23	6	3
1	K	172	LEU	N-CA-C	-5.87	105.01	111.82	8	3
1	I	223	GLY	CA-C-N	5.86	126.00	119.32	9	2
1	I	223	GLY	C-N-CA	5.86	126.00	119.32	9	2
1	L	240	ASN	N-CA-C	5.85	120.22	111.96	4	10
1	L	193	ASN	CB-CG-ND2	5.85	125.17	116.40	5	1
1	J	184	TRP	N-CA-C	-5.78	104.98	111.28	4	1
1	I	198	CYS	N-CA-C	-5.74	104.63	111.69	5	1
1	I	221	VAL	CA-C-N	-5.74	114.94	122.63	10	2
1	I	221	VAL	C-N-CA	-5.74	114.94	122.63	10	2
1	L	151	LEU	CA-C-N	-5.74	113.49	122.73	4	3
1	L	151	LEU	C-N-CA	-5.74	113.49	122.73	4	3
1	K	201	ILE	CB-CA-C	-5.74	104.37	111.94	2	1
1	J	151	LEU	CA-C-N	-5.73	114.01	122.83	1	4
1	J	151	LEU	C-N-CA	-5.73	114.01	122.83	1	4
1	I	224	PRO	N-CA-C	5.70	124.22	112.47	7	1
1	G	222	GLY	CA-C-N	-5.69	112.94	121.87	3	7

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)	Models	
								Worst	Total
1	G	222	GLY	C-N-CA	-5.69	112.94	121.87	3	7
1	I	226	HIS	CA-CB-CG	-5.67	108.12	113.80	7	1
1	J	205	LEU	N-CA-C	-5.66	104.49	111.33	1	1
1	L	222	GLY	CA-C-N	-5.64	113.02	121.87	5	7
1	L	222	GLY	C-N-CA	-5.64	113.02	121.87	5	7
1	J	189	LEU	N-CA-CB	5.64	118.36	110.07	5	3
1	H	154	ARG	N-CA-C	5.63	118.62	108.48	8	2
1	K	237	GLN	N-CA-C	-5.62	105.24	111.36	10	6
1	K	219	GLN	N-CA-C	-5.61	105.70	112.54	3	3
1	J	189	LEU	CB-CA-C	-5.60	101.84	110.81	2	2
1	I	193	ASN	OD1-CG-ND2	-5.57	117.03	122.60	5	1
1	H	150	ILE	N-CA-CB	5.56	120.41	111.23	2	1
1	K	240	ASN	N-CA-C	5.55	120.05	111.56	5	9
1	H	151	LEU	CA-C-N	-5.53	113.83	122.73	5	1
1	H	151	LEU	C-N-CA	-5.53	113.83	122.73	5	1
1	I	154	ARG	N-CA-C	5.52	118.81	109.76	4	4
1	J	151	LEU	CA-C-O	-5.52	115.00	120.90	5	2
1	J	151	LEU	N-CA-C	-5.51	104.91	111.69	4	1
1	L	222	GLY	N-CA-C	5.51	117.69	111.85	2	2
1	J	240	ASN	N-CA-C	5.50	119.97	111.56	9	2
1	K	169	TYR	N-CA-C	-5.47	105.39	111.36	5	2
1	K	222	GLY	CA-C-O	-5.47	116.84	121.66	2	2
1	I	240	ASN	N-CA-C	5.46	119.92	111.56	4	5
1	I	194	ALA	N-CA-C	5.45	118.10	108.24	7	2
1	H	201	ILE	CB-CA-C	-5.45	104.85	111.87	7	1
1	L	189	LEU	N-CA-C	-5.43	105.01	111.69	1	1
1	J	219	GLN	N-CA-C	-5.42	105.93	112.54	5	1
1	L	221	VAL	CA-C-O	-5.41	114.02	120.78	5	4
1	G	240	ASN	N-CA-C	5.39	119.81	111.56	1	10
1	K	205	LEU	N-CA-C	-5.38	105.42	111.28	5	3
1	L	193	ASN	CB-CA-C	-5.38	99.20	110.17	5	1
1	G	152	ASP	CA-C-O	-5.35	114.08	120.55	5	4
1	L	205	LEU	N-CA-C	-5.34	105.35	111.07	8	4
1	J	231	LEU	N-CA-C	-5.32	105.56	111.36	5	1
1	K	172	LEU	N-CA-CB	5.32	118.55	110.14	3	1
1	G	194	ALA	N-CA-C	5.32	116.66	109.11	5	4
1	G	201	ILE	CB-CA-C	-5.31	105.06	112.02	6	1
1	H	151	LEU	CB-CA-C	5.31	117.57	109.34	9	1
1	H	201	ILE	N-CA-CB	5.30	116.64	110.65	7	1
1	L	218	CYS	CA-CB-SG	-5.30	102.22	114.40	7	1
1	K	168	PHE	CA-CB-CG	-5.29	108.51	113.80	6	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)	Models	
								Worst	Total
1	G	218	CYS	CA-CB-SG	-5.28	102.25	114.40	5	2
1	G	155	GLN	OE1-CD-NE2	-5.28	117.32	122.60	2	1
1	I	155	GLN	CB-CA-C	-5.28	100.82	109.53	6	1
1	H	195	ASN	CA-CB-CG	-5.26	107.34	112.60	6	1
1	H	157	PRO	N-CA-C	-5.24	106.57	113.65	2	1
1	H	240	ASN	N-CA-C	5.23	119.56	111.56	5	4
1	H	193	ASN	OD1-CG-ND2	-5.23	117.37	122.60	8	1
1	H	188	THR	N-CA-C	5.21	119.61	112.68	9	1
1	I	184	TRP	O-C-N	5.21	127.72	122.09	6	1
1	L	153	ILE	N-CA-C	-5.20	102.38	109.55	4	1
1	H	220	GLY	N-CA-C	-5.19	106.44	113.24	8	4
1	J	237	GLN	N-CA-C	-5.18	105.72	111.36	5	1
1	H	198	CYS	N-CA-CB	5.18	117.58	110.07	8	1
1	J	226	HIS	CA-CB-CG	-5.14	108.66	113.80	1	1
1	G	220	GLY	N-CA-C	-5.09	109.07	114.67	7	1
1	I	205	LEU	N-CA-C	-5.08	105.74	111.28	8	1
1	H	148	THR	N-CA-C	5.08	118.21	111.30	7	1
1	I	237	GLN	N-CA-C	-5.08	105.82	111.36	10	1
1	H	195	ASN	CA-C-N	5.07	126.18	119.84	9	1
1	H	195	ASN	C-N-CA	5.07	126.18	119.84	9	1
1	L	154	ARG	N-CA-C	5.04	118.34	110.32	8	1
1	J	168	PHE	CA-CB-CG	-5.02	108.78	113.80	3	1
1	K	198	CYS	N-CA-C	-5.01	106.00	111.82	2	2
1	L	189	LEU	O-C-N	5.01	127.50	122.09	4	1

There are no chirality outliers.

All unique planar outliers are listed below.

Mol	Chain	Res	Type	Group	Models (Total)
1	I	162	ARG	Sidechain	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	G	756	761	761	12±3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Non-H	H(model)	H(added)	Clashes
1	H	759	765	765	21±4
1	I	700	707	707	18±6
1	J	739	747	747	13±4
1	K	728	729	726	13±3
1	L	759	765	765	14±2
3	H	33	29	0	0±1
All	All	45100	45090	44770	868

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 10.

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

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:L:150:ILE:HD11	1:L:171:THR:HG23	0.87	1.44	6	4
1:G:234:ALA:HB1	1:H:232:ALA:HB2	0.85	1.47	1	7
1:H:234:ALA:HB1	1:I:232:ALA:HB2	0.80	1.53	9	2
1:I:153:ILE:HG22	1:I:189:LEU:HD21	0.79	1.53	9	3
1:H:152:ASP:HA	1:H:189:LEU:HD11	0.79	1.54	2	1
1:H:234:ALA:HB3	1:I:231:LEU:HD23	0.77	1.57	8	1
1:I:165:VAL:HG22	1:I:190:LEU:HD11	0.76	1.55	6	3
1:L:165:VAL:HG22	1:L:190:LEU:HD11	0.75	1.58	8	3
1:K:165:VAL:HG22	1:K:190:LEU:HD11	0.75	1.59	1	4
1:K:235:MET:SD	1:L:235:MET:HE2	0.74	2.23	4	2
1:H:164:TYR:CE2	1:H:190:LEU:HD12	0.73	2.19	8	10
1:J:165:VAL:HG22	1:J:190:LEU:HD11	0.73	1.59	5	4
1:J:153:ILE:HG22	1:J:189:LEU:HD21	0.73	1.59	10	3
1:L:150:ILE:HG23	1:L:189:LEU:HD22	0.72	1.61	4	2
1:K:205:LEU:HD11	1:K:217:ALA:HB2	0.72	1.59	8	4
1:J:153:ILE:HG23	1:J:164:TYR:CE1	0.72	2.20	7	3
1:K:191:VAL:HG22	1:K:202:LEU:HD23	0.71	1.62	2	3
1:K:182:LYS:O	1:K:186:THR:HG23	0.70	1.86	10	9
1:G:182:LYS:O	1:G:186:THR:HG23	0.70	1.87	3	10
1:H:153:ILE:HG23	1:H:164:TYR:CE1	0.70	2.21	2	2
1:J:182:LYS:O	1:J:186:THR:HG23	0.70	1.87	1	6
1:L:182:LYS:O	1:L:186:THR:HG23	0.70	1.87	1	10
1:H:168:PHE:CD2	1:H:190:LEU:HD13	0.69	2.21	8	4
1:H:165:VAL:HG22	1:H:190:LEU:HD11	0.69	1.64	6	2
1:H:191:VAL:HG22	1:H:202:LEU:HD23	0.69	1.64	2	2
1:L:184:TRP:CH2	1:L:189:LEU:HD23	0.69	2.23	7	1
1:H:182:LYS:O	1:H:186:THR:HG23	0.69	1.87	2	6
1:I:153:ILE:CG2	1:I:189:LEU:HD21	0.69	2.18	1	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:I:161:PHE:O	1:I:165:VAL:HG23	0.68	1.88	9	6
1:G:209:ALA:O	1:G:214:MET:HE2	0.68	1.88	8	4
1:L:150:ILE:HG22	1:L:189:LEU:HD23	0.68	1.66	8	2
1:J:150:ILE:HD11	1:J:168:PHE:O	0.68	1.89	3	1
1:H:172:LEU:HD21	1:H:185:MET:SD	0.68	2.29	8	8
1:L:184:TRP:CZ2	1:L:189:LEU:HD22	0.67	2.24	2	2
1:L:153:ILE:HG21	1:L:168:PHE:HB2	0.67	1.65	4	2
1:K:161:PHE:CE1	1:K:202:LEU:HD11	0.67	2.24	9	5
1:J:168:PHE:CE1	1:J:186:THR:HG22	0.67	2.24	5	4
1:J:153:ILE:HD13	1:J:171:THR:HG21	0.67	1.64	6	2
1:H:234:ALA:CB	1:I:232:ALA:HB2	0.66	2.20	9	2
1:G:238:VAL:HG21	1:H:235:MET:CB	0.66	2.20	2	2
1:H:197:ASP:HB2	1:H:221:VAL:HG13	0.66	1.68	1	5
1:I:189:LEU:HD11	1:I:193:ASN:ND2	0.65	2.07	6	3
1:K:198:CYS:SG	1:K:202:LEU:HD22	0.65	2.32	5	1
1:G:235:MET:SD	1:H:235:MET:HE2	0.65	2.32	3	4
1:K:201:ILE:CG2	1:K:217:ALA:HB1	0.64	2.22	8	3
1:I:202:LEU:HD23	1:I:214:MET:SD	0.64	2.32	8	2
1:I:190:LEU:O	1:I:194:ALA:HB3	0.64	1.93	8	4
1:L:161:PHE:O	1:L:165:VAL:HG23	0.64	1.93	4	9
1:K:161:PHE:O	1:K:165:VAL:HG23	0.63	1.93	8	4
1:L:168:PHE:CE1	1:L:172:LEU:HD11	0.63	2.27	8	3
1:H:153:ILE:HG22	1:H:189:LEU:CD2	0.63	2.22	2	1
1:I:153:ILE:HG22	1:I:189:LEU:CD2	0.62	2.24	4	1
1:G:238:VAL:HG21	1:H:235:MET:HB2	0.62	1.72	4	2
1:I:187:GLU:O	1:I:191:VAL:HG23	0.62	1.93	7	6
1:I:189:LEU:HD11	1:I:193:ASN:HD21	0.62	1.54	3	1
1:H:161:PHE:O	1:H:165:VAL:HG23	0.62	1.94	6	3
1:K:197:ASP:O	1:K:200:THR:HG22	0.62	1.95	2	2
1:I:189:LEU:HD21	1:I:193:ASN:OD1	0.62	1.95	8	1
1:L:151:LEU:O	1:L:189:LEU:HD21	0.62	1.95	2	1
1:I:184:TRP:CZ3	1:I:188:THR:HG22	0.62	2.29	9	3
1:J:187:GLU:O	1:J:191:VAL:HG23	0.62	1.95	3	1
1:L:150:ILE:O	1:L:189:LEU:HD23	0.61	1.94	8	2
1:I:175:GLU:OE1	1:I:177:ALA:HB2	0.61	1.95	2	1
1:J:153:ILE:HG21	1:J:168:PHE:HB2	0.61	1.70	6	6
1:H:209:ALA:O	1:H:214:MET:HE2	0.61	1.95	9	3
1:K:168:PHE:CE1	1:K:186:THR:HG22	0.60	2.31	4	9
1:H:205:LEU:HD11	1:H:217:ALA:CB	0.60	2.27	8	2
1:J:189:LEU:HD21	1:J:193:ASN:CG	0.60	2.21	7	2
1:L:165:VAL:HG13	1:L:168:PHE:CE2	0.60	2.32	9	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:G:234:ALA:CB	1:H:232:ALA:HB2	0.60	2.25	1	1
1:I:184:TRP:CZ2	1:I:189:LEU:HD12	0.60	2.32	4	4
1:I:189:LEU:HD11	1:I:193:ASN:OD1	0.60	1.96	5	3
1:J:168:PHE:CE1	1:J:172:LEU:HD11	0.60	2.32	1	7
1:H:197:ASP:O	1:H:200:THR:HG22	0.59	1.97	7	3
1:G:205:LEU:HD11	1:G:217:ALA:CB	0.59	2.27	6	1
1:H:150:ILE:HG23	1:H:189:LEU:HD22	0.59	1.74	2	5
1:H:153:ILE:N	1:H:189:LEU:HD21	0.59	2.13	2	1
1:L:167:ARG:O	1:L:171:THR:HG22	0.59	1.97	6	1
1:I:155:GLN:HE21	1:I:194:ALA:HB1	0.59	1.57	8	1
1:J:150:ILE:HG23	1:J:189:LEU:HG	0.59	1.74	7	1
1:K:205:LEU:CD1	1:K:217:ALA:HB2	0.59	2.28	8	3
1:L:184:TRP:HZ2	1:L:189:LEU:HD22	0.59	1.58	8	2
1:L:168:PHE:CZ	1:L:186:THR:HG22	0.58	2.33	5	6
1:K:184:TRP:CZ2	1:K:185:MET:HE3	0.58	2.33	3	1
1:L:189:LEU:HD13	1:L:189:LEU:O	0.58	1.97	7	2
1:J:205:LEU:HD11	1:J:217:ALA:HB3	0.58	1.74	7	3
1:K:205:LEU:HD11	1:K:217:ALA:CB	0.58	2.29	1	5
1:H:153:ILE:HG23	1:H:164:TYR:HE1	0.57	1.59	2	1
1:L:150:ILE:HD13	1:L:172:LEU:HG	0.57	1.76	7	1
1:L:168:PHE:CE1	1:L:186:THR:HG22	0.57	2.35	10	2
1:L:205:LEU:HD11	1:L:217:ALA:HB3	0.56	1.75	3	5
1:H:177:ALA:HB3	1:H:182:LYS:HE3	0.56	1.77	5	2
1:I:164:TYR:CZ	1:I:194:ALA:HB2	0.56	2.34	6	1
1:I:165:VAL:HG13	1:I:168:PHE:CD2	0.56	2.36	2	3
1:H:150:ILE:C	1:H:151:LEU:HD12	0.56	2.25	9	1
1:G:191:VAL:HG22	1:G:202:LEU:HD23	0.56	1.77	3	6
1:K:205:LEU:HD11	1:K:217:ALA:HB3	0.56	1.77	1	2
1:K:161:PHE:CZ	1:K:202:LEU:HD11	0.56	2.36	10	1
1:L:153:ILE:HG21	1:L:168:PHE:CB	0.56	2.31	10	1
1:L:165:VAL:HG13	1:L:168:PHE:CD2	0.55	2.36	9	1
1:H:209:ALA:N	1:H:214:MET:HE3	0.55	2.16	7	3
1:G:211:LEU:HD22	1:G:214:MET:HE3	0.55	1.78	6	2
1:H:209:ALA:HB3	1:H:214:MET:HG3	0.55	1.79	4	10
3:H:302:A1CCZ:C14	1:I:231:LEU:HD22	0.55	2.31	9	2
1:I:189:LEU:HD11	1:I:193:ASN:CG	0.55	2.26	10	2
1:K:171:THR:O	1:K:174:ALA:HB3	0.55	2.02	10	7
1:H:150:ILE:HG21	1:H:185:MET:CG	0.55	2.32	9	1
1:I:226:HIS:CE1	1:I:230:VAL:HG21	0.55	2.35	7	2
1:K:177:ALA:HB3	1:K:182:LYS:CG	0.55	2.32	1	3
1:H:168:PHE:CZ	1:H:186:THR:HG22	0.55	2.36	2	7

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:J:161:PHE:CZ	1:J:165:VAL:HG21	0.55	2.36	5	1
1:I:191:VAL:CG2	1:I:202:LEU:HD22	0.55	2.31	8	1
1:J:155:GLN:NE2	1:J:221:VAL:HG11	0.54	2.17	4	3
1:H:164:TYR:HE2	1:H:190:LEU:HD12	0.54	1.59	9	4
1:H:189:LEU:HD21	1:H:193:ASN:OD1	0.54	2.02	6	6
1:G:161:PHE:O	1:G:165:VAL:HG23	0.54	2.03	5	10
1:I:155:GLN:NE2	1:I:221:VAL:HG11	0.54	2.18	4	3
1:H:177:ALA:HB3	1:H:182:LYS:CE	0.54	2.33	5	2
1:K:187:GLU:O	1:K:191:VAL:HG23	0.54	2.03	3	1
1:J:153:ILE:HG23	1:J:164:TYR:HE1	0.54	1.62	7	2
1:H:187:GLU:O	1:H:191:VAL:HG23	0.53	2.02	2	3
1:K:198:CYS:HB2	1:K:202:LEU:HD13	0.53	1.80	2	1
1:I:229:ARG:O	1:I:232:ALA:HB3	0.53	2.03	5	1
1:L:150:ILE:CD1	1:L:171:THR:HG23	0.53	2.27	6	2
1:I:164:TYR:CE2	1:I:190:LEU:HD12	0.53	2.39	6	2
1:H:234:ALA:CB	1:I:231:LEU:HD23	0.53	2.33	8	1
1:I:168:PHE:CE1	1:I:186:THR:HG22	0.53	2.39	8	4
1:H:237:GLN:O	1:H:242:ALA:HB3	0.53	2.04	4	8
1:G:165:VAL:HG22	1:G:190:LEU:HD11	0.53	1.80	9	5
1:G:172:LEU:HD21	1:G:185:MET:SD	0.52	2.44	7	3
1:I:153:ILE:HG21	1:I:168:PHE:HB2	0.52	1.81	10	3
1:I:196:PRO:O	1:I:200:THR:HG22	0.52	2.04	3	3
1:I:168:PHE:CD1	1:I:172:LEU:HD11	0.52	2.40	6	1
1:H:168:PHE:O	1:H:172:LEU:HD12	0.52	2.05	10	7
1:H:202:LEU:HD21	1:H:214:MET:SD	0.52	2.45	2	1
1:I:227:LYS:NZ	1:J:228:ALA:HB2	0.52	2.20	5	1
1:G:231:LEU:HD12	1:H:231:LEU:HD22	0.52	1.81	7	1
1:G:168:PHE:CZ	1:G:186:THR:HG22	0.52	2.40	2	10
1:J:168:PHE:CZ	1:J:186:THR:HG22	0.52	2.40	4	7
1:J:171:THR:O	1:J:174:ALA:HB3	0.51	2.06	5	2
1:I:198:CYS:SG	1:I:202:LEU:HD22	0.51	2.45	3	1
1:J:205:LEU:HD11	1:J:217:ALA:CB	0.51	2.35	7	2
1:J:202:LEU:HG	1:J:214:MET:HE3	0.51	1.81	5	2
1:I:202:LEU:HD21	1:I:214:MET:HB3	0.51	1.81	6	1
1:I:182:LYS:O	1:I:186:THR:HG23	0.51	2.05	5	5
1:K:177:ALA:HB1	1:K:181:VAL:CG1	0.51	2.36	6	5
1:I:164:TYR:OH	1:I:189:LEU:HD23	0.51	2.05	2	1
1:H:226:HIS:O	1:H:230:VAL:HG22	0.51	2.06	7	1
1:I:155:GLN:OE1	1:I:221:VAL:HG11	0.51	2.05	8	3
1:K:218:CYS:O	1:K:221:VAL:HG23	0.51	2.06	8	3
1:K:197:ASP:HB2	1:K:221:VAL:HG13	0.51	1.83	3	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:H:191:VAL:CG2	1:H:202:LEU:HD23	0.51	2.36	2	1
1:L:184:TRP:CZ3	1:L:188:THR:HG22	0.51	2.41	5	1
1:J:153:ILE:HG22	1:J:189:LEU:CD2	0.50	2.36	6	3
1:I:202:LEU:HG	1:I:214:MET:HE2	0.50	1.82	10	2
1:K:155:GLN:CB	1:K:194:ALA:HB1	0.50	2.36	10	1
1:H:184:TRP:CZ2	1:H:189:LEU:HD22	0.50	2.41	8	2
1:L:153:ILE:HG23	1:L:164:TYR:OH	0.50	2.05	10	1
1:I:165:VAL:HG13	1:I:168:PHE:CE2	0.50	2.41	2	3
1:K:235:MET:SD	1:L:235:MET:HE3	0.50	2.46	6	1
1:I:237:GLN:O	1:I:242:ALA:HB3	0.50	2.07	2	5
1:H:189:LEU:HD11	1:H:193:ASN:OD1	0.50	2.07	1	4
1:H:198:CYS:O	1:H:202:LEU:HD13	0.50	2.06	2	1
1:K:168:PHE:HE1	1:K:186:THR:HG22	0.50	1.67	7	9
1:K:191:VAL:HG22	1:K:202:LEU:HD13	0.50	1.84	4	2
1:G:198:CYS:SG	1:G:202:LEU:HD12	0.50	2.47	6	1
1:J:161:PHE:O	1:J:165:VAL:HG23	0.50	2.06	7	3
1:H:153:ILE:HG22	1:H:189:LEU:HD23	0.50	1.84	2	2
1:G:232:ALA:HB2	1:L:237:GLN:OE1	0.49	2.07	2	1
1:L:150:ILE:HG21	1:L:185:MET:CG	0.49	2.37	4	1
1:H:191:VAL:HG22	1:H:202:LEU:HD22	0.49	1.83	1	1
1:I:177:ALA:HB3	1:I:182:LYS:CE	0.49	2.37	2	2
1:J:177:ALA:HB3	1:J:182:LYS:CG	0.49	2.37	5	2
1:J:168:PHE:HE1	1:J:186:THR:HG22	0.49	1.63	5	1
1:L:202:LEU:HD23	1:L:214:MET:SD	0.49	2.47	9	8
1:L:237:GLN:HA	1:L:242:ALA:HB3	0.49	1.83	9	8
1:L:164:TYR:CE2	1:L:194:ALA:HB2	0.49	2.42	8	2
1:G:191:VAL:HG22	1:G:202:LEU:CD2	0.49	2.38	9	8
1:J:184:TRP:CZ3	1:J:188:THR:HG22	0.49	2.42	6	3
1:I:231:LEU:HD11	1:I:235:MET:HE2	0.49	1.83	5	1
1:I:184:TRP:HZ2	1:I:189:LEU:HD12	0.49	1.66	4	3
1:L:168:PHE:O	1:L:172:LEU:HD12	0.49	2.08	7	1
1:I:148:THR:HB	1:I:153:ILE:HD13	0.49	1.85	2	1
1:K:237:GLN:O	1:K:242:ALA:HB3	0.49	2.08	9	4
1:I:153:ILE:HD13	1:I:171:THR:HG21	0.49	1.85	1	1
1:I:194:ALA:HB3	1:I:198:CYS:SG	0.49	2.47	1	1
1:J:164:TYR:CE2	1:J:194:ALA:HB2	0.49	2.42	3	2
1:L:150:ILE:HG21	1:L:185:MET:HG2	0.49	1.84	4	1
1:J:165:VAL:HG13	1:J:168:PHE:CE2	0.49	2.42	7	2
1:J:237:GLN:O	1:J:242:ALA:HB3	0.48	2.08	5	1
1:H:164:TYR:CE2	1:H:194:ALA:HB2	0.48	2.41	3	5
1:H:177:ALA:HB1	1:H:181:VAL:CG1	0.48	2.37	2	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:L:237:GLN:CA	1:L:242:ALA:HB3	0.48	2.38	5	9
1:G:205:LEU:HD11	1:G:217:ALA:HB3	0.48	1.85	6	2
1:G:150:ILE:HG21	1:G:185:MET:HB3	0.48	1.83	5	1
1:J:165:VAL:HG13	1:J:168:PHE:CD2	0.48	2.44	7	1
1:G:151:LEU:H	1:G:151:LEU:HD12	0.48	1.69	3	7
1:L:205:LEU:HD11	1:L:217:ALA:HB2	0.48	1.84	9	1
1:G:153:ILE:HD13	1:G:171:THR:HG21	0.48	1.85	9	5
1:I:227:LYS:HZ1	1:J:228:ALA:HB2	0.48	1.69	5	1
1:K:198:CYS:O	1:K:202:LEU:HD13	0.48	2.08	7	2
1:G:226:HIS:CE1	1:G:230:VAL:HG11	0.48	2.42	7	3
1:J:153:ILE:HD13	1:J:171:THR:CG2	0.48	2.37	6	1
1:I:197:ASP:O	1:I:200:THR:HG22	0.48	2.09	8	3
1:L:205:LEU:HD11	1:L:217:ALA:CB	0.48	2.39	3	1
1:I:198:CYS:SG	1:I:202:LEU:HD12	0.48	2.49	6	2
1:H:150:ILE:HG22	1:H:150:ILE:O	0.47	2.09	2	1
1:I:184:TRP:HZ3	1:I:188:THR:HG22	0.47	1.68	3	3
1:J:153:ILE:HG23	1:J:164:TYR:OH	0.47	2.09	6	1
1:L:172:LEU:HD21	1:L:185:MET:SD	0.47	2.50	3	2
1:I:237:GLN:OE1	1:J:232:ALA:HB1	0.47	2.09	5	1
1:H:209:ALA:HB1	1:H:213:GLU:CG	0.47	2.39	3	4
1:I:211:LEU:O	1:I:211:LEU:HD13	0.47	2.10	8	2
1:L:189:LEU:HD21	1:L:193:ASN:ND2	0.47	2.25	3	1
1:K:177:ALA:HB1	1:K:181:VAL:HG11	0.47	1.86	5	4
1:G:205:LEU:HD13	1:G:213:GLU:HG3	0.47	1.85	6	1
1:J:150:ILE:HG21	1:J:185:MET:HB3	0.47	1.86	7	1
1:J:150:ILE:HG21	1:J:185:MET:CB	0.47	2.40	7	1
1:J:189:LEU:HD13	1:J:190:LEU:N	0.47	2.25	4	2
1:H:168:PHE:HZ	1:H:186:THR:HG22	0.47	1.67	9	7
1:I:168:PHE:O	1:I:172:LEU:HD12	0.47	2.10	4	3
1:H:168:PHE:CD1	1:H:172:LEU:HD12	0.47	2.44	9	1
1:H:153:ILE:HD11	1:H:167:ARG:HB3	0.46	1.86	6	1
1:I:197:ASP:HB2	1:I:221:VAL:HG13	0.46	1.87	2	2
1:I:198:CYS:HB3	1:I:221:VAL:HG21	0.46	1.87	9	2
1:K:190:LEU:O	1:K:194:ALA:HB3	0.46	2.10	1	1
1:H:191:VAL:HG22	1:H:202:LEU:CD2	0.46	2.37	2	2
1:K:191:VAL:HG22	1:K:202:LEU:HD22	0.46	1.87	9	1
1:L:150:ILE:N	1:L:150:ILE:HD12	0.46	2.25	6	3
1:G:226:HIS:O	1:G:230:VAL:HG22	0.46	2.11	9	1
1:H:197:ASP:CB	1:H:221:VAL:HG13	0.46	2.39	8	2
1:G:226:HIS:CE1	1:G:230:VAL:HG21	0.46	2.46	1	2
1:J:161:PHE:CZ	1:J:190:LEU:HD21	0.46	2.44	2	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:L:201:ILE:HG21	1:L:218:CYS:SG	0.46	2.50	5	1
1:I:198:CYS:O	1:I:202:LEU:HD12	0.46	2.11	9	2
1:L:184:TRP:CZ2	1:L:189:LEU:HD13	0.46	2.46	10	1
1:I:161:PHE:CZ	1:I:190:LEU:HD21	0.46	2.46	4	7
1:K:218:CYS:SG	1:K:221:VAL:HG21	0.46	2.50	2	1
1:H:190:LEU:CD2	1:H:214:MET:HE1	0.46	2.41	6	1
1:H:237:GLN:HA	1:H:242:ALA:HB3	0.46	1.88	1	1
1:I:172:LEU:HD21	1:I:185:MET:SD	0.46	2.51	1	5
1:K:164:TYR:CE2	1:K:194:ALA:HB2	0.46	2.46	3	1
1:H:198:CYS:O	1:H:202:LEU:HD22	0.46	2.11	10	1
1:K:205:LEU:HD21	1:K:217:ALA:HB2	0.45	1.87	2	1
1:I:237:GLN:C	1:I:242:ALA:HB3	0.45	2.36	8	1
1:H:205:LEU:HD11	1:H:217:ALA:HB3	0.45	1.88	3	1
1:J:201:ILE:HD13	1:J:217:ALA:O	0.45	2.11	4	1
1:K:209:ALA:HB1	1:K:213:GLU:HB3	0.45	1.88	8	1
1:I:164:TYR:CE2	1:I:194:ALA:HB2	0.45	2.47	7	1
1:H:150:ILE:HG21	1:H:185:MET:HG2	0.45	1.89	9	1
1:J:198:CYS:HB2	1:J:202:LEU:HD13	0.45	1.88	9	1
1:L:148:THR:HB	1:L:171:THR:HG21	0.45	1.87	10	1
1:K:191:VAL:HA	1:K:202:LEU:HD23	0.45	1.88	5	1
1:H:198:CYS:HB3	1:H:221:VAL:HG21	0.45	1.87	7	1
1:L:189:LEU:HD22	1:L:192:GLN:HB2	0.45	1.87	7	1
1:I:168:PHE:HE1	1:I:186:THR:HG22	0.45	1.71	3	3
1:J:150:ILE:CD1	1:J:171:THR:HG23	0.45	2.42	4	1
1:L:190:LEU:O	1:L:194:ALA:HB3	0.45	2.12	8	1
1:J:202:LEU:HD23	1:J:214:MET:SD	0.45	2.52	1	1
1:J:189:LEU:HD22	1:J:189:LEU:O	0.44	2.12	7	1
1:K:201:ILE:HG22	1:K:217:ALA:HB1	0.44	1.89	8	1
1:G:153:ILE:HG21	1:G:168:PHE:HB2	0.44	1.88	6	4
1:I:211:LEU:HD22	1:I:214:MET:HE3	0.44	1.89	8	2
1:I:168:PHE:CZ	1:I:186:THR:HG22	0.44	2.47	6	3
1:I:177:ALA:HB3	1:I:182:LYS:HE3	0.44	1.89	9	3
1:H:177:ALA:HB1	1:H:181:VAL:HG11	0.44	1.89	5	2
1:J:226:HIS:CE1	1:J:230:VAL:HG23	0.44	2.47	8	1
1:K:177:ALA:HB1	1:K:181:VAL:HG12	0.44	1.89	3	1
1:J:150:ILE:HD11	1:J:171:THR:HG23	0.44	1.88	4	1
1:H:209:ALA:HB3	1:H:214:MET:CG	0.44	2.42	6	2
1:J:189:LEU:HD11	1:J:193:ASN:HD21	0.44	1.73	7	1
1:L:150:ILE:HD11	1:L:171:THR:CG2	0.44	2.43	7	1
1:G:237:GLN:O	1:G:242:ALA:HB3	0.44	2.13	4	2
1:J:177:ALA:HB3	1:J:182:LYS:HG2	0.44	1.89	5	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:I:191:VAL:HG22	1:I:202:LEU:HD22	0.44	1.89	8	1
1:K:197:ASP:CB	1:K:221:VAL:HG13	0.44	2.43	3	2
1:L:177:ALA:HB1	1:L:181:VAL:CG1	0.44	2.42	9	3
1:J:190:LEU:O	1:J:194:ALA:HB3	0.43	2.13	3	1
1:H:235:MET:SD	1:I:235:MET:HE2	0.43	2.54	3	1
1:K:191:VAL:CG2	1:K:202:LEU:HD23	0.43	2.40	3	1
1:G:150:ILE:HG23	1:G:189:LEU:HD13	0.43	1.89	5	1
1:J:191:VAL:HG22	1:J:202:LEU:HD13	0.43	1.90	6	1
1:K:161:PHE:CZ	1:K:165:VAL:HG21	0.43	2.48	7	2
1:K:198:CYS:O	1:K:202:LEU:HD12	0.43	2.13	9	2
1:H:186:THR:O	1:H:190:LEU:HD23	0.43	2.13	9	1
1:L:187:GLU:O	1:L:191:VAL:HG23	0.43	2.13	4	4
1:I:226:HIS:C	1:I:230:VAL:HG12	0.43	2.39	3	1
1:J:189:LEU:HD13	1:J:189:LEU:C	0.43	2.38	4	1
1:K:177:ALA:HB3	1:K:182:LYS:HG3	0.43	1.89	3	1
1:G:238:VAL:HG21	1:H:235:MET:HB3	0.43	1.86	2	1
1:L:151:LEU:C	1:L:189:LEU:HD21	0.43	2.38	2	1
1:K:155:GLN:HB2	1:K:194:ALA:HB1	0.43	1.89	10	1
1:J:227:LYS:HA	1:J:230:VAL:HG22	0.43	1.91	2	1
1:J:237:GLN:HA	1:J:242:ALA:HB3	0.43	1.90	9	1
1:J:218:CYS:SG	1:J:221:VAL:HG21	0.43	2.54	4	2
1:L:231:LEU:C	1:L:231:LEU:HD13	0.43	2.38	6	1
1:K:202:LEU:HD13	1:K:218:CYS:SG	0.43	2.54	5	1
1:J:165:VAL:HG13	1:J:168:PHE:HE2	0.42	1.74	5	1
1:I:161:PHE:CE2	1:I:165:VAL:HG21	0.42	2.49	6	1
1:H:147:PRO:C	1:H:148:THR:HG23	0.42	2.39	1	1
1:L:150:ILE:O	1:L:189:LEU:HD13	0.42	2.14	5	1
1:H:189:LEU:HD11	1:H:193:ASN:ND2	0.42	2.29	6	1
1:H:155:GLN:OE1	1:H:221:VAL:HG11	0.42	2.13	4	2
1:I:153:ILE:HG22	1:I:189:LEU:HD22	0.42	1.91	4	1
1:I:189:LEU:CD2	1:I:193:ASN:HD21	0.42	2.28	4	1
3:H:302:A1CCZ:C15	1:I:231:LEU:HD13	0.42	2.43	9	1
1:J:202:LEU:HD22	1:J:214:MET:SD	0.42	2.54	6	1
1:I:198:CYS:CB	1:I:221:VAL:HG21	0.42	2.43	7	3
1:J:161:PHE:CE1	1:J:190:LEU:HD21	0.42	2.49	5	1
1:K:177:ALA:HB3	1:K:182:LYS:HG2	0.42	1.92	1	1
1:G:197:ASP:O	1:G:200:THR:HG22	0.42	2.14	5	3
1:L:149:SER:O	1:L:151:LEU:HD12	0.42	2.15	4	1
1:G:231:LEU:HD12	1:H:231:LEU:CD2	0.42	2.44	7	1
1:I:189:LEU:C	1:I:189:LEU:HD13	0.42	2.40	8	1
1:J:164:TYR:CZ	1:J:194:ALA:HB2	0.42	2.49	2	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:J:168:PHE:HZ	1:J:186:THR:HG22	0.42	1.75	3	1
1:J:191:VAL:HG13	1:J:202:LEU:HB2	0.42	1.91	6	1
1:J:211:LEU:HD22	1:J:214:MET:HE3	0.42	1.90	9	1
1:H:151:LEU:HD12	1:H:151:LEU:N	0.41	2.30	4	1
1:L:198:CYS:O	1:L:202:LEU:HD12	0.41	2.15	5	1
1:I:243:THR:O	1:I:243:THR:HG23	0.41	2.16	3	6
1:H:202:LEU:HD21	1:H:218:CYS:SG	0.41	2.55	6	1
1:I:162:ARG:NH2	1:I:165:VAL:HG12	0.41	2.30	9	1
1:J:150:ILE:HG23	1:J:189:LEU:HD13	0.41	1.93	1	2
1:L:168:PHE:HZ	1:L:186:THR:HG22	0.41	1.75	1	2
1:L:150:ILE:HG23	1:L:153:ILE:HG22	0.41	1.93	2	1
1:G:187:GLU:O	1:G:191:VAL:HG23	0.41	2.15	2	2
1:J:243:THR:O	1:J:243:THR:HG23	0.41	2.16	9	7
1:L:168:PHE:CZ	1:L:172:LEU:HD11	0.41	2.51	2	1
1:J:197:ASP:HB2	1:J:221:VAL:HG13	0.41	1.92	4	1
1:G:201:ILE:HG21	1:G:218:CYS:SG	0.41	2.56	5	1
1:L:243:THR:HG23	1:L:243:THR:O	0.41	2.16	1	2
1:K:191:VAL:HG22	1:K:202:LEU:CD2	0.41	2.41	3	1
1:H:189:LEU:HD21	1:H:193:ASN:CG	0.41	2.41	6	1
1:H:202:LEU:CD2	1:H:214:MET:HE2	0.41	2.46	1	1
1:L:198:CYS:HA	1:L:201:ILE:HD12	0.41	1.92	3	1
1:K:243:THR:HG23	1:K:243:THR:O	0.41	2.16	10	4
1:L:151:LEU:HD12	1:L:151:LEU:N	0.41	2.31	5	1
1:H:237:GLN:OE1	1:I:232:ALA:HB2	0.41	2.15	6	1
1:H:198:CYS:CB	1:H:221:VAL:HG21	0.41	2.46	7	1
1:H:243:THR:HG23	1:H:243:THR:O	0.41	2.16	9	2
1:H:151:LEU:N	1:H:151:LEU:HD12	0.41	2.30	10	1
1:I:153:ILE:HG21	1:I:168:PHE:HA	0.41	1.93	2	2
1:K:165:VAL:HG12	1:K:169:TYR:CD1	0.41	2.51	1	1
1:J:151:LEU:HD12	1:J:151:LEU:N	0.41	2.31	3	1
1:I:205:LEU:HD11	1:I:217:ALA:HB3	0.41	1.92	10	1
1:I:201:ILE:HG21	1:I:218:CYS:SG	0.41	2.55	3	1
1:J:168:PHE:CD2	1:J:190:LEU:HD13	0.41	2.50	4	1
1:L:175:GLU:HG2	1:L:185:MET:HE1	0.41	1.92	7	1
1:H:181:VAL:HG12	1:H:182:LYS:N	0.41	2.31	5	1
1:H:198:CYS:O	1:H:202:LEU:HD12	0.41	2.16	7	1
1:I:237:GLN:CA	1:I:242:ALA:HB3	0.41	2.46	8	1
1:K:201:ILE:HG21	1:K:217:ALA:HB1	0.41	1.92	5	1
1:I:212:GLU:OE1	1:I:215:MET:HE1	0.41	2.15	8	1
1:I:237:GLN:CG	1:I:242:ALA:HB3	0.40	2.46	4	1
1:G:243:THR:O	1:G:243:THR:HG23	0.40	2.16	5	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:I:243:THR:HG23	1:I:243:THR:O	0.40	2.16	7	1
1:K:172:LEU:HD22	1:K:185:MET:SD	0.40	2.57	9	1
1:H:202:LEU:CD1	1:H:214:MET:HE2	0.40	2.46	5	1
1:H:171:THR:O	1:H:174:ALA:HB3	0.40	2.16	7	1
1:J:189:LEU:HD11	1:J:193:ASN:ND2	0.40	2.31	7	1
1:H:151:LEU:HD12	1:H:151:LEU:H	0.40	1.76	6	1
1:I:191:VAL:HG22	1:I:202:LEU:HD13	0.40	1.93	6	1
1:I:155:GLN:NE2	1:I:194:ALA:HB1	0.40	2.28	8	1
1:I:172:LEU:HD22	1:I:182:LYS:CD	0.40	2.46	4	1
1:K:243:THR:O	1:K:243:THR:HG23	0.40	2.16	6	1

6.3 Torsion angles [i](#)

6.3.1 Protein backbone [i](#)

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

Mol	Chain	Analysed	Favoured	Allowed	Outliers	Percentiles	
1	G	99/102 (97%)	91±1 (92±1%)	6±1 (6±1%)	2±0 (2±0%)	8	49
1	H	98/102 (96%)	87±1 (89±1%)	8±1 (8±1%)	3±1 (3±1%)	4	34
1	I	90/102 (88%)	80±2 (89±2%)	8±2 (9±3%)	2±0 (2±1%)	9	52
1	J	94/102 (92%)	82±2 (88±2%)	9±2 (9±3%)	3±1 (3±1%)	5	39
1	K	94/102 (92%)	85±2 (90±2%)	8±2 (8±2%)	2±0 (2±1%)	10	55
1	L	98/102 (96%)	86±1 (88±1%)	9±1 (9±1%)	2±1 (3±1%)	6	42
All	All	5730/6120 (94%)	5117 (89%)	477 (8%)	136 (2%)	7	44

All 24 unique Ramachandran outliers are listed below. They are sorted by the frequency of occurrence in the ensemble.

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	G	150	ILE	10
1	G	195	ASN	10
1	H	150	ILE	10
1	H	195	ASN	10
1	I	195	ASN	10

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	J	150	ILE	10
1	J	195	ASN	10
1	K	195	ASN	10
1	L	195	ASN	10
1	L	150	ILE	8
1	H	196	PRO	5
1	H	223	GLY	5
1	I	148	THR	5
1	K	207	PRO	4
1	J	148	THR	4
1	L	176	GLN	3
1	H	148	THR	3
1	L	148	THR	3
1	J	223	GLY	1
1	L	196	PRO	1
1	J	176	GLN	1
1	J	196	PRO	1
1	I	224	PRO	1
1	K	157	PRO	1

6.3.2 Protein sidechains [i](#)

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	G	82/83 (99%)	74±1 (91±1%)	8±1 (9±1%)	11	56
1	H	82/83 (99%)	72±2 (88±2%)	10±2 (12±2%)	7	50
1	I	76/83 (92%)	68±1 (90±2%)	8±1 (10±2%)	9	54
1	J	81/83 (98%)	72±2 (89±2%)	9±2 (11±2%)	8	50
1	K	77/83 (93%)	68±2 (89±3%)	8±2 (11±3%)	8	51
1	L	82/83 (99%)	74±2 (91±2%)	8±2 (9±2%)	11	56
All	All	4800/4980 (96%)	4299 (90%)	501 (10%)	9	53

All 129 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	G	150	ILE	10
1	G	168	PHE	10
1	G	184	TRP	10
1	G	193	ASN	10
1	G	211	LEU	10
1	H	168	PHE	10
1	H	184	TRP	10
1	I	184	TRP	10
1	I	211	LEU	10
1	J	168	PHE	10
1	J	184	TRP	10
1	J	193	ASN	10
1	J	211	LEU	10
1	L	184	TRP	10
1	L	211	LEU	10
1	H	150	ILE	9
1	I	168	PHE	9
1	J	150	ILE	9
1	L	168	PHE	9
1	J	189	LEU	9
1	H	162	ARG	8
1	H	193	ASN	8
1	H	205	LEU	8
1	L	162	ARG	8
1	K	189	LEU	8
1	K	211	LEU	8
1	G	162	ARG	7
1	K	168	PHE	7
1	K	171	THR	7
1	I	162	ARG	6
1	K	158	LYS	6
1	K	162	ARG	6
1	L	230	VAL	6
1	J	205	LEU	6
1	K	193	ASN	6
1	L	151	LEU	6
1	H	202	LEU	5
1	L	172	LEU	5
1	G	227	LYS	5
1	H	181	VAL	5
1	H	227	LYS	5
1	J	227	LYS	5
1	K	195	ASN	5

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	L	189	LEU	5
1	I	193	ASN	5
1	K	188	THR	5
1	J	171	THR	4
1	L	150	ILE	4
1	K	205	LEU	4
1	G	148	THR	3
1	H	178	SER	3
1	H	226	HIS	3
1	I	189	LEU	3
1	I	230	VAL	3
1	H	189	LEU	3
1	I	199	LYS	3
1	K	198	CYS	3
1	K	227	LYS	3
1	G	230	VAL	3
1	H	148	THR	3
1	I	205	LEU	3
1	I	227	LYS	3
1	J	199	LYS	3
1	K	231	LEU	3
1	H	211	LEU	3
1	I	172	LEU	3
1	G	159	GLU	2
1	G	178	SER	2
1	I	224	PRO	2
1	I	226	HIS	2
1	L	227	LYS	2
1	L	231	LEU	2
1	J	218	CYS	2
1	J	229	ARG	2
1	J	230	VAL	2
1	K	199	LYS	2
1	L	229	ARG	2
1	J	148	THR	2
1	K	178	SER	2
1	L	193	ASN	2
1	L	205	LEU	2
1	H	230	VAL	2
1	I	155	GLN	2
1	I	216	THR	2
1	I	219	GLN	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	G	240	ASN	1
1	I	195	ASN	1
1	I	202	LEU	1
1	J	198	CYS	1
1	J	240	ASN	1
1	K	240	ASN	1
1	L	240	ASN	1
1	H	219	GLN	1
1	J	176	GLN	1
1	J	231	LEU	1
1	K	155	GLN	1
1	K	190	LEU	1
1	H	229	ARG	1
1	I	203	LYS	1
1	G	229	ARG	1
1	H	214	MET	1
1	I	159	GLU	1
1	K	236	SER	1
1	G	231	LEU	1
1	H	151	LEU	1
1	J	203	LYS	1
1	K	202	LEU	1
1	L	164	TYR	1
1	G	199	LYS	1
1	I	231	LEU	1
1	K	181	VAL	1
1	K	229	ARG	1
1	H	198	CYS	1
1	I	198	CYS	1
1	I	212	GLU	1
1	I	229	ARG	1
1	J	178	SER	1
1	K	230	VAL	1
1	H	152	ASP	1
1	H	192	GLN	1
1	I	148	THR	1
1	H	171	THR	1
1	J	226	HIS	1
1	K	215	MET	1
1	H	159	GLU	1
1	H	201	ILE	1
1	J	212	GLU	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	K	163	ASP	1
1	L	178	SER	1

6.3.3 RNA ⓘ

There are no RNA molecules in this entry.

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

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

6.5 Carbohydrates ⓘ

There are no oligosaccharides in this entry.

6.6 Ligand geometry ⓘ

2 ligands are modelled in this entry.

In the following table, the Counts columns list the number of bonds for which Mogul statistics could be retrieved, the number of bonds that are observed in the model and the number of bonds that are defined in the chemical component dictionary. The Link column lists molecule types, if any, to which the group is linked. The Z score for a bond length is the number of standard deviations the observed value is removed from the expected value. A bond length with $|Z| > 2$ is considered an outlier worth inspection. RMSZ is the average root-mean-square of all Z scores of the bond lengths.

Mol	Type	Chain	Res	Link	Bond lengths		
					Counts	RMSZ	#Z>2
3	A1CCZ	H	302	-	36,36,36	2.03±0.00	13±0 (36±0%)
2	IHP	H	301	-	36,36,36	1.67±0.00	6±1 (15±1%)

In the following table, the Counts columns list the number of angles for which Mogul statistics could be retrieved, the number of angles that are observed in the model and the number of angles that are defined in the chemical component dictionary. The Link column lists molecule types, if any, to which the group is linked. The Z score for a bond angle is the number of standard deviations the observed value is removed from the expected value. A bond angle with $|Z| > 2$ is considered an outlier worth inspection. RMSZ is the average root-mean-square of all Z scores of the bond angles.

Mol	Type	Chain	Res	Link	Bond angles		
					Counts	RMSZ	#Z>2
3	A1CCZ	H	302	-	44,54,54	2.20±0.00	12±0 (27±0%)
2	IHP	H	301	-	60,60,60	1.30±0.00	7±0 (11±0%)

In the following table, the Chirals column lists the number of chiral outliers, the number of chiral centers analysed, the number of these observed in the model and the number defined in the chemical component dictionary. Similar counts are reported in the Torsion and Rings columns. '-' means no outliers of that kind were identified.

Mol	Type	Chain	Res	Link	Chirals	Torsions	Rings
2	IHP	H	301	-	-	0±0,30,54,54	0±0,1,1,1
3	A1CCZ	H	302	-	-	0±0,24,32,32	0±0,4,4,4

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
2	H	301	IHP	C6-C5	5.43	1.63	1.52	3	10
3	H	302	A1CCZ	C12-N23	5.05	1.53	1.47	9	10
3	H	302	A1CCZ	C8-N10	3.82	1.54	1.48	3	10
3	H	302	A1CCZ	C7-C8	3.73	1.47	1.53	1	10
3	H	302	A1CCZ	C18-C17	3.53	1.33	1.38	9	10
3	H	302	A1CCZ	O29-C24	3.52	1.30	1.23	4	10
2	H	301	IHP	P6-O16	3.38	1.53	1.59	5	10
2	H	301	IHP	C5-C4	2.99	1.58	1.52	1	10
3	H	302	A1CCZ	C4-C5	2.96	1.44	1.38	1	10
3	H	302	A1CCZ	C18-C13	2.95	1.43	1.39	7	10
2	H	301	IHP	C2-C1	2.88	1.58	1.52	1	10
3	H	302	A1CCZ	C7-C6	2.79	1.55	1.50	6	10
3	H	302	A1CCZ	C15-C16	2.55	1.43	1.39	4	10
3	H	302	A1CCZ	C19-C16	2.47	1.48	1.53	2	10
3	H	302	A1CCZ	C11-N10	2.45	1.50	1.47	1	10
3	H	302	A1CCZ	C9-C8	2.45	1.49	1.53	8	10
3	H	302	A1CCZ	C12-C11	2.32	1.56	1.53	6	10
2	H	301	IHP	P2-O42	2.24	1.46	1.54	7	10
2	H	301	IHP	P1-O11	2.02	1.63	1.59	8	1
2	H	301	IHP	O13-C3	2.01	1.37	1.44	1	4

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
3	H	302	A1CCZ	C11-C12-N23	6.40	121.30	111.78	3	10
3	H	302	A1CCZ	C7-C6-C1	6.16	106.36	110.50	10	10
3	H	302	A1CCZ	C1-C9-C8	4.94	98.02	102.89	2	10
3	H	302	A1CCZ	C7-C6-C5	4.06	136.77	129.17	4	10
2	H	301	IHP	C5-C4-C3	3.82	102.05	110.43	9	10
3	H	302	A1CCZ	C5-C6-C1	3.35	116.32	120.12	4	10
2	H	301	IHP	O15-C5-C6	3.25	115.68	108.76	3	10
2	H	301	IHP	C5-C6-C1	3.08	103.67	110.43	7	10
3	H	302	A1CCZ	C2-C1-C6	2.80	123.31	120.12	3	10
3	H	302	A1CCZ	C6-C7-C8	2.77	100.16	102.89	6	10
3	H	302	A1CCZ	C15-C14-C13	2.74	118.45	121.18	6	10
2	H	301	IHP	O34-P4-O14	2.69	116.32	105.85	1	10
3	H	302	A1CCZ	C22-C19-C20	2.64	116.19	108.36	2	10
2	H	301	IHP	C6-C5-C4	2.52	104.90	110.43	3	10
3	H	302	A1CCZ	O29-C24-N23	2.44	117.28	120.53	1	10
2	H	301	IHP	O15-P5-O25	2.44	100.64	109.33	4	10
3	H	302	A1CCZ	C21-C19-C20	2.43	101.13	108.36	10	10
3	H	302	A1CCZ	C17-C16-C15	2.07	114.94	118.03	9	10
2	H	301	IHP	O46-P6-O36	2.05	115.50	107.80	8	10

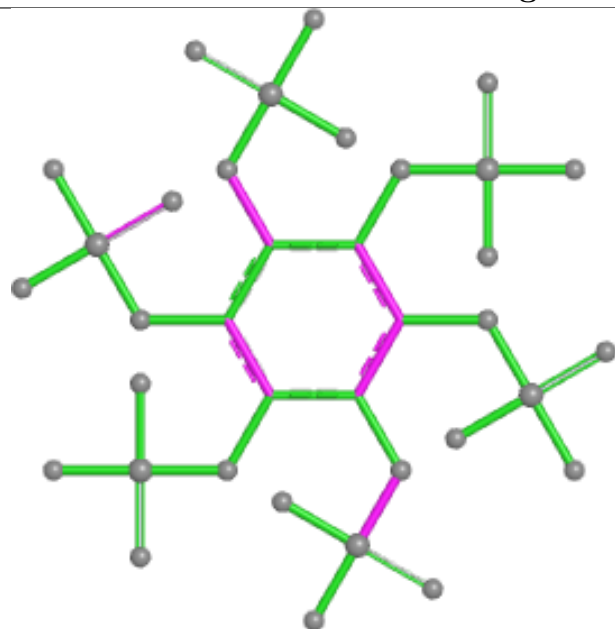
There are no chirality outliers.

There are no torsion outliers.

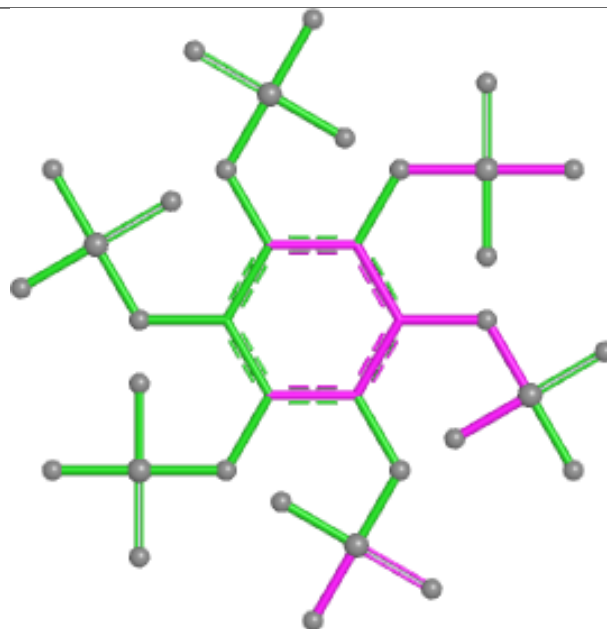
There are no ring outliers.

The following is a two-dimensional graphical depiction of Mogul quality analysis of bond lengths, bond angles, torsion angles, and ring geometry for all instances of the Ligand of Interest. In addition, ligands with molecular weight > 250 and outliers as shown on the validation Tables will also be included. For torsion angles, if less than 5% of the Mogul distribution of torsion angles is within 10 degrees of the torsion angle in question, then that torsion angle is considered an outlier. Any bond that is central to one or more torsion angles identified as an outlier by Mogul will be highlighted in the graph. For rings, the root-mean-square deviation (RMSD) between the ring in question and similar rings identified by Mogul is calculated over all ring torsion angles. If the average RMSD is greater than 60 degrees and the minimal RMSD between the ring in question and any Mogul-identified rings is also greater than 60 degrees, then that ring is considered an outlier. The outliers are highlighted in purple. The color gray indicates Mogul did not find sufficient equivalents in the CSD to analyse the geometry.

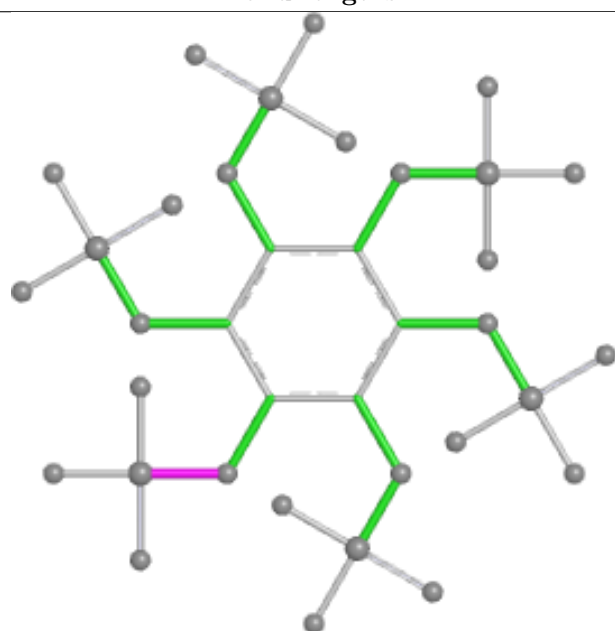
Ligand IHP H 301



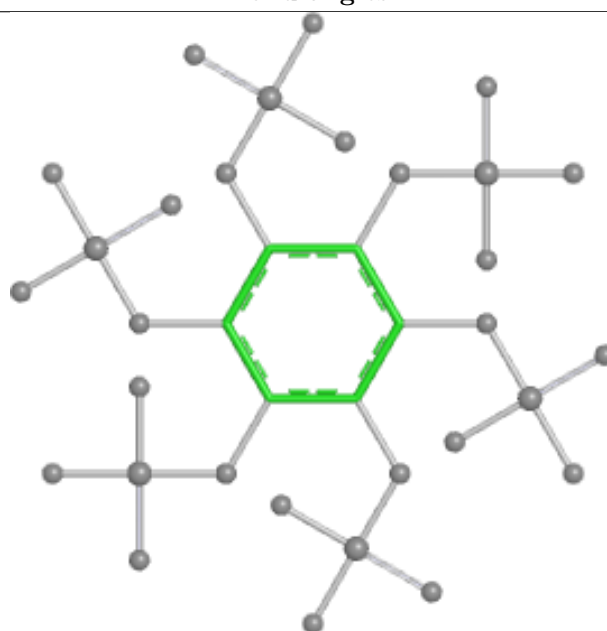
Bond lengths



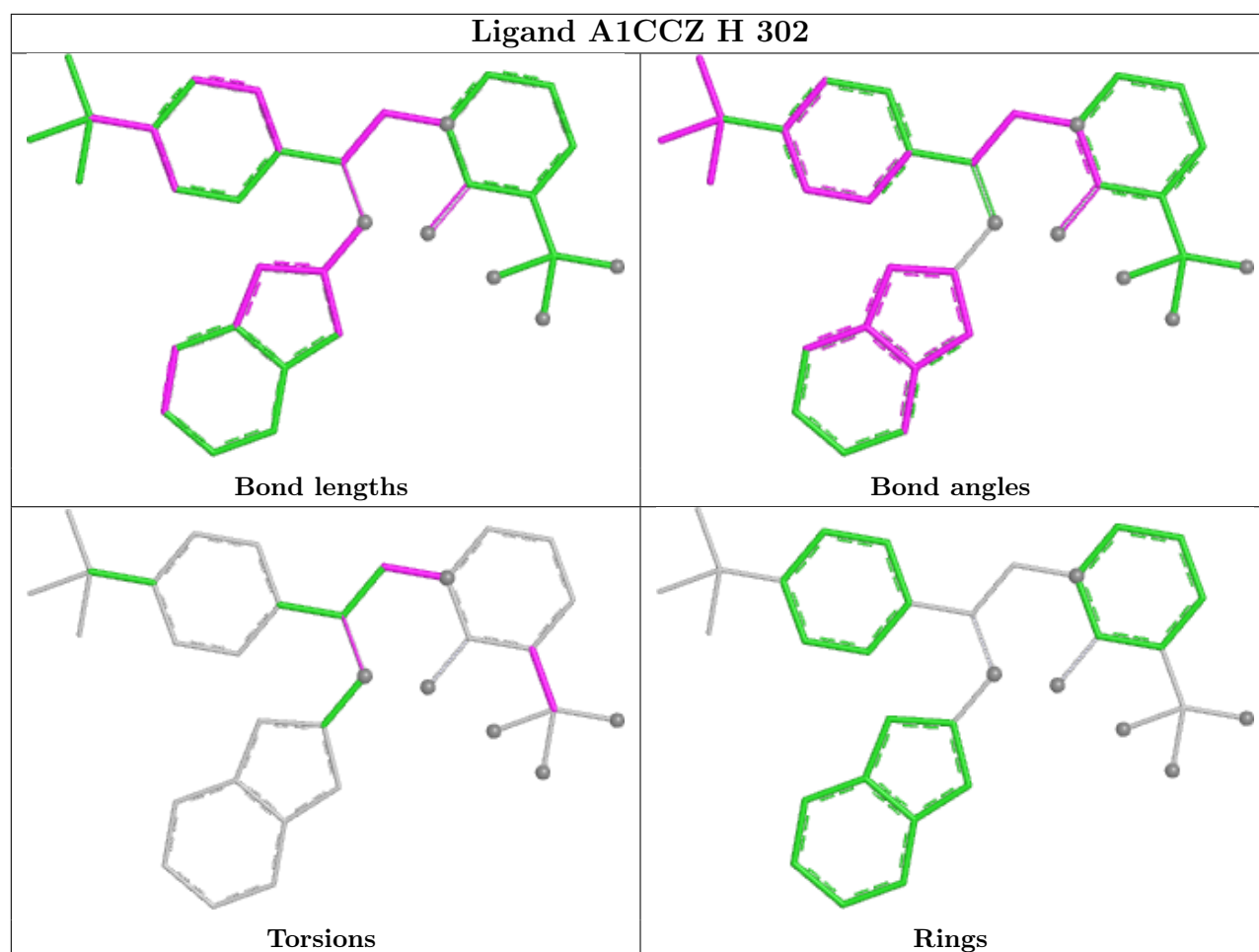
Bond angles



Torsions



Rings



6.7 Other polymers [i](#)

There are no such molecules in this entry.

6.8 Polymer linkage issues [i](#)

There are no chain breaks in this entry.

7 Chemical shift validation

The completeness of assignment taking into account all chemical shift lists is 6% for the well-defined parts and 6% for the entire structure.

7.1 Chemical shift list 1

File name: working_cs.cif

Chemical shift list name: *D_1000295827_cs_P1.str.V1*

7.1.1 Bookkeeping

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

Total number of shifts	514
Number of shifts mapped to atoms	514
Number of unparsed shifts	0
Number of shifts with mapping errors	0
Number of shifts with mapping warnings	0
Number of shift outliers (ShiftChecker)	2

7.1.2 Chemical shift referencing

The following table shows the suggested chemical shift referencing corrections.

Nucleus	# values	Correction $\pm$ precision, ppm	Suggested action
$^{13}\text{C}_\alpha$	96	-0.78 ± 0.21	Should be checked
$^{13}\text{C}_\beta$	87	0.07 ± 0.17	None needed (< 0.5 ppm)
$^{13}\text{C}'$	92	-0.75 ± 0.16	Should be applied
^{15}N	93	-0.46 ± 0.78	None needed (< 0.5 ppm)

7.1.3 Completeness of resonance assignments

The following table shows the completeness of the chemical shift assignments for the well-defined regions of the structure. The overall completeness is 6%, i.e. 494 atoms were assigned a chemical shift out of a possible 7723. 0 out of 82 assigned methyl groups (LEU and VAL) were assigned stereospecifically.

	Total	^1H	^{13}C	^{15}N
Backbone	272/2862 (10%)	2/1162 (0%)	184/1156 (16%)	86/544 (16%)
Sidechain	203/4519 (4%)	6/2939 (0%)	196/1394 (14%)	1/186 (1%)

Continued on next page...

Continued from previous page...

	Total	¹H	¹³C	¹⁵N
Aromatic	19/342 (6%)	1/168 (1%)	18/162 (11%)	0/12 (0%)
Overall	494/7723 (6%)	9/4269 (0%)	398/2712 (15%)	87/742 (12%)

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 6%, i.e. 500 atoms were assigned a chemical shift out of a possible 8046. 0 out of 84 assigned methyl groups (LEU and VAL) were assigned stereospecifically.

	Total	¹H	¹³C	¹⁵N
Backbone	278/3042 (9%)	2/1242 (0%)	188/1224 (15%)	88/576 (15%)
Sidechain	203/4662 (4%)	6/3036 (0%)	196/1440 (14%)	1/186 (1%)
Aromatic	19/342 (6%)	1/168 (1%)	18/162 (11%)	0/12 (0%)
Overall	500/8046 (6%)	9/4446 (0%)	402/2826 (14%)	89/774 (11%)

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 ⓘ

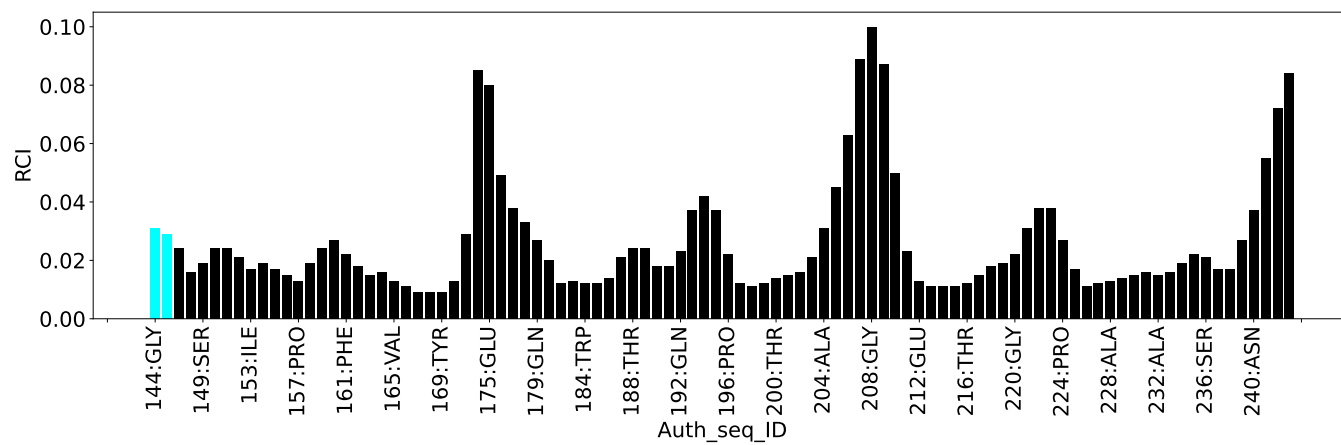
The following table lists the statistically unusual chemical shifts. These are statistical measures, and large deviations from the mean do not necessarily imply incorrect assignments. Molecules containing paramagnetic centres or hemes are expected to give rise to anomalous chemical shifts.

List Id	Chain	Res	Type	Atom	Shift, ppm	Expected range, ppm	Z-score
1	G	229	ARG	NE	141.70	76.53 – 92.65	35.4
1	G	158	LYS	H	4.70	5.24 – 11.12	-5.9

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 G:



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	2427
Intra-residue ($ i-j =0$)	834
Sequential ($ i-j =1$)	284
Medium range ($ i-j >1$ and $ i-j <5$)	488
Long range ($ i-j \geq 5$)	414
Inter-chain	407
Hydrogen bond restraints	0
Disulfide bond restraints	0
Total dihedral-angle restraints	1116
Number of unmapped restraints	0
Number of restraints per residue	5.8
Number of long range restraints per residue ¹	0.7

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)	22.2	0.2
0.2-0.5 (Medium)	42.0	0.5
>0.5 (Large)	20.4	1.49

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)	188.3	10.0
10.0-20.0 (Medium)	19.8	19.86
>20.0 (Large)	2.2	28.71

9 Distance violation analysis ⓘ

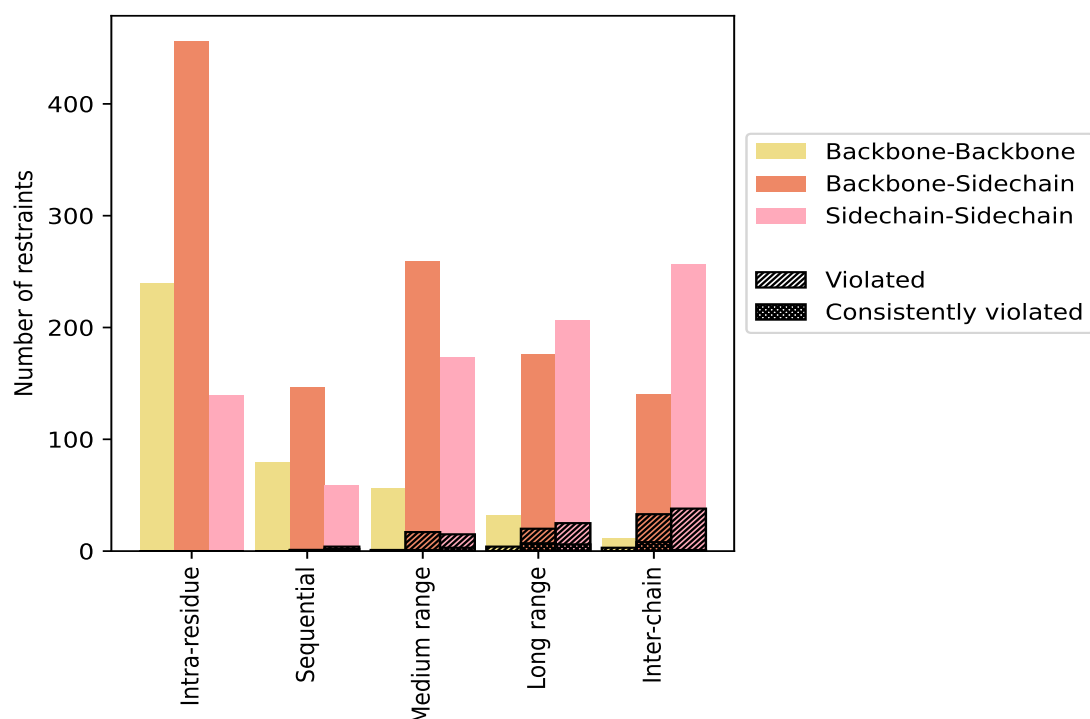
9.1 Summary of distance violations ⓘ

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 ($i-j =0$)	834	34.4	0	0.0	0.0	0	0.0	0.0
Backbone-Backbone	239	9.8	0	0.0	0.0	0	0.0	0.0
Backbone-Sidechain	456	18.8	0	0.0	0.0	0	0.0	0.0
Sidechain-Sidechain	139	5.7	0	0.0	0.0	0	0.0	0.0
Sequential ($i-j =1$)	284	11.7	5	1.8	0.2	3	1.1	0.1
Backbone-Backbone	79	3.3	0	0.0	0.0	0	0.0	0.0
Backbone-Sidechain	146	6.0	1	0.7	0.0	1	0.7	0.0
Sidechain-Sidechain	59	2.4	4	6.8	0.2	2	3.4	0.1
Medium range ($i-j >1$ & $i-j <5$)	488	20.1	33	6.8	1.4	4	0.8	0.2
Backbone-Backbone	56	2.3	1	1.8	0.0	0	0.0	0.0
Backbone-Sidechain	259	10.7	17	6.6	0.7	1	0.4	0.0
Sidechain-Sidechain	173	7.1	15	8.7	0.6	3	1.7	0.1
Long range ($i-j \geq 5$)	414	17.1	49	11.8	2.0	13	3.1	0.5
Backbone-Backbone	32	1.3	4	12.5	0.2	0	0.0	0.0
Backbone-Sidechain	176	7.3	20	11.4	0.8	7	4.0	0.3
Sidechain-Sidechain	206	8.5	25	12.1	1.0	6	2.9	0.2
Inter-chain	407	16.8	74	18.2	3.0	9	2.2	0.4
Backbone-Backbone	11	0.5	3	27.3	0.1	0	0.0	0.0
Backbone-Sidechain	140	5.8	33	23.6	1.4	8	5.7	0.3
Sidechain-Sidechain	256	10.5	38	14.8	1.6	1	0.4	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	2427	100.0	161	6.6	6.6	29	1.2	1.2
Backbone-Backbone	417	17.2	8	1.9	0.3	0	0.0	0.0
Backbone-Sidechain	1177	48.5	71	6.0	2.9	17	1.4	0.7
Sidechain-Sidechain	833	34.3	82	9.8	3.4	12	1.4	0.5

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

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



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

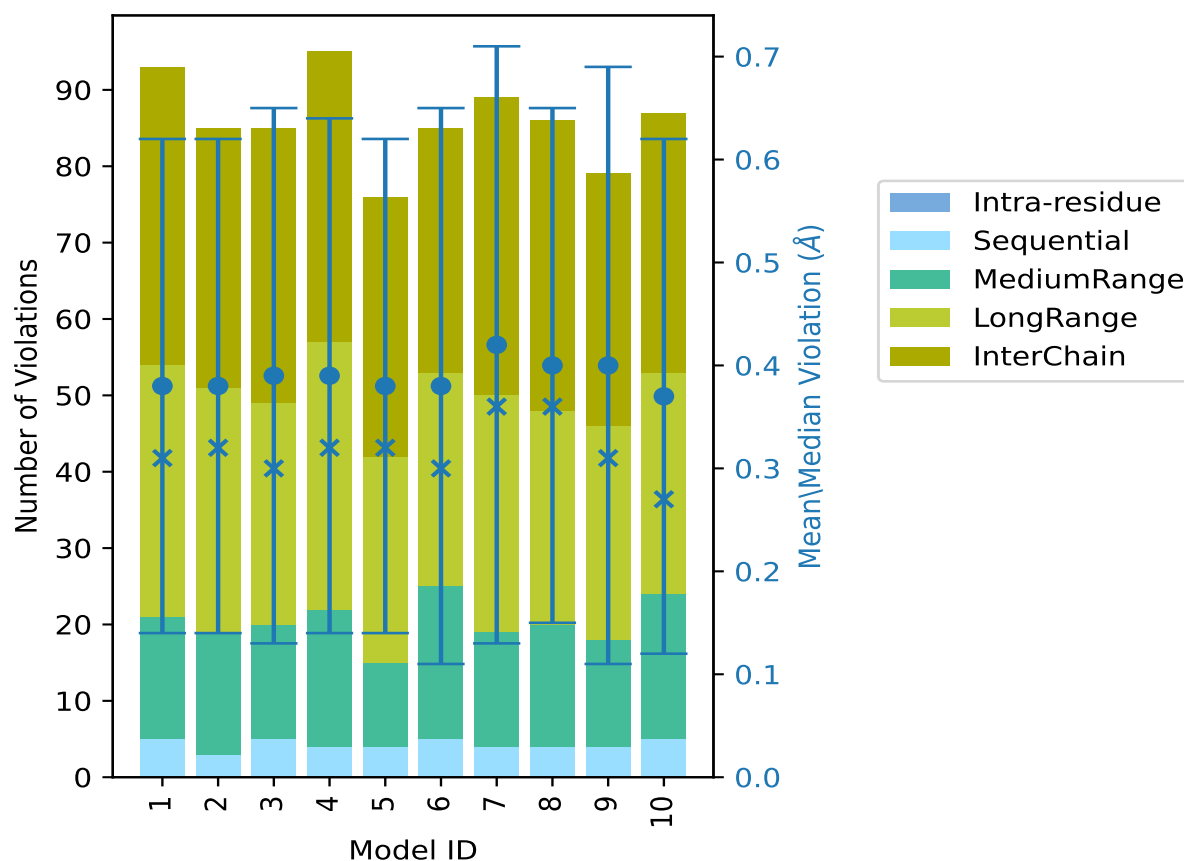
9.2 Distance violation statistics for each model [i](#)

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

Model ID	Number of violations						Mean (Å)	Max (Å)	SD ⁶ (Å)	Median (Å)
	IR ¹	SQ ²	MR ³	LR ⁴	IC ⁵	Total				
1	0	5	16	33	39	93	0.38	1.19	0.24	0.31
2	0	3	16	32	34	85	0.38	1.25	0.24	0.32
3	0	5	15	29	36	85	0.39	1.24	0.26	0.3
4	0	4	18	35	38	95	0.39	1.24	0.25	0.32
5	0	4	11	27	34	76	0.38	1.25	0.24	0.32
6	0	5	20	28	32	85	0.38	1.38	0.27	0.3
7	0	4	15	31	39	89	0.42	1.32	0.29	0.36
8	0	4	16	28	38	86	0.4	1.33	0.25	0.36
9	0	4	14	28	33	79	0.4	1.49	0.29	0.31
10	0	5	19	29	34	87	0.37	1.2	0.25	0.27

¹Intra-residue restraints, ²Sequential restraints, ³Medium range restraints, ⁴Long range restraints, ⁵Inter-chain restraints, ⁶Standard deviation

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



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

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

Violation analysis may find that some restraints are violated in few models and some are violated in most of models. The following table provides this information as number of violated restraints for a given fraction of the ensemble. In total, 2266(IR:834, SQ:279, MR:455, LR:365, IC:333) restraints are not violated in the ensemble.

Number of violated restraints						Fraction of the ensemble	
IR ¹	SQ ²	MR ³	LR ⁴	IC ⁵	Total	Count ⁶	%
0	0	7	5	17	29	1	10.0
0	0	3	3	9	15	2	20.0
0	0	4	6	6	16	3	30.0

Continued on next page...

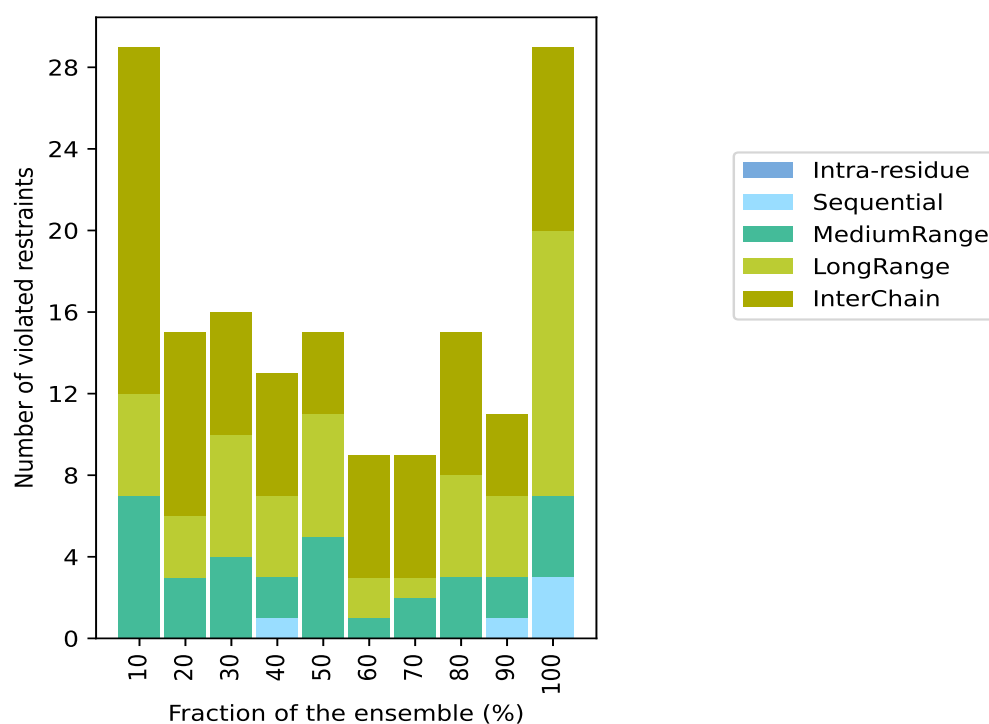
Continued from previous page...

Number of violated restraints						Fraction of the ensemble	
IR ¹	SQ ²	MR ³	LR ⁴	IC ⁵	Total	Count ⁶	%
0	1	2	4	6	13	4	40.0
0	0	5	6	4	15	5	50.0
0	0	1	2	6	9	6	60.0
0	0	2	1	6	9	7	70.0
0	0	3	5	7	15	8	80.0
0	1	2	4	4	11	9	90.0
0	3	4	13	9	29	10	100.0

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

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

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

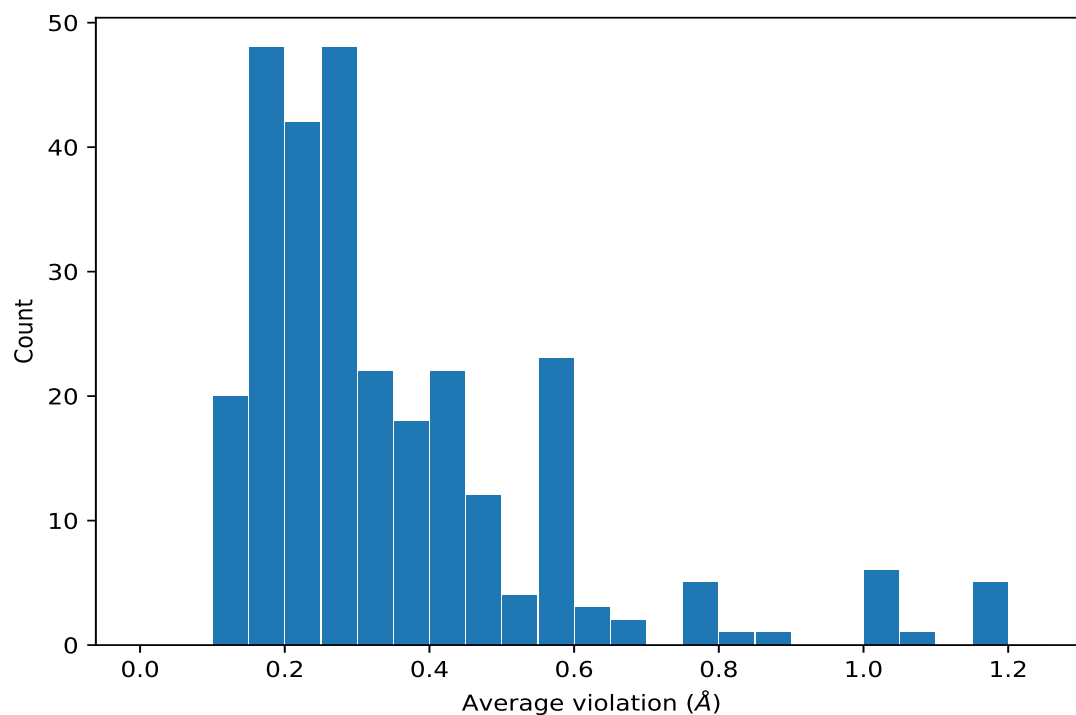


9.4 Most violated distance restraints in the ensemble [i](#)

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

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

in the ensemble



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

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

Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)	Median (Å)
(1,1096)	1:171:H:THR:CG2	1:152:H:ASP:CB	10	1.16	0.23	1.22
(1,1096)	1:171:J:THR:CG2	1:152:J:ASP:CB	10	1.16	0.23	1.22
(1,1096)	1:171:L:THR:CG2	1:152:L:ASP:CB	10	1.16	0.23	1.22
(1,1096)	1:171:K:THR:CG2	1:152:K:ASP:CB	10	1.16	0.23	1.22
(1,1096)	1:171:I:THR:CG2	1:152:I:ASP:CB	10	1.16	0.23	1.22
(1,2172)	2:301:H:IHP:P1	1:158:H:LYS:HA	10	1.05	0.09	1.03
(1,833)	1:221:J:VAL:CG2	1:230:J:VAL:CG2	10	1.03	0.24	1.07
(1,833)	1:221:I:VAL:CG2	1:230:I:VAL:CG1	10	1.03	0.24	1.07
(1,833)	1:221:G:VAL:CG2	1:230:G:VAL:CG2	10	1.03	0.24	1.07
(1,833)	1:221:I:VAL:CG2	1:230:I:VAL:CG2	10	1.03	0.24	1.07
(1,833)	1:221:H:VAL:CG2	1:230:H:VAL:CG1	10	1.03	0.24	1.07
(1,833)	1:221:G:VAL:CG2	1:230:G:VAL:CG1	10	1.03	0.24	1.07
(1,2118)	2:301:H:IHP:P4	1:158:J:LYS:HA	10	0.89	0.24	0.96
(1,2207)	2:301:H:IHP:O35	3:302:H:A1CCZ:F32	10	0.85	0.15	0.86
(1,2174)	2:301:H:IHP:P2	1:158:L:LYS:HA	10	0.78	0.36	0.74

Continued on next page

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)	Median (Å)
(1,2115)	2:301:H:IHP:P4	1:158:G:LYS:HA	10	0.68	0.21	0.68
(1,29)	1:219:L:GLN:CG	1:155:K:GLN:CA	10	0.63	0.2	0.58
(1,2262)	3:302:H:A1CCZ:H7A	1:232:H:ALA:CA	10	0.59	0.21	0.68
(1,2262)	3:302:H:A1CCZ:H7B	1:232:H:ALA:CA	10	0.59	0.21	0.68
(1,412)	1:202:L:LEU:CG	1:194:L:ALA:CA	10	0.57	0.2	0.55
(1,412)	1:202:K:LEU:CG	1:194:K:ALA:CA	10	0.57	0.2	0.55
(1,412)	1:202:I:LEU:CG	1:194:I:ALA:CA	10	0.57	0.2	0.55
(1,412)	1:202:H:LEU:CG	1:194:H:ALA:CA	10	0.57	0.2	0.55
(1,1638)	1:155:J:GLN:CB	1:197:J:ASP:CB	10	0.56	0.16	0.52
(1,1638)	1:155:I:GLN:CB	1:197:I:ASP:CB	10	0.56	0.16	0.52
(1,1582)	1:153:I:ILE:CG1	1:172:I:LEU:CA	10	0.55	0.08	0.57
(1,1582)	1:153:K:ILE:CG1	1:172:K:LEU:CA	10	0.55	0.08	0.57
(1,1582)	1:153:G:ILE:CG1	1:172:G:LEU:CA	10	0.55	0.08	0.57
(1,1582)	1:153:H:ILE:CG1	1:172:H:LEU:CA	10	0.55	0.08	0.57
(1,1582)	1:153:L:ILE:CG1	1:172:L:LEU:CA	10	0.55	0.08	0.57
(1,278)	1:155:H:GLN:CB	1:196:H:PRO:CA	10	0.55	0.13	0.6
(1,278)	1:155:K:GLN:CB	1:196:K:PRO:CA	10	0.55	0.13	0.6
(1,278)	1:155:G:GLN:CB	1:196:G:PRO:CA	10	0.55	0.13	0.6
(1,278)	1:155:J:GLN:CB	1:196:J:PRO:CA	10	0.55	0.13	0.6
(1,1318)	1:172:K:LEU:CD1	1:183:K:ASN:CB	10	0.55	0.19	0.53
(1,1318)	1:172:J:LEU:CD1	1:183:J:ASN:CB	10	0.55	0.19	0.53
(1,1318)	1:172:G:LEU:CD1	1:183:G:ASN:CB	10	0.55	0.19	0.53
(1,636)	1:150:J:ILE:CD1	1:186:J:THR:CB	10	0.52	0.15	0.49
(1,636)	1:150:K:ILE:CD1	1:186:K:THR:CB	10	0.52	0.15	0.49
(1,636)	1:150:I:ILE:CD1	1:186:I:THR:CB	10	0.52	0.15	0.49
(1,1339)	1:201:I:ILE:CG1	1:214:I:MET:CA	10	0.49	0.09	0.5
(1,1339)	1:201:L:ILE:CG1	1:214:L:MET:CA	10	0.49	0.09	0.5
(1,987)	1:235:K:MET:CB	1:230:K:VAL:CA	10	0.46	0.07	0.48
(1,987)	1:235:G:MET:CB	1:230:G:VAL:CA	10	0.46	0.07	0.48
(1,987)	1:235:J:MET:CB	1:230:J:VAL:CA	10	0.46	0.07	0.48
(1,987)	1:235:H:MET:CB	1:230:H:VAL:CA	10	0.46	0.07	0.48
(1,75)	1:219:G:GLN:CG	1:195:L:ASN:CA	10	0.46	0.18	0.42
(1,1438)	1:172:K:LEU:CG	1:183:K:ASN:CA	10	0.45	0.14	0.48
(1,1438)	1:172:J:LEU:CG	1:183:J:ASN:CA	10	0.45	0.14	0.48
(1,1438)	1:172:L:LEU:CG	1:183:L:ASN:CA	10	0.45	0.14	0.48
(1,1150)	1:192:H:GLN:CA	1:164:H:TYR:CZ	10	0.44	0.07	0.44
(1,1150)	1:192:I:GLN:CA	1:164:I:TYR:CZ	10	0.44	0.07	0.44
(1,1648)	1:160:H:PRO:CG	1:161:H:PHE:CG	10	0.43	0.05	0.44
(1,1648)	1:160:K:PRO:CG	1:161:K:PHE:CG	10	0.43	0.05	0.44
(1,1648)	1:160:L:PRO:CG	1:161:L:PHE:CG	10	0.43	0.05	0.44
(1,1648)	1:160:G:PRO:CG	1:161:G:PHE:CG	10	0.43	0.05	0.44
(1,658)	1:235:G:MET:CB	1:233:G:GLU:CG	10	0.42	0.06	0.41

Continued on next page

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)	Median (Å)
(1,658)	1:235:H:MET:CB	1:233:H:GLU:CG	10	0.42	0.06	0.41
(1,658)	1:235:I:MET:CB	1:233:I:GLU:CG	10	0.42	0.06	0.41
(1,1)	1:162:G:ARG:CG	1:154:L:ARG:CA	10	0.37	0.15	0.39
(1,384)	1:185:J:MET:CG	1:151:J:LEU:CB	10	0.35	0.16	0.38
(1,384)	1:185:L:MET:CG	1:151:L:LEU:CB	10	0.35	0.16	0.38
(1,218)	1:179:G:GLN:CB	1:177:G:ALA:CA	10	0.31	0.03	0.3
(1,218)	1:179:K:GLN:CB	1:177:K:ALA:CA	10	0.31	0.03	0.3
(1,689)	1:201:J:ILE:CD1	1:202:J:LEU:C	10	0.3	0.04	0.31
(1,689)	1:201:K:ILE:CD1	1:202:K:LEU:C	10	0.3	0.04	0.31
(1,689)	1:201:I:ILE:CD1	1:202:I:LEU:C	10	0.3	0.04	0.31
(1,689)	1:201:H:ILE:CD1	1:202:H:LEU:C	10	0.3	0.04	0.31
(1,968)	1:221:I:VAL:CG2	1:219:I:GLN:CG	10	0.3	0.1	0.32
(1,968)	1:221:K:VAL:CG2	1:219:K:GLN:CG	10	0.3	0.1	0.32
(1,968)	1:221:G:VAL:CG2	1:219:G:GLN:CG	10	0.3	0.1	0.32
(1,389)	1:210:K:THR:CG2	1:211:K:LEU:CG	10	0.23	0.05	0.22
(1,389)	1:210:H:THR:CG2	1:211:H:LEU:CG	10	0.23	0.05	0.22
(1,389)	1:210:J:THR:CG2	1:211:J:LEU:CG	10	0.23	0.05	0.22
(1,1533)	1:190:H:LEU:CG	1:187:H:GLU:CB	10	0.22	0.07	0.22
(1,1533)	1:190:K:LEU:CG	1:187:K:GLU:CB	10	0.22	0.07	0.22
(1,1533)	1:190:L:LEU:CG	1:187:L:GLU:CB	10	0.22	0.07	0.22
(1,1533)	1:190:I:LEU:CG	1:187:I:GLU:CB	10	0.22	0.07	0.22
(1,2277)	3:302:H:A1CCZ:H9A	1:232:I:ALA:CA	9	0.77	0.22	0.78
(1,2277)	3:302:H:A1CCZ:H9B	1:232:I:ALA:CA	9	0.77	0.22	0.78
(1,685)	1:187:J:GLU:CB	1:184:J:TRP:CE2	9	0.51	0.15	0.49
(1,169)	1:165:K:VAL:CG2	1:202:K:LEU:CG	9	0.44	0.1	0.45
(1,2258)	3:302:H:A1CCZ:H11	1:232:H:ALA:CA	9	0.42	0.16	0.4
(1,2293)	3:302:H:A1CCZ:F33	1:160:H:PRO:CA	9	0.42	0.14	0.39
(1,540)	1:230:K:VAL:CG2	1:221:K:VAL:CA	9	0.35	0.13	0.44
(1,540)	1:230:J:VAL:CG1	1:221:J:VAL:CA	9	0.35	0.13	0.44
(1,540)	1:230:H:VAL:CG1	1:221:H:VAL:CA	9	0.35	0.13	0.44
(1,540)	1:230:J:VAL:CG2	1:221:J:VAL:CA	9	0.35	0.13	0.44
(1,540)	1:230:I:VAL:CG2	1:221:I:VAL:CA	9	0.35	0.13	0.44
(1,540)	1:230:H:VAL:CG2	1:221:H:VAL:CA	9	0.35	0.13	0.44
(1,227)	1:198:H:CYS:CB	1:199:H:LYS:CE	9	0.3	0.07	0.29
(1,227)	1:198:J:CYS:CB	1:199:J:LYS:CE	9	0.3	0.07	0.29
(1,227)	1:198:G:CYS:CB	1:199:G:LYS:CE	9	0.3	0.07	0.29
(1,1233)	1:190:H:LEU:CD1	1:166:H:ASP:CA	9	0.27	0.06	0.28
(1,1233)	1:190:K:LEU:CD1	1:166:K:ASP:CA	9	0.27	0.06	0.28
(1,2123)	2:301:H:IHP:P4	1:158:K:LYS:HE2	9	0.26	0.08	0.24
(1,2123)	2:301:H:IHP:P4	1:158:K:LYS:HE3	9	0.26	0.08	0.24
(1,267)	1:188:K:THR:CG2	1:185:K:MET:CB	9	0.26	0.08	0.24
(1,297)	1:244:L:ILE:CG1	1:237:L:GLN:CA	9	0.17	0.03	0.15

Continued on next page

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)	Median (Å)
(1,297)	1:244:H:ILE:CG1	1:237:H:GLN:CA	9	0.17	0.03	0.15
(1,297)	1:244:I:ILE:CG1	1:237:I:GLN:CA	9	0.17	0.03	0.15
(1,297)	1:244:J:ILE:CG1	1:237:J:GLN:CA	9	0.17	0.03	0.15
(1,2143)	2:301:H:IHP:P6	1:157:J:PRO:HD2	8	0.75	0.13	0.78
(1,2143)	2:301:H:IHP:P6	1:157:J:PRO:HD3	8	0.75	0.13	0.78
(1,2225)	3:302:H:A1CCZ:F33	1:159:H:GLU:CB	8	0.7	0.09	0.69
(2,14)	2:301:H:IHP:O33	3:302:H:A1CCZ:H12A	8	0.56	0.24	0.55
(2,14)	2:301:H:IHP:O33	3:302:H:A1CCZ:H12B	8	0.56	0.24	0.55
(1,1013)	1:189:I:LEU:CA	1:153:I:ILE:C	8	0.4	0.19	0.3
(1,1013)	1:189:K:LEU:CA	1:153:K:ILE:C	8	0.4	0.19	0.3
(1,1013)	1:189:H:LEU:CA	1:153:H:ILE:C	8	0.4	0.19	0.3
(1,1013)	1:189:L:LEU:CA	1:153:L:ILE:C	8	0.4	0.19	0.3
(1,365)	1:196:H:PRO:CD	1:200:H:THR:CB	8	0.39	0.1	0.41
(1,365)	1:196:K:PRO:CD	1:200:K:THR:CB	8	0.39	0.1	0.41
(1,365)	1:196:J:PRO:CD	1:200:J:THR:CB	8	0.39	0.1	0.41
(1,365)	1:196:I:PRO:CD	1:200:I:THR:CB	8	0.39	0.1	0.41
(1,1377)	1:205:I:LEU:CD1	1:210:I:THR:CA	8	0.36	0.13	0.33
(1,1377)	1:205:J:LEU:CD1	1:210:J:THR:CA	8	0.36	0.13	0.33
(1,1377)	1:205:L:LEU:CD1	1:210:L:THR:CA	8	0.36	0.13	0.33
(1,1377)	1:205:K:LEU:CD1	1:210:K:THR:CA	8	0.36	0.13	0.33
(1,74)	1:231:J:LEU:N	1:228:K:ALA:CB	8	0.35	0.08	0.4
(1,5)	1:162:I:ARG:CG	1:154:H:ARG:CA	8	0.34	0.15	0.4
(1,78)	1:219:J:GLN:CG	1:195:I:ASN:CA	8	0.31	0.11	0.33
(1,561)	1:201:H:ILE:CG1	1:205:H:LEU:CA	8	0.3	0.04	0.3
(1,561)	1:201:L:ILE:CG1	1:205:L:LEU:CA	8	0.3	0.04	0.3
(1,561)	1:201:J:ILE:CG1	1:205:J:LEU:CA	8	0.3	0.04	0.3
(1,387)	1:194:J:ALA:CB	1:154:J:ARG:CG	8	0.29	0.12	0.25
(1,387)	1:194:L:ALA:CB	1:154:L:ARG:CG	8	0.29	0.12	0.25
(1,387)	1:194:K:ALA:CB	1:154:K:ARG:CG	8	0.29	0.12	0.25
(1,387)	1:194:I:ALA:CB	1:154:I:ARG:CG	8	0.29	0.12	0.25
(1,673)	1:165:G:VAL:CG2	1:163:G:ASP:CB	8	0.22	0.08	0.22
(1,673)	1:165:H:VAL:CG2	1:163:H:ASP:CB	8	0.22	0.08	0.22
(1,673)	1:165:J:VAL:CG2	1:163:J:ASP:CB	8	0.22	0.08	0.22
(1,673)	1:165:K:VAL:CG2	1:163:K:ASP:CB	8	0.22	0.08	0.22
(1,2124)	2:301:H:IHP:P4	1:158:L:LYS:HE2	8	0.22	0.07	0.24
(1,2124)	2:301:H:IHP:P4	1:158:L:LYS:HE3	8	0.22	0.07	0.24
(1,1100)	1:190:H:LEU:CD1	1:169:H:TYR:CB	8	0.2	0.08	0.19
(1,1100)	1:190:G:LEU:CD1	1:169:G:TYR:CB	8	0.2	0.08	0.19
(1,1100)	1:190:K:LEU:CD1	1:169:K:TYR:CB	8	0.2	0.08	0.19
(1,936)	1:172:I:LEU:CD1	1:189:I:LEU:CB	8	0.16	0.05	0.15
(1,936)	1:172:H:LEU:CD1	1:189:H:LEU:CB	8	0.16	0.05	0.15
(1,936)	1:172:K:LEU:CD1	1:189:K:LEU:CB	8	0.16	0.05	0.15

Continued on next page

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)	Median (Å)
(1,2296)	3:302:H:A1CCZ:F32	1:196:H:PRO:CG	7	0.59	0.3	0.7
(2,92)	2:301:H:IHP:O25	3:302:H:A1CCZ:H12A	7	0.39	0.2	0.42
(2,92)	2:301:H:IHP:O25	3:302:H:A1CCZ:H12B	7	0.39	0.2	0.42
(1,2204)	2:301:H:IHP:O25	3:302:H:A1CCZ:F32	7	0.35	0.24	0.27
(1,414)	1:201:I:ILE:CG2	1:197:I:ASP:CB	7	0.31	0.1	0.35
(1,414)	1:201:H:ILE:CG2	1:197:H:ASP:CB	7	0.31	0.1	0.35
(1,414)	1:201:J:ILE:CG2	1:197:J:ASP:CB	7	0.31	0.1	0.35
(1,2308)	3:302:H:A1CCZ:F31	1:228:H:ALA:CA	7	0.25	0.11	0.19
(1,1220)	1:214:J:MET:CG	1:191:J:VAL:CB	7	0.24	0.06	0.28
(1,1220)	1:214:I:MET:CG	1:191:I:VAL:CB	7	0.24	0.06	0.28
(1,1220)	1:214:K:MET:CG	1:191:K:VAL:CB	7	0.24	0.06	0.28
(1,3)	1:162:K:ARG:CG	1:154:J:ARG:CA	7	0.24	0.12	0.21
(1,8)	1:195:I:ASN:CA	1:219:J:GLN:CA	7	0.22	0.09	0.22
(1,1381)	1:217:I:ALA:CB	1:221:I:VAL:CG2	7	0.21	0.08	0.22
(1,1381)	1:217:L:ALA:CB	1:221:L:VAL:CG2	7	0.21	0.08	0.22
(1,1381)	1:217:K:ALA:CB	1:221:K:VAL:CG2	7	0.21	0.08	0.22
(1,2196)	2:301:H:IHP:O41	3:302:H:A1CCZ:F32	6	0.42	0.28	0.34
(1,1481)	1:194:I:ALA:CB	1:202:I:LEU:CB	6	0.36	0.1	0.38
(1,1481)	1:194:J:ALA:CB	1:202:J:LEU:CB	6	0.36	0.1	0.38
(1,1481)	1:194:L:ALA:CB	1:202:L:LEU:CB	6	0.36	0.1	0.38
(1,1481)	1:194:H:ALA:CB	1:202:H:LEU:CB	6	0.36	0.1	0.38
(1,73)	1:231:I:LEU:N	1:228:J:ALA:CB	6	0.28	0.13	0.24
(1,4)	1:162:J:ARG:CG	1:154:I:ARG:CA	6	0.28	0.11	0.26
(1,25)	1:232:L:ALA:CB	1:238:K:VAL:CB	6	0.27	0.05	0.29
(1,2163)	2:301:H:IHP:P1	1:224:J:PRO:HG2	6	0.25	0.18	0.18
(1,2163)	2:301:H:IHP:P1	1:224:J:PRO:HG3	6	0.25	0.18	0.18
(1,2132)	2:301:H:IHP:P4	1:158:K:LYS:HZ1	6	0.2	0.1	0.18
(1,2132)	2:301:H:IHP:P4	1:158:K:LYS:HZ2	6	0.2	0.1	0.18
(1,2132)	2:301:H:IHP:P4	1:158:K:LYS:HZ3	6	0.2	0.1	0.18
(1,808)	1:191:L:VAL:CG1	1:193:L:ASN:CA	6	0.19	0.08	0.16
(1,808)	1:191:K:VAL:CG1	1:193:K:ASN:CA	6	0.19	0.08	0.16
(1,166)	1:219:H:GLN:CG	1:160:H:PRO:CA	6	0.18	0.04	0.18
(1,166)	1:219:J:GLN:CG	1:160:J:PRO:CA	6	0.18	0.04	0.18
(2,8)	2:301:H:IHP:O23	3:302:H:A1CCZ:H9A	5	0.63	0.35	0.59
(2,8)	2:301:H:IHP:O23	3:302:H:A1CCZ:H9B	5	0.63	0.35	0.59
(1,2250)	3:302:H:A1CCZ:F32	1:198:H:CYS:CA	5	0.32	0.15	0.29
(1,945)	1:150:J:ILE:CD1	1:193:J:ASN:CG	5	0.25	0.07	0.27
(1,945)	1:150:G:ILE:CD1	1:193:G:ASN:CG	5	0.25	0.07	0.27
(1,2210)	2:301:H:IHP:O45	3:302:H:A1CCZ:F32	5	0.25	0.13	0.18
(1,580)	1:153:K:ILE:CD1	1:193:K:ASN:CG	5	0.22	0.04	0.23
(1,580)	1:153:L:ILE:CD1	1:193:L:ASN:CG	5	0.22	0.04	0.23
(1,248)	1:156:J:GLY:CA	1:196:J:PRO:CD	5	0.19	0.1	0.13

Continued on next page

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)	Median (Å)
(1,248)	1:156:L:GLY:CA	1:196:L:PRO:CD	5	0.19	0.1	0.13
(1,248)	1:156:I:GLY:CA	1:196:I:PRO:CD	5	0.19	0.1	0.13
(1,248)	1:156:K:GLY:CA	1:196:K:PRO:CD	5	0.19	0.1	0.13
(1,1313)	1:190:G:LEU:CD1	1:202:G:LEU:CG	5	0.18	0.06	0.19
(1,1313)	1:190:K:LEU:CD1	1:202:K:LEU:CG	5	0.18	0.06	0.19
(1,1313)	1:190:L:LEU:CD1	1:202:L:LEU:CG	5	0.18	0.06	0.19
(1,505)	1:174:J:ALA:CA	1:148:J:THR:CA	5	0.17	0.03	0.17
(1,505)	1:174:K:ALA:CA	1:148:K:THR:CA	5	0.17	0.03	0.17
(1,505)	1:174:I:ALA:CA	1:148:I:THR:CA	5	0.17	0.03	0.17
(1,423)	1:190:G:LEU:CG	1:193:G:ASN:C	5	0.17	0.06	0.14
(1,423)	1:190:K:LEU:CG	1:193:K:ASN:C	5	0.17	0.06	0.14
(1,539)	1:187:J:GLU:CB	1:184:J:TRP:CZ3	5	0.16	0.02	0.17
(1,539)	1:187:G:GLU:CB	1:184:G:TRP:CZ3	5	0.16	0.02	0.17
(1,539)	1:187:L:GLU:CB	1:184:L:TRP:CZ3	5	0.16	0.02	0.17
(1,1620)	1:190:G:LEU:CD1	1:194:G:ALA:C	5	0.16	0.03	0.15
(1,1620)	1:190:H:LEU:CD1	1:194:H:ALA:C	5	0.16	0.03	0.15
(1,76)	1:219:L:GLN:CG	1:195:K:ASN:CA	5	0.16	0.08	0.12
(1,640)	1:190:L:LEU:CD1	1:193:L:ASN:C	5	0.16	0.03	0.16
(1,640)	1:190:I:LEU:CD1	1:193:I:ASN:C	5	0.16	0.03	0.16
(1,640)	1:190:G:LEU:CD1	1:193:G:ASN:C	5	0.16	0.03	0.16
(1,989)	1:221:I:VAL:CG1	1:223:I:GLY:CA	5	0.16	0.04	0.15
(1,989)	1:221:K:VAL:CG1	1:223:K:GLY:CA	5	0.16	0.04	0.15
(1,1591)	1:175:I:GLU:CB	1:185:I:MET:CB	5	0.16	0.03	0.14
(1,1591)	1:175:L:GLU:CB	1:185:L:MET:CB	5	0.16	0.03	0.14
(1,1591)	1:175:K:GLU:CB	1:185:K:MET:CB	5	0.16	0.03	0.14
(1,2221)	3:302:H:A1CCZ:F33	1:224:H:PRO:CG	4	0.42	0.1	0.44
(2,12)	2:301:H:IHP:O23	3:302:H:A1CCZ:H12A	4	0.37	0.13	0.36
(2,12)	2:301:H:IHP:O23	3:302:H:A1CCZ:H12B	4	0.37	0.13	0.36
(1,420)	1:202:L:LEU:CD1	1:199:L:LYS:CD	4	0.36	0.12	0.38
(1,2197)	2:301:H:IHP:O41	3:302:H:A1CCZ:F33	4	0.33	0.1	0.38
(1,1497)	1:165:K:VAL:CG2	1:214:K:MET:CA	4	0.29	0.04	0.29
(1,1497)	1:165:H:VAL:CG2	1:214:H:MET:CA	4	0.29	0.04	0.29
(1,48)	1:221:K:VAL:CG1	1:224:L:PRO:CD	4	0.26	0.04	0.26
(1,48)	1:221:K:VAL:CG2	1:224:L:PRO:CD	4	0.26	0.04	0.26
(1,2284)	3:302:H:A1CCZ:F32	1:157:H:PRO:CG	4	0.25	0.06	0.28
(1,204)	1:150:H:ILE:CD1	1:189:H:LEU:CA	4	0.25	0.1	0.21
(1,204)	1:150:K:ILE:CD1	1:189:K:LEU:CA	4	0.25	0.1	0.21
(1,1519)	1:167:K:ARG:CD	1:171:K:THR:CA	4	0.16	0.05	0.14
(1,1519)	1:167:G:ARG:CD	1:171:G:THR:CA	4	0.16	0.05	0.14
(1,1519)	1:167:I:ARG:CD	1:171:I:THR:CA	4	0.16	0.05	0.14
(1,1519)	1:167:H:ARG:CD	1:171:H:THR:CA	4	0.16	0.05	0.14
(1,1473)	1:153:J:ILE:CG2	1:165:J:VAL:C	4	0.14	0.03	0.15

Continued on next page

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)	Median (Å)
(1,1473)	1:153:I:ILE:CG2	1:165:I:VAL:C	4	0.14	0.03	0.15
(1,2133)	2:301:H:IHP:P4	1:158:L:LYS:HZ1	4	0.14	0.03	0.13
(1,2133)	2:301:H:IHP:P4	1:158:L:LYS:HZ2	4	0.14	0.03	0.13
(1,2133)	2:301:H:IHP:P4	1:158:L:LYS:HZ3	4	0.14	0.03	0.13
(1,1172)	1:244:L:ILE:CG1	1:237:L:GLN:CB	4	0.13	0.02	0.13
(1,1123)	1:211:J:LEU:CD1	1:210:J:THR:CB	4	0.12	0.01	0.12
(1,1123)	1:211:L:LEU:CD1	1:210:L:THR:CB	4	0.12	0.01	0.12
(1,77)	1:219:K:GLN:CG	1:195:J:ASN:CA	3	0.35	0.01	0.34
(1,11)	1:195:L:ASN:CA	1:219:G:GLN:CA	3	0.31	0.11	0.35
(1,1385)	1:151:J:LEU:CG	1:189:J:LEU:CB	3	0.27	0.01	0.28
(1,1385)	1:151:G:LEU:CG	1:189:G:LEU:CB	3	0.27	0.01	0.28
(1,2190)	2:301:H:IHP:O21	3:302:H:A1CCZ:F32	3	0.25	0.06	0.23
(1,2233)	3:302:H:A1CCZ:F32	1:195:H:ASN:CA	3	0.25	0.07	0.24
(1,1469)	1:214:J:MET:CB	1:205:J:LEU:CA	3	0.25	0.11	0.21
(1,1469)	1:214:I:MET:CB	1:205:I:LEU:CA	3	0.25	0.11	0.21
(1,2251)	3:302:H:A1CCZ:F33	1:198:H:CYS:CA	3	0.22	0.05	0.22
(1,831)	1:150:K:ILE:CD1	1:190:K:LEU:CA	3	0.2	0.06	0.21
(1,756)	1:191:K:VAL:CG1	1:194:K:ALA:C	3	0.19	0.03	0.2
(1,756)	1:191:L:VAL:CG1	1:194:L:ALA:C	3	0.19	0.03	0.2
(1,1514)	1:193:J:ASN:CB	1:188:J:THR:C	3	0.18	0.05	0.17
(1,1514)	1:193:L:ASN:CB	1:188:L:THR:C	3	0.18	0.05	0.17
(1,442)	1:228:H:ALA:CB	1:224:H:PRO:CG	3	0.17	0.03	0.19
(1,442)	1:228:K:ALA:CB	1:224:K:PRO:CG	3	0.17	0.03	0.19
(1,442)	1:228:L:ALA:CB	1:224:L:PRO:CG	3	0.17	0.03	0.19
(1,1237)	1:155:H:GLN:CA	1:160:H:PRO:CA	3	0.15	0.05	0.11
(1,206)	1:160:J:PRO:CA	1:164:J:TYR:CD2	3	0.14	0.04	0.12
(1,206)	1:160:L:PRO:CA	1:164:L:TYR:CD2	3	0.14	0.04	0.12
(1,206)	1:160:I:PRO:CA	1:164:I:TYR:CD2	3	0.14	0.04	0.12
(1,399)	1:150:J:ILE:CD1	1:190:J:LEU:CD1	3	0.13	0.02	0.14
(1,399)	1:150:K:ILE:CD1	1:190:K:LEU:CD1	3	0.13	0.02	0.14
(1,1650)	1:204:H:ALA:CB	1:206:H:GLY:C	3	0.13	0.01	0.13
(1,1650)	1:204:J:ALA:CB	1:206:J:GLY:C	3	0.13	0.01	0.13
(1,24)	1:232:G:ALA:CB	1:238:L:VAL:CB	3	0.12	0.02	0.11
(2,16)	2:301:H:IHP:O43	3:302:H:A1CCZ:H12A	2	0.47	0.13	0.47
(2,16)	2:301:H:IHP:O43	3:302:H:A1CCZ:H12B	2	0.47	0.13	0.47
(1,2141)	2:301:H:IHP:P6	1:158:I:LYS:HA	2	0.43	0.1	0.43
(1,2135)	2:301:H:IHP:P4	1:227:H:LYS:HZ1	2	0.42	0.01	0.42
(1,2135)	2:301:H:IHP:P4	1:227:H:LYS:HZ2	2	0.42	0.01	0.42
(1,2135)	2:301:H:IHP:P4	1:227:H:LYS:HZ3	2	0.42	0.01	0.42
(1,2191)	2:301:H:IHP:O21	3:302:H:A1CCZ:F33	2	0.34	0.05	0.34
(1,2122)	2:301:H:IHP:P4	1:158:J:LYS:HE2	2	0.3	0.05	0.3
(1,2122)	2:301:H:IHP:P4	1:158:J:LYS:HE3	2	0.3	0.05	0.3

Continued on next page

Continued from previous page...

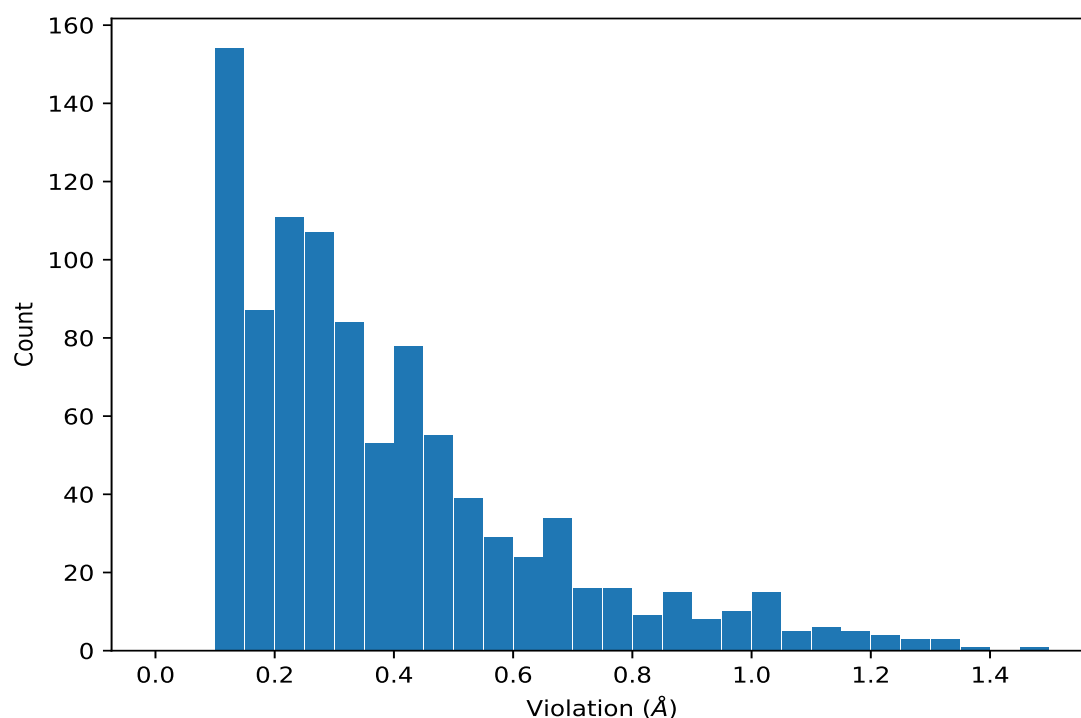
Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)	Median (Å)
(1,2292)	3:302:H:A1CCZ:F32	1:160:H:PRO:CA	2	0.29	0.14	0.29
(1,2157)	2:301:H:IHP:P3	1:158:L:LYS:HA	2	0.27	0.1	0.27
(1,1205)	1:153:K:ILE:CB	1:193:K:ASN:CA	2	0.24	0.04	0.24
(1,1205)	1:153:J:ILE:CB	1:193:J:ASN:CA	2	0.24	0.04	0.24
(1,6)	1:162:H:ARG:CG	1:154:G:ARG:CA	2	0.24	0.04	0.24
(1,974)	1:153:J:ILE:CD1	1:151:J:LEU:C	2	0.23	0.02	0.23
(1,974)	1:153:I:ILE:CD1	1:151:I:LEU:C	2	0.23	0.02	0.23
(1,2169)	2:301:H:IHP:P1	1:224:J:PRO:HD2	2	0.22	0.11	0.22
(1,2169)	2:301:H:IHP:P1	1:224:J:PRO:HD3	2	0.22	0.11	0.22
(1,1203)	1:191:K:VAL:CG1	1:194:K:ALA:CA	2	0.2	0.05	0.2
(1,1203)	1:191:L:VAL:CG1	1:194:L:ALA:CA	2	0.2	0.05	0.2
(1,1297)	1:218:G:CYS:CB	1:226:G:HIS:CD2	2	0.2	0.05	0.2
(1,1297)	1:218:J:CYS:CB	1:226:J:HIS:CD2	2	0.2	0.05	0.2
(1,915)	1:235:G:MET:CB	1:239:G:THR:CA	2	0.14	0.01	0.14
(1,560)	1:201:I:ILE:CD1	1:161:I:PHE:CD1	2	0.12	0.0	0.12
(1,560)	1:201:K:ILE:CD1	1:161:K:PHE:CD1	2	0.12	0.0	0.12

¹Number of violated models, ²Standard deviation

9.5 All violated distance restraints [i](#)

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

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



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

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

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1096)	1:171:I:THR:CG2	1:152:I:ASP:CB	9	1.49
(1,2174)	2:301:H:IHP:P2	1:158:L:LYS:HA	6	1.38
(1,1096)	1:171:J:THR:CG2	1:152:J:ASP:CB	8	1.33
(1,833)	1:221:G:VAL:CG2	1:230:G:VAL:CG1	9	1.33
(1,1096)	1:171:I:THR:CG2	1:152:I:ASP:CB	7	1.32
(1,2174)	2:301:H:IHP:P2	1:158:L:LYS:HA	7	1.28
(1,2172)	2:301:H:IHP:P1	1:158:H:LYS:HA	5	1.25
(1,1096)	1:171:J:THR:CG2	1:152:J:ASP:CB	2	1.25
(1,1096)	1:171:L:THR:CG2	1:152:L:ASP:CB	3	1.24
(1,833)	1:221:G:VAL:CG2	1:230:G:VAL:CG2	4	1.24
(1,2118)	2:301:H:IHP:P4	1:158:J:LYS:HA	5	1.21
(1,833)	1:221:I:VAL:CG2	1:230:I:VAL:CG2	6	1.21
(1,1096)	1:171:H:THR:CG2	1:152:H:ASP:CB	10	1.2
(1,833)	1:221:J:VAL:CG2	1:230:J:VAL:CG2	1	1.19
(1,2172)	2:301:H:IHP:P1	1:158:H:LYS:HA	10	1.18
(1,2207)	2:301:H:IHP:O35	3:302:H:A1CCZ:F32	6	1.16

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2118)	2:301:H:IHP:P4	1:158:J:LYS:HA	6	1.16
(1,29)	1:219:L:GLN:CG	1:155:K:GLN:CA	7	1.15
(1,2174)	2:301:H:IHP:P2	1:158:L:LYS:HA	8	1.12
(1,2162)	2:301:H:IHP:P1	1:224:I:PRO:HG2	7	1.12
(1,2162)	2:301:H:IHP:P1	1:224:I:PRO:HG3	7	1.12
(1,2118)	2:301:H:IHP:P4	1:158:J:LYS:HA	7	1.11
(1,833)	1:221:J:VAL:CG2	1:230:J:VAL:CG2	3	1.11
(1,2277)	3:302:H:A1CCZ:H9A	1:232:I:ALA:CA	9	1.05
(1,2277)	3:302:H:A1CCZ:H9B	1:232:I:ALA:CA	9	1.05
(1,2172)	2:301:H:IHP:P1	1:158:H:LYS:HA	1	1.05
(1,1096)	1:171:H:THR:CG2	1:152:H:ASP:CB	1	1.05
(1,1096)	1:171:H:THR:CG2	1:152:H:ASP:CB	5	1.05
(1,2172)	2:301:H:IHP:P1	1:158:H:LYS:HA	2	1.04
(1,2172)	2:301:H:IHP:P1	1:158:H:LYS:HA	3	1.04
(2,8)	2:301:H:IHP:O23	3:302:H:A1CCZ:H9A	1	1.03
(2,8)	2:301:H:IHP:O23	3:302:H:A1CCZ:H9B	1	1.03
(1,2118)	2:301:H:IHP:P4	1:158:J:LYS:HA	10	1.03
(1,833)	1:221:J:VAL:CG2	1:230:J:VAL:CG2	10	1.03
(2,8)	2:301:H:IHP:O23	3:302:H:A1CCZ:H9A	5	1.02
(2,8)	2:301:H:IHP:O23	3:302:H:A1CCZ:H9B	5	1.02
(1,2172)	2:301:H:IHP:P1	1:158:H:LYS:HA	8	1.02
(1,1096)	1:171:K:THR:CG2	1:152:K:ASP:CB	4	1.02
(1,2172)	2:301:H:IHP:P1	1:158:H:LYS:HA	7	1.01
(1,2115)	2:301:H:IHP:P4	1:158:G:LYS:HA	3	1.01
(1,833)	1:221:H:VAL:CG2	1:230:H:VAL:CG1	8	1.01
(1,2296)	3:302:H:A1CCZ:F32	1:196:H:PRO:CG	10	1.0
(1,412)	1:202:L:LEU:CG	1:194:L:ALA:CA	4	1.0
(1,2277)	3:302:H:A1CCZ:H9A	1:232:I:ALA:CA	2	0.99
(1,2277)	3:302:H:A1CCZ:H9B	1:232:I:ALA:CA	2	0.99
(1,2172)	2:301:H:IHP:P1	1:158:H:LYS:HA	4	0.99
(1,833)	1:221:I:VAL:CG2	1:230:I:VAL:CG1	2	0.99
(1,2277)	3:302:H:A1CCZ:H9A	1:232:I:ALA:CA	4	0.98
(1,2277)	3:302:H:A1CCZ:H9B	1:232:I:ALA:CA	4	0.98
(1,2172)	2:301:H:IHP:P1	1:158:H:LYS:HA	9	0.98
(1,2115)	2:301:H:IHP:P4	1:158:G:LYS:HA	9	0.97
(1,1318)	1:172:G:LEU:CD1	1:183:G:ASN:CB	7	0.97
(1,2118)	2:301:H:IHP:P4	1:158:J:LYS:HA	9	0.96
(1,2207)	2:301:H:IHP:O35	3:302:H:A1CCZ:F32	9	0.95
(1,2118)	2:301:H:IHP:P4	1:158:J:LYS:HA	2	0.95
(2,14)	2:301:H:IHP:O33	3:302:H:A1CCZ:H12A	4	0.94
(2,14)	2:301:H:IHP:O33	3:302:H:A1CCZ:H12B	4	0.94
(1,2172)	2:301:H:IHP:P1	1:158:H:LYS:HA	6	0.93

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,75)	1:219:G:GLN:CG	1:195:L:ASN:CA	7	0.92
(1,2207)	2:301:H:IHP:O35	3:302:H:A1CCZ:F32	4	0.91
(1,2204)	2:301:H:IHP:O25	3:302:H:A1CCZ:F32	6	0.9
(1,2207)	2:301:H:IHP:O35	3:302:H:A1CCZ:F32	10	0.89
(1,2196)	2:301:H:IHP:O41	3:302:H:A1CCZ:F32	5	0.89
(1,2143)	2:301:H:IHP:P6	1:157:J:PRO:HD2	9	0.89
(1,2143)	2:301:H:IHP:P6	1:157:J:PRO:HD3	9	0.89
(1,2296)	3:302:H:A1CCZ:F32	1:196:H:PRO:CG	1	0.88
(1,2277)	3:302:H:A1CCZ:H9A	1:232:I:ALA:CA	1	0.88
(1,2277)	3:302:H:A1CCZ:H9B	1:232:I:ALA:CA	1	0.88
(1,2143)	2:301:H:IHP:P6	1:157:J:PRO:HD2	10	0.88
(1,2143)	2:301:H:IHP:P6	1:157:J:PRO:HD3	10	0.88
(1,2225)	3:302:H:A1CCZ:F33	1:159:H:GLU:CB	3	0.87
(1,2115)	2:301:H:IHP:P4	1:158:G:LYS:HA	4	0.87
(1,2207)	2:301:H:IHP:O35	3:302:H:A1CCZ:F32	2	0.86
(1,2207)	2:301:H:IHP:O35	3:302:H:A1CCZ:F32	5	0.86
(1,2143)	2:301:H:IHP:P6	1:157:J:PRO:HD2	2	0.86
(1,2143)	2:301:H:IHP:P6	1:157:J:PRO:HD3	2	0.86
(1,2207)	2:301:H:IHP:O35	3:302:H:A1CCZ:F32	3	0.84
(1,685)	1:187:J:GLU:CB	1:184:J:TRP:CE2	8	0.84
(1,1638)	1:155:J:GLN:CB	1:197:J:ASP:CB	8	0.83
(1,2262)	3:302:H:A1CCZ:H7A	1:232:H:ALA:CA	4	0.81
(1,2262)	3:302:H:A1CCZ:H7B	1:232:H:ALA:CA	4	0.81
(1,2143)	2:301:H:IHP:P6	1:157:J:PRO:HD2	1	0.81
(1,2143)	2:301:H:IHP:P6	1:157:J:PRO:HD3	1	0.81
(1,2174)	2:301:H:IHP:P2	1:158:L:LYS:HA	9	0.8
(1,412)	1:202:I:LEU:CG	1:194:I:ALA:CA	3	0.8
(1,2225)	3:302:H:A1CCZ:F33	1:159:H:GLU:CB	9	0.79
(1,636)	1:150:K:ILE:CD1	1:186:K:THR:CB	3	0.79
(2,14)	2:301:H:IHP:O33	3:302:H:A1CCZ:H12A	3	0.78
(2,14)	2:301:H:IHP:O33	3:302:H:A1CCZ:H12B	3	0.78
(1,2277)	3:302:H:A1CCZ:H9A	1:232:I:ALA:CA	10	0.78
(1,2277)	3:302:H:A1CCZ:H9B	1:232:I:ALA:CA	10	0.78
(1,2115)	2:301:H:IHP:P4	1:158:G:LYS:HA	1	0.78
(2,92)	2:301:H:IHP:O25	3:302:H:A1CCZ:H12A	8	0.77
(2,92)	2:301:H:IHP:O25	3:302:H:A1CCZ:H12B	8	0.77
(1,2296)	3:302:H:A1CCZ:F32	1:196:H:PRO:CG	7	0.77
(1,2258)	3:302:H:A1CCZ:H11	1:232:H:ALA:CA	6	0.77
(1,29)	1:219:L:GLN:CG	1:155:K:GLN:CA	1	0.77
(1,2262)	3:302:H:A1CCZ:H7A	1:232:H:ALA:CA	7	0.76
(1,2262)	3:302:H:A1CCZ:H7B	1:232:H:ALA:CA	7	0.76
(1,2174)	2:301:H:IHP:P2	1:158:L:LYS:HA	10	0.75

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1638)	1:155:J:GLN:CB	1:197:J:ASP:CB	1	0.75
(1,2207)	2:301:H:IHP:O35	3:302:H:A1CCZ:F32	7	0.74
(1,2143)	2:301:H:IHP:P6	1:157:J:PRO:HD2	3	0.74
(1,2143)	2:301:H:IHP:P6	1:157:J:PRO:HD3	3	0.74
(1,636)	1:150:J:ILE:CD1	1:186:J:THR:CB	1	0.74
(1,2262)	3:302:H:A1CCZ:H7A	1:232:H:ALA:CA	10	0.73
(1,2262)	3:302:H:A1CCZ:H7B	1:232:H:ALA:CA	10	0.73
(1,1318)	1:172:J:LEU:CD1	1:183:J:ASN:CB	3	0.73
(2,14)	2:301:H:IHP:O33	3:302:H:A1CCZ:H12A	1	0.72
(2,14)	2:301:H:IHP:O33	3:302:H:A1CCZ:H12B	1	0.72
(1,2262)	3:302:H:A1CCZ:H7A	1:232:H:ALA:CA	3	0.72
(1,2262)	3:302:H:A1CCZ:H7B	1:232:H:ALA:CA	3	0.72
(1,2174)	2:301:H:IHP:P2	1:158:L:LYS:HA	3	0.72
(1,1013)	1:189:H:LEU:CA	1:153:H:ILE:C	7	0.72
(1,2225)	3:302:H:A1CCZ:F33	1:159:H:GLU:CB	8	0.71
(1,2118)	2:301:H:IHP:P4	1:158:J:LYS:HA	1	0.71
(1,1638)	1:155:J:GLN:CB	1:197:J:ASP:CB	7	0.71
(1,2296)	3:302:H:A1CCZ:F32	1:196:H:PRO:CG	8	0.7
(1,2225)	3:302:H:A1CCZ:F33	1:159:H:GLU:CB	2	0.7
(1,2168)	2:301:H:IHP:P1	1:224:I:PRO:HD2	7	0.7
(1,2168)	2:301:H:IHP:P1	1:224:I:PRO:HD3	7	0.7
(1,2143)	2:301:H:IHP:P6	1:157:J:PRO:HD2	8	0.7
(1,2143)	2:301:H:IHP:P6	1:157:J:PRO:HD3	8	0.7
(1,2115)	2:301:H:IHP:P4	1:158:G:LYS:HA	2	0.7
(1,384)	1:185:L:MET:CG	1:151:L:LEU:CB	8	0.7
(1,2277)	3:302:H:A1CCZ:H9A	1:232:I:ALA:CA	3	0.69
(1,2277)	3:302:H:A1CCZ:H9B	1:232:I:ALA:CA	3	0.69
(1,2262)	3:302:H:A1CCZ:H7A	1:232:H:ALA:CA	2	0.69
(1,2262)	3:302:H:A1CCZ:H7B	1:232:H:ALA:CA	2	0.69
(1,2143)	2:301:H:IHP:P6	1:157:J:PRO:HD2	4	0.69
(1,2143)	2:301:H:IHP:P6	1:157:J:PRO:HD3	4	0.69
(1,29)	1:219:L:GLN:CG	1:155:K:GLN:CA	4	0.69
(1,1)	1:162:G:ARG:CG	1:154:L:ARG:CA	7	0.69
(2,14)	2:301:H:IHP:O33	3:302:H:A1CCZ:H12A	2	0.68
(2,14)	2:301:H:IHP:O33	3:302:H:A1CCZ:H12B	2	0.68
(1,2277)	3:302:H:A1CCZ:H9A	1:232:I:ALA:CA	8	0.68
(1,2277)	3:302:H:A1CCZ:H9B	1:232:I:ALA:CA	8	0.68
(1,2225)	3:302:H:A1CCZ:F33	1:159:H:GLU:CB	10	0.68
(1,2196)	2:301:H:IHP:O41	3:302:H:A1CCZ:F32	6	0.68
(1,2262)	3:302:H:A1CCZ:H7A	1:232:H:ALA:CA	1	0.67
(1,2262)	3:302:H:A1CCZ:H7B	1:232:H:ALA:CA	1	0.67
(1,1582)	1:153:G:ILE:CG1	1:172:G:LEU:CA	7	0.67

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1318)	1:172:K:LEU:CD1	1:183:K:ASN:CB	9	0.67
(1,2225)	3:302:H:A1CCZ:F33	1:159:H:GLU:CB	4	0.66
(1,2207)	2:301:H:IHP:O35	3:302:H:A1CCZ:F32	1	0.66
(1,1438)	1:172:K:LEU:CG	1:183:K:ASN:CA	9	0.66
(1,1339)	1:201:I:ILE:CG1	1:214:I:MET:CA	6	0.66
(1,412)	1:202:H:LEU:CG	1:194:H:ALA:CA	8	0.66
(1,2115)	2:301:H:IHP:P4	1:158:G:LYS:HA	10	0.65
(1,636)	1:150:K:ILE:CD1	1:186:K:THR:CB	9	0.65
(1,278)	1:155:G:GLN:CB	1:196:G:PRO:CA	3	0.65
(1,2293)	3:302:H:A1CCZ:F33	1:160:H:PRO:CA	3	0.64
(1,2163)	2:301:H:IHP:P1	1:224:J:PRO:HG2	6	0.64
(1,2163)	2:301:H:IHP:P1	1:224:J:PRO:HG3	6	0.64
(1,685)	1:187:J:GLU:CB	1:184:J:TRP:CE2	4	0.64
(1,278)	1:155:G:GLN:CB	1:196:G:PRO:CA	6	0.64
(1,278)	1:155:J:GLN:CB	1:196:J:PRO:CA	10	0.64
(1,2293)	3:302:H:A1CCZ:F33	1:160:H:PRO:CA	7	0.63
(1,2174)	2:301:H:IHP:P2	1:158:L:LYS:HA	5	0.63
(1,1013)	1:189:H:LEU:CA	1:153:H:ILE:C	8	0.63
(1,278)	1:155:G:GLN:CB	1:196:G:PRO:CA	8	0.63
(1,169)	1:165:K:VAL:CG2	1:202:K:LEU:CG	6	0.63
(1,2207)	2:301:H:IHP:O35	3:302:H:A1CCZ:F32	8	0.62
(1,2153)	2:301:H:IHP:P3	1:157:H:PRO:HD2	8	0.62
(1,2153)	2:301:H:IHP:P3	1:157:H:PRO:HD3	8	0.62
(1,1638)	1:155:J:GLN:CB	1:197:J:ASP:CB	3	0.62
(1,1582)	1:153:G:ILE:CG1	1:172:G:LEU:CA	4	0.62
(1,1582)	1:153:H:ILE:CG1	1:172:H:LEU:CA	5	0.62
(1,29)	1:219:L:GLN:CG	1:155:K:GLN:CA	6	0.62
(1,2262)	3:302:H:A1CCZ:H7A	1:232:H:ALA:CA	9	0.61
(1,2262)	3:302:H:A1CCZ:H7B	1:232:H:ALA:CA	9	0.61
(1,2225)	3:302:H:A1CCZ:F33	1:159:H:GLU:CB	1	0.61
(1,1096)	1:171:H:THR:CG2	1:152:H:ASP:CB	6	0.61
(1,412)	1:202:K:LEU:CG	1:194:K:ALA:CA	2	0.61
(1,29)	1:219:L:GLN:CG	1:155:K:GLN:CA	3	0.61
(2,16)	2:301:H:IHP:O43	3:302:H:A1CCZ:H12A	4	0.6
(2,16)	2:301:H:IHP:O43	3:302:H:A1CCZ:H12B	4	0.6
(1,2258)	3:302:H:A1CCZ:H11	1:232:H:ALA:CA	7	0.6
(1,2118)	2:301:H:IHP:P4	1:158:J:LYS:HA	3	0.6
(1,2118)	2:301:H:IHP:P4	1:158:J:LYS:HA	8	0.6
(1,278)	1:155:G:GLN:CB	1:196:G:PRO:CA	4	0.6
(2,8)	2:301:H:IHP:O23	3:302:H:A1CCZ:H9A	4	0.59
(2,8)	2:301:H:IHP:O23	3:302:H:A1CCZ:H9B	4	0.59
(1,1582)	1:153:K:ILE:CG1	1:172:K:LEU:CA	3	0.59

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,987)	1:235:G:MET:CB	1:230:G:VAL:CA	6	0.59
(1,833)	1:221:I:VAL:CG2	1:230:I:VAL:CG2	5	0.59
(1,833)	1:221:I:VAL:CG2	1:230:I:VAL:CG2	7	0.59
(1,685)	1:187:J:GLU:CB	1:184:J:TRP:CE2	1	0.59
(1,278)	1:155:G:GLN:CB	1:196:G:PRO:CA	7	0.59
(1,75)	1:219:G:GLN:CG	1:195:L:ASN:CA	2	0.59
(1,1582)	1:153:I:ILE:CG1	1:172:I:LEU:CA	1	0.58
(1,1377)	1:205:I:LEU:CD1	1:210:I:THR:CA	4	0.58
(1,412)	1:202:H:LEU:CG	1:194:H:ALA:CA	10	0.58
(1,1582)	1:153:K:ILE:CG1	1:172:K:LEU:CA	2	0.57
(1,1438)	1:172:K:LEU:CG	1:183:K:ASN:CA	6	0.56
(1,1339)	1:201:I:ILE:CG1	1:214:I:MET:CA	7	0.56
(1,636)	1:150:K:ILE:CD1	1:186:K:THR:CB	7	0.56
(1,278)	1:155:H:GLN:CB	1:196:H:PRO:CA	1	0.56
(1,75)	1:219:G:GLN:CG	1:195:L:ASN:CA	8	0.56
(1,73)	1:231:I:LEU:N	1:228:J:ALA:CB	5	0.56
(1,29)	1:219:L:GLN:CG	1:155:K:GLN:CA	9	0.56
(1,2225)	3:302:H:A1CCZ:F33	1:159:H:GLU:CB	7	0.55
(1,1013)	1:189:K:LEU:CA	1:153:K:ILE:C	5	0.55
(1,636)	1:150:K:ILE:CD1	1:186:K:THR:CB	4	0.55
(2,12)	2:301:H:IHP:O23	3:302:H:A1CCZ:H12A	4	0.54
(2,12)	2:301:H:IHP:O23	3:302:H:A1CCZ:H12B	4	0.54
(1,2221)	3:302:H:A1CCZ:F33	1:224:H:PRO:CG	3	0.54
(1,2115)	2:301:H:IHP:P4	1:158:G:LYS:HA	8	0.54
(1,1438)	1:172:J:LEU:CG	1:183:J:ASN:CA	3	0.54
(1,1377)	1:205:L:LEU:CD1	1:210:L:THR:CA	7	0.54
(1,1339)	1:201:I:ILE:CG1	1:214:I:MET:CA	8	0.54
(1,1339)	1:201:L:ILE:CG1	1:214:L:MET:CA	9	0.54
(1,1318)	1:172:K:LEU:CD1	1:183:K:ASN:CB	6	0.54
(1,1318)	1:172:J:LEU:CD1	1:183:J:ASN:CB	8	0.54
(1,1150)	1:192:I:GLN:CA	1:164:I:TYR:CZ	7	0.54
(1,987)	1:235:J:MET:CB	1:230:J:VAL:CA	7	0.54
(1,365)	1:196:K:PRO:CD	1:200:K:THR:CB	6	0.54
(1,278)	1:155:H:GLN:CB	1:196:H:PRO:CA	9	0.54
(1,2293)	3:302:H:A1CCZ:F33	1:160:H:PRO:CA	9	0.53
(1,2250)	3:302:H:A1CCZ:F32	1:198:H:CYS:CA	8	0.53
(1,2174)	2:301:H:IHP:P2	1:158:L:LYS:HA	4	0.53
(1,2118)	2:301:H:IHP:P4	1:158:J:LYS:HA	4	0.53
(1,1638)	1:155:J:GLN:CB	1:197:J:ASP:CB	2	0.53
(1,1582)	1:153:G:ILE:CG1	1:172:G:LEU:CA	10	0.53
(1,987)	1:235:H:MET:CB	1:230:H:VAL:CA	8	0.53
(1,2141)	2:301:H:IHP:P6	1:158:I:LYS:HA	6	0.52

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1481)	1:194:J:ALA:CB	1:202:J:LEU:CB	4	0.52
(1,1438)	1:172:K:LEU:CG	1:183:K:ASN:CA	2	0.52
(1,1318)	1:172:K:LEU:CD1	1:183:K:ASN:CB	2	0.52
(1,1150)	1:192:H:GLN:CA	1:164:H:TYR:CZ	4	0.52
(1,1150)	1:192:H:GLN:CA	1:164:H:TYR:CZ	5	0.52
(1,412)	1:202:L:LEU:CG	1:194:L:ALA:CA	7	0.52
(1,412)	1:202:L:LEU:CG	1:194:L:ALA:CA	9	0.52
(1,387)	1:194:J:ALA:CB	1:154:J:ARG:CG	5	0.52
(1,29)	1:219:L:GLN:CG	1:155:K:GLN:CA	2	0.52
(1,1648)	1:160:K:PRO:CG	1:161:K:PHE:CG	9	0.51
(1,1318)	1:172:K:LEU:CD1	1:183:K:ASN:CB	10	0.51
(1,658)	1:235:H:MET:CB	1:233:H:GLU:CG	10	0.51
(1,3)	1:162:K:ARG:CG	1:154:J:ARG:CA	8	0.51
(1,1638)	1:155:J:GLN:CB	1:197:J:ASP:CB	4	0.5
(1,1339)	1:201:I:ILE:CG1	1:214:I:MET:CA	4	0.5
(1,29)	1:219:L:GLN:CG	1:155:K:GLN:CA	5	0.5
(1,5)	1:162:I:ARG:CG	1:154:H:ARG:CA	9	0.5
(1,2115)	2:301:H:IHP:P4	1:158:G:LYS:HA	7	0.49
(1,1648)	1:160:G:PRO:CG	1:161:G:PHE:CG	6	0.49
(1,1582)	1:153:L:ILE:CG1	1:172:L:LEU:CA	6	0.49
(1,1438)	1:172:K:LEU:CG	1:183:K:ASN:CA	10	0.49
(1,1339)	1:201:I:ILE:CG1	1:214:I:MET:CA	10	0.49
(1,987)	1:235:K:MET:CB	1:230:K:VAL:CA	5	0.49
(1,685)	1:187:J:GLU:CB	1:184:J:TRP:CE2	2	0.49
(1,685)	1:187:J:GLU:CB	1:184:J:TRP:CE2	6	0.49
(1,685)	1:187:J:GLU:CB	1:184:J:TRP:CE2	7	0.49
(1,1)	1:162:G:ARG:CG	1:154:L:ARG:CA	1	0.49
(1,2258)	3:302:H:A1CCZ:H11	1:232:H:ALA:CA	5	0.48
(1,1438)	1:172:J:LEU:CG	1:183:J:ASN:CA	8	0.48
(1,1150)	1:192:H:GLN:CA	1:164:H:TYR:CZ	8	0.48
(1,987)	1:235:K:MET:CB	1:230:K:VAL:CA	2	0.48
(1,540)	1:230:J:VAL:CG1	1:221:J:VAL:CA	2	0.48
(1,540)	1:230:J:VAL:CG2	1:221:J:VAL:CA	4	0.48
(1,365)	1:196:K:PRO:CD	1:200:K:THR:CB	4	0.48
(1,169)	1:165:K:VAL:CG2	1:202:K:LEU:CG	5	0.48
(1,78)	1:219:J:GLN:CG	1:195:I:ASN:CA	4	0.48
(2,92)	2:301:H:IHP:O25	3:302:H:A1CCZ:H12A	6	0.47
(2,92)	2:301:H:IHP:O25	3:302:H:A1CCZ:H12B	6	0.47
(2,92)	2:301:H:IHP:O25	3:302:H:A1CCZ:H12A	9	0.47
(2,92)	2:301:H:IHP:O25	3:302:H:A1CCZ:H12B	9	0.47
(1,2277)	3:302:H:A1CCZ:H9A	1:232:I:ALA:CA	7	0.47
(1,2277)	3:302:H:A1CCZ:H9B	1:232:I:ALA:CA	7	0.47

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2221)	3:302:H:A1CCZ:F33	1:224:H:PRO:CG	2	0.47
(1,2210)	2:301:H:IHP:O45	3:302:H:A1CCZ:F32	4	0.47
(1,2143)	2:301:H:IHP:P6	1:157:J:PRO:HD2	7	0.47
(1,2143)	2:301:H:IHP:P6	1:157:J:PRO:HD3	7	0.47
(1,1638)	1:155:I:GLN:CB	1:197:I:ASP:CB	5	0.47
(1,987)	1:235:K:MET:CB	1:230:K:VAL:CA	1	0.47
(1,658)	1:235:H:MET:CB	1:233:H:GLU:CG	6	0.47
(1,420)	1:202:L:LEU:CD1	1:199:L:LYS:CD	1	0.47
(1,5)	1:162:I:ARG:CG	1:154:H:ARG:CA	5	0.47
(1,4)	1:162:J:ARG:CG	1:154:I:ARG:CA	7	0.47
(1,1648)	1:160:L:PRO:CG	1:161:L:PHE:CG	3	0.46
(1,1150)	1:192:H:GLN:CA	1:164:H:TYR:CZ	1	0.46
(1,658)	1:235:H:MET:CB	1:233:H:GLU:CG	3	0.46
(1,420)	1:202:L:LEU:CD1	1:199:L:LYS:CD	3	0.46
(1,5)	1:162:I:ARG:CG	1:154:H:ARG:CA	2	0.46
(1,2262)	3:302:H:A1CCZ:H7A	1:232:H:ALA:CA	8	0.45
(1,2262)	3:302:H:A1CCZ:H7B	1:232:H:ALA:CA	8	0.45
(1,2159)	2:301:H:IHP:P3	1:159:H:GLU:H	8	0.45
(1,1648)	1:160:L:PRO:CG	1:161:L:PHE:CG	4	0.45
(1,1582)	1:153:H:ILE:CG1	1:172:H:LEU:CA	8	0.45
(1,1438)	1:172:L:LEU:CG	1:183:L:ASN:CA	7	0.45
(1,658)	1:235:G:MET:CB	1:233:G:GLU:CG	4	0.45
(1,540)	1:230:H:VAL:CG2	1:221:H:VAL:CA	7	0.45
(1,365)	1:196:H:PRO:CD	1:200:H:THR:CB	2	0.45
(1,278)	1:155:H:GLN:CB	1:196:H:PRO:CA	5	0.45
(1,169)	1:165:K:VAL:CG2	1:202:K:LEU:CG	3	0.45
(1,169)	1:165:K:VAL:CG2	1:202:K:LEU:CG	9	0.45
(1,169)	1:165:K:VAL:CG2	1:202:K:LEU:CG	10	0.45
(1,75)	1:219:G:GLN:CG	1:195:L:ASN:CA	10	0.45
(1,29)	1:219:L:GLN:CG	1:155:K:GLN:CA	10	0.45
(2,12)	2:301:H:IHP:O23	3:302:H:A1CCZ:H12A	1	0.44
(2,12)	2:301:H:IHP:O23	3:302:H:A1CCZ:H12B	1	0.44
(1,2258)	3:302:H:A1CCZ:H11	1:232:H:ALA:CA	4	0.44
(1,2250)	3:302:H:A1CCZ:F32	1:198:H:CYS:CA	7	0.44
(1,2115)	2:301:H:IHP:P4	1:158:G:LYS:HA	6	0.44
(1,1648)	1:160:K:PRO:CG	1:161:K:PHE:CG	8	0.44
(1,1339)	1:201:I:ILE:CG1	1:214:I:MET:CA	1	0.44
(1,540)	1:230:K:VAL:CG2	1:221:K:VAL:CA	1	0.44
(1,540)	1:230:I:VAL:CG2	1:221:I:VAL:CA	6	0.44
(1,384)	1:185:L:MET:CG	1:151:L:LEU:CB	9	0.44
(1,365)	1:196:K:PRO:CD	1:200:K:THR:CB	10	0.44
(1,169)	1:165:K:VAL:CG2	1:202:K:LEU:CG	2	0.44

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,169)	1:165:K:VAL:CG2	1:202:K:LEU:CG	4	0.44
(1,75)	1:219:G:GLN:CG	1:195:L:ASN:CA	5	0.44
(1,74)	1:231:J:LEU:N	1:228:K:ALA:CB	3	0.44
(1,5)	1:162:I:ARG:CG	1:154:H:ARG:CA	7	0.44
(1,1)	1:162:G:ARG:CG	1:154:L:ARG:CA	3	0.44
(1,2292)	3:302:H:A1CCZ:F32	1:160:H:PRO:CA	7	0.43
(1,2204)	2:301:H:IHP:O25	3:302:H:A1CCZ:F32	7	0.43
(1,2135)	2:301:H:IHP:P4	1:227:H:LYS:HZ1	6	0.43
(1,2135)	2:301:H:IHP:P4	1:227:H:LYS:HZ2	6	0.43
(1,2135)	2:301:H:IHP:P4	1:227:H:LYS:HZ3	6	0.43
(1,1648)	1:160:K:PRO:CG	1:161:K:PHE:CG	2	0.43
(1,1638)	1:155:I:GLN:CB	1:197:I:ASP:CB	10	0.43
(1,1339)	1:201:I:ILE:CG1	1:214:I:MET:CA	2	0.43
(1,1339)	1:201:I:ILE:CG1	1:214:I:MET:CA	3	0.43
(1,987)	1:235:K:MET:CB	1:230:K:VAL:CA	10	0.43
(1,636)	1:150:K:ILE:CD1	1:186:K:THR:CB	6	0.43
(1,414)	1:201:H:ILE:CG2	1:197:H:ASP:CB	5	0.43
(1,387)	1:194:L:ALA:CB	1:154:L:ARG:CG	3	0.43
(1,29)	1:219:L:GLN:CG	1:155:K:GLN:CA	8	0.43
(2,92)	2:301:H:IHP:O25	3:302:H:A1CCZ:H12A	7	0.42
(2,92)	2:301:H:IHP:O25	3:302:H:A1CCZ:H12B	7	0.42
(2,14)	2:301:H:IHP:O33	3:302:H:A1CCZ:H12A	8	0.42
(2,14)	2:301:H:IHP:O33	3:302:H:A1CCZ:H12B	8	0.42
(1,2135)	2:301:H:IHP:P4	1:227:H:LYS:HZ1	7	0.42
(1,2135)	2:301:H:IHP:P4	1:227:H:LYS:HZ2	7	0.42
(1,2135)	2:301:H:IHP:P4	1:227:H:LYS:HZ3	7	0.42
(1,2123)	2:301:H:IHP:P4	1:158:K:LYS:HE2	5	0.42
(1,2123)	2:301:H:IHP:P4	1:158:K:LYS:HE3	5	0.42
(1,1638)	1:155:I:GLN:CB	1:197:I:ASP:CB	6	0.42
(1,1488)	1:152:J:ASP:CB	1:149:J:SER:CB	2	0.42
(1,1150)	1:192:H:GLN:CA	1:164:H:TYR:CZ	2	0.42
(1,968)	1:221:K:VAL:CG2	1:219:K:GLN:CG	8	0.42
(1,685)	1:187:J:GLU:CB	1:184:J:TRP:CE2	10	0.42
(1,658)	1:235:I:MET:CB	1:233:I:GLU:CG	9	0.42
(1,636)	1:150:K:ILE:CD1	1:186:K:THR:CB	2	0.42
(1,412)	1:202:L:LEU:CG	1:194:L:ALA:CA	6	0.42
(1,227)	1:198:G:CYS:CB	1:199:G:LYS:CE	8	0.42
(1,204)	1:150:K:ILE:CD1	1:189:K:LEU:CA	7	0.42
(1,74)	1:231:J:LEU:N	1:228:K:ALA:CB	4	0.42
(1,11)	1:195:L:ASN:CA	1:219:G:GLN:CA	7	0.42
(2,14)	2:301:H:IHP:O33	3:302:H:A1CCZ:H12A	5	0.41
(2,14)	2:301:H:IHP:O33	3:302:H:A1CCZ:H12B	5	0.41

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2308)	3:302:H:A1CCZ:F31	1:228:H:ALA:CA	3	0.41
(1,2221)	3:302:H:A1CCZ:F33	1:224:H:PRO:CG	9	0.41
(1,2197)	2:301:H:IHP:O41	3:302:H:A1CCZ:F33	5	0.41
(1,1648)	1:160:H:PRO:CG	1:161:H:PHE:CG	1	0.41
(1,1150)	1:192:H:GLN:CA	1:164:H:TYR:CZ	6	0.41
(1,968)	1:221:K:VAL:CG2	1:219:K:GLN:CG	4	0.41
(1,636)	1:150:K:ILE:CD1	1:186:K:THR:CB	5	0.41
(1,78)	1:219:J:GLN:CG	1:195:I:ASN:CA	7	0.41
(1,74)	1:231:J:LEU:N	1:228:K:ALA:CB	10	0.41
(1,1)	1:162:G:ARG:CG	1:154:L:ARG:CA	5	0.41
(1,2293)	3:302:H:A1CCZ:F33	1:160:H:PRO:CA	4	0.4
(1,2258)	3:302:H:A1CCZ:H11	1:232:H:ALA:CA	2	0.4
(1,2132)	2:301:H:IHP:P4	1:158:K:LYS:HZ1	8	0.4
(1,2132)	2:301:H:IHP:P4	1:158:K:LYS:HZ2	8	0.4
(1,2132)	2:301:H:IHP:P4	1:158:K:LYS:HZ3	8	0.4
(1,1648)	1:160:H:PRO:CG	1:161:H:PHE:CG	7	0.4
(1,1582)	1:153:H:ILE:CG1	1:172:H:LEU:CA	9	0.4
(1,1481)	1:194:H:ALA:CB	1:202:H:LEU:CB	8	0.4
(1,658)	1:235:G:MET:CB	1:233:G:GLU:CG	8	0.4
(1,384)	1:185:J:MET:CG	1:151:J:LEU:CB	3	0.4
(1,169)	1:165:K:VAL:CG2	1:202:K:LEU:CG	8	0.4
(1,74)	1:231:J:LEU:N	1:228:K:ALA:CB	1	0.4
(1,74)	1:231:J:LEU:N	1:228:K:ALA:CB	2	0.4
(1,1)	1:162:G:ARG:CG	1:154:L:ARG:CA	4	0.4
(2,14)	2:301:H:IHP:O33	3:302:H:A1CCZ:H12A	10	0.39
(2,14)	2:301:H:IHP:O33	3:302:H:A1CCZ:H12B	10	0.39
(1,2293)	3:302:H:A1CCZ:F33	1:160:H:PRO:CA	8	0.39
(1,2197)	2:301:H:IHP:O41	3:302:H:A1CCZ:F33	1	0.39
(1,2191)	2:301:H:IHP:O21	3:302:H:A1CCZ:F33	2	0.39
(1,1481)	1:194:I:ALA:CB	1:202:I:LEU:CB	3	0.39
(1,1469)	1:214:J:MET:CB	1:205:J:LEU:CA	1	0.39
(1,1318)	1:172:J:LEU:CD1	1:183:J:ASN:CB	4	0.39
(1,1150)	1:192:H:GLN:CA	1:164:H:TYR:CZ	10	0.39
(1,987)	1:235:K:MET:CB	1:230:K:VAL:CA	3	0.39
(1,685)	1:187:J:GLU:CB	1:184:J:TRP:CE2	3	0.39
(1,658)	1:235:G:MET:CB	1:233:G:GLU:CG	2	0.39
(1,414)	1:201:J:ILE:CG2	1:197:J:ASP:CB	9	0.39
(1,414)	1:201:J:ILE:CG2	1:197:J:ASP:CB	10	0.39
(1,384)	1:185:L:MET:CG	1:151:L:LEU:CB	2	0.39
(1,75)	1:219:G:GLN:CG	1:195:L:ASN:CA	4	0.39
(1,2308)	3:302:H:A1CCZ:F31	1:228:H:ALA:CA	2	0.38
(1,2293)	3:302:H:A1CCZ:F33	1:160:H:PRO:CA	2	0.38

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1648)	1:160:L:PRO:CG	1:161:L:PHE:CG	5	0.38
(1,1481)	1:194:L:ALA:CB	1:202:L:LEU:CB	6	0.38
(1,1233)	1:190:H:LEU:CD1	1:166:H:ASP:CA	4	0.38
(1,658)	1:235:G:MET:CB	1:233:G:GLU:CG	1	0.38
(1,384)	1:185:J:MET:CG	1:151:J:LEU:CB	1	0.38
(1,384)	1:185:L:MET:CG	1:151:L:LEU:CB	10	0.38
(1,365)	1:196:K:PRO:CD	1:200:K:THR:CB	3	0.38
(1,267)	1:188:K:THR:CG2	1:185:K:MET:CB	6	0.38
(1,227)	1:198:G:CYS:CB	1:199:G:LYS:CE	10	0.38
(1,1)	1:162:G:ARG:CG	1:154:L:ARG:CA	8	0.38
(1,2277)	3:302:H:A1CCZ:H9A	1:232:I:ALA:CA	6	0.37
(1,2277)	3:302:H:A1CCZ:H9B	1:232:I:ALA:CA	6	0.37
(1,2196)	2:301:H:IHP:O41	3:302:H:A1CCZ:F32	1	0.37
(1,2157)	2:301:H:IHP:P3	1:158:L:LYS:HA	1	0.37
(1,1318)	1:172:J:LEU:CD1	1:183:J:ASN:CB	5	0.37
(1,987)	1:235:K:MET:CB	1:230:K:VAL:CA	4	0.37
(1,689)	1:201:K:ILE:CD1	1:202:K:LEU:C	5	0.37
(1,412)	1:202:L:LEU:CG	1:194:L:ALA:CA	1	0.37
(1,78)	1:219:J:GLN:CG	1:195:I:ASN:CA	6	0.37
(1,77)	1:219:K:GLN:CG	1:195:J:ASN:CA	8	0.37
(1,4)	1:162:J:ARG:CG	1:154:I:ARG:CA	9	0.37
(1,2197)	2:301:H:IHP:O41	3:302:H:A1CCZ:F33	6	0.36
(1,2123)	2:301:H:IHP:P4	1:158:K:LYS:HE2	2	0.36
(1,2123)	2:301:H:IHP:P4	1:158:K:LYS:HE3	2	0.36
(1,2122)	2:301:H:IHP:P4	1:158:J:LYS:HE2	5	0.36
(1,2122)	2:301:H:IHP:P4	1:158:J:LYS:HE3	5	0.36
(1,2115)	2:301:H:IHP:P4	1:158:G:LYS:HA	5	0.36
(1,1377)	1:205:I:LEU:CD1	1:210:I:THR:CA	8	0.36
(1,1150)	1:192:H:GLN:CA	1:164:H:TYR:CZ	3	0.36
(1,1013)	1:189:K:LEU:CA	1:153:K:ILE:C	6	0.36
(1,968)	1:221:I:VAL:CG2	1:219:I:GLN:CG	2	0.36
(1,968)	1:221:G:VAL:CG2	1:219:G:GLN:CG	7	0.36
(1,248)	1:156:L:GLY:CA	1:196:L:PRO:CD	9	0.36
(1,227)	1:198:H:CYS:CB	1:199:H:LYS:CE	1	0.36
(1,75)	1:219:G:GLN:CG	1:195:L:ASN:CA	6	0.36
(2,8)	2:301:H:IHP:O23	3:302:H:A1CCZ:H9A	3	0.35
(2,8)	2:301:H:IHP:O23	3:302:H:A1CCZ:H9B	3	0.35
(1,1150)	1:192:H:GLN:CA	1:164:H:TYR:CZ	9	0.35
(1,1100)	1:190:G:LEU:CD1	1:169:G:TYR:CB	5	0.35
(1,987)	1:235:K:MET:CB	1:230:K:VAL:CA	9	0.35
(1,689)	1:201:K:ILE:CD1	1:202:K:LEU:C	10	0.35
(1,658)	1:235:G:MET:CB	1:233:G:GLU:CG	5	0.35

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,561)	1:201:L:ILE:CG1	1:205:L:LEU:CA	5	0.35
(1,414)	1:201:J:ILE:CG2	1:197:J:ASP:CB	4	0.35
(1,389)	1:210:J:THR:CG2	1:211:J:LEU:CG	6	0.35
(1,267)	1:188:K:THR:CG2	1:185:K:MET:CB	5	0.35
(1,267)	1:188:K:THR:CG2	1:185:K:MET:CB	9	0.35
(1,218)	1:179:K:GLN:CB	1:177:K:ALA:CA	7	0.35
(1,218)	1:179:G:GLN:CB	1:177:G:ALA:CA	9	0.35
(1,218)	1:179:G:GLN:CB	1:177:G:ALA:CA	10	0.35
(1,78)	1:219:J:GLN:CG	1:195:I:ASN:CA	2	0.35
(1,33)	1:223:J:GLY:CA	1:157:I:PRO:CD	4	0.35
(1,11)	1:195:L:ASN:CA	1:219:G:GLN:CA	8	0.35
(1,8)	1:195:I:ASN:CA	1:219:J:GLN:CA	6	0.35
(1,5)	1:162:I:ARG:CG	1:154:H:ARG:CA	8	0.35
(2,16)	2:301:H:IHP:O43	3:302:H:A1CCZ:H12A	3	0.34
(2,16)	2:301:H:IHP:O43	3:302:H:A1CCZ:H12B	3	0.34
(1,2308)	3:302:H:A1CCZ:F31	1:228:H:ALA:CA	9	0.34
(1,2233)	3:302:H:A1CCZ:F32	1:195:H:ASN:CA	10	0.34
(1,2190)	2:301:H:IHP:O21	3:302:H:A1CCZ:F32	2	0.34
(1,2124)	2:301:H:IHP:P4	1:158:L:LYS:HE2	1	0.34
(1,2124)	2:301:H:IHP:P4	1:158:L:LYS:HE3	1	0.34
(1,1497)	1:165:K:VAL:CG2	1:214:K:MET:CA	8	0.34
(1,1377)	1:205:I:LEU:CD1	1:210:I:THR:CA	5	0.34
(1,945)	1:150:G:ILE:CD1	1:193:G:ASN:CG	9	0.34
(1,808)	1:191:L:VAL:CG1	1:193:L:ASN:CA	4	0.34
(1,636)	1:150:I:ILE:CD1	1:186:I:THR:CB	8	0.34
(1,636)	1:150:K:ILE:CD1	1:186:K:THR:CB	10	0.34
(1,218)	1:179:G:GLN:CB	1:177:G:ALA:CA	1	0.34
(1,77)	1:219:K:GLN:CG	1:195:J:ASN:CA	4	0.34
(1,77)	1:219:K:GLN:CG	1:195:J:ASN:CA	7	0.34
(1,75)	1:219:G:GLN:CG	1:195:L:ASN:CA	1	0.34
(1,2293)	3:302:H:A1CCZ:F33	1:160:H:PRO:CA	1	0.33
(1,2169)	2:301:H:IHP:P1	1:224:J:PRO:HD2	6	0.33
(1,2169)	2:301:H:IHP:P1	1:224:J:PRO:HD3	6	0.33
(1,2141)	2:301:H:IHP:P6	1:158:I:LYS:HA	1	0.33
(1,1648)	1:160:L:PRO:CG	1:161:L:PHE:CG	10	0.33
(1,1533)	1:190:H:LEU:CG	1:187:H:GLU:CB	8	0.33
(1,1438)	1:172:K:LEU:CG	1:183:K:ASN:CA	1	0.33
(1,1381)	1:217:K:ALA:CB	1:221:K:VAL:CG2	10	0.33
(1,1233)	1:190:H:LEU:CD1	1:166:H:ASP:CA	5	0.33
(1,968)	1:221:K:VAL:CG2	1:219:K:GLN:CG	9	0.33
(1,689)	1:201:J:ILE:CD1	1:202:J:LEU:C	1	0.33
(1,673)	1:165:G:VAL:CG2	1:163:G:ASP:CB	2	0.33

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,561)	1:201:H:ILE:CG1	1:205:H:LEU:CA	4	0.33
(1,561)	1:201:L:ILE:CG1	1:205:L:LEU:CA	9	0.33
(1,384)	1:185:L:MET:CG	1:151:L:LEU:CB	7	0.33
(1,2319)	3:302:H:A1CCZ:F32	1:231:H:LEU:CB	6	0.32
(1,2296)	3:302:H:A1CCZ:F32	1:196:H:PRO:CG	4	0.32
(1,2258)	3:302:H:A1CCZ:H11	1:232:H:ALA:CA	1	0.32
(1,2174)	2:301:H:IHP:P2	1:158:L:LYS:HA	2	0.32
(1,1638)	1:155:I:GLN:CB	1:197:I:ASP:CB	9	0.32
(1,1533)	1:190:I:LEU:CG	1:187:I:GLU:CB	7	0.32
(1,1377)	1:205:K:LEU:CD1	1:210:K:THR:CA	10	0.32
(1,1220)	1:214:I:MET:CG	1:191:I:VAL:CB	7	0.32
(1,689)	1:201:J:ILE:CD1	1:202:J:LEU:C	4	0.32
(1,658)	1:235:I:MET:CB	1:233:I:GLU:CG	7	0.32
(1,227)	1:198:H:CYS:CB	1:199:H:LYS:CE	5	0.32
(1,48)	1:221:K:VAL:CG1	1:224:L:PRO:CD	1	0.32
(1,48)	1:221:K:VAL:CG2	1:224:L:PRO:CD	1	0.32
(1,25)	1:232:L:ALA:CB	1:238:K:VAL:CB	8	0.32
(1,8)	1:195:I:ASN:CA	1:219:J:GLN:CA	2	0.32
(1,2210)	2:301:H:IHP:O45	3:302:H:A1CCZ:F32	3	0.31
(1,2196)	2:301:H:IHP:O41	3:302:H:A1CCZ:F32	2	0.31
(1,1497)	1:165:H:VAL:CG2	1:214:H:MET:CA	7	0.31
(1,1481)	1:194:L:ALA:CB	1:202:L:LEU:CB	9	0.31
(1,1339)	1:201:I:ILE:CG1	1:214:I:MET:CA	5	0.31
(1,1233)	1:190:H:LEU:CD1	1:166:H:ASP:CA	1	0.31
(1,968)	1:221:I:VAL:CG2	1:219:I:GLN:CG	5	0.31
(1,689)	1:201:I:ILE:CD1	1:202:I:LEU:C	3	0.31
(1,689)	1:201:K:ILE:CD1	1:202:K:LEU:C	8	0.31
(1,420)	1:202:L:LEU:CD1	1:199:L:LYS:CD	7	0.31
(1,387)	1:194:J:ALA:CB	1:154:J:ARG:CG	1	0.31
(1,218)	1:179:G:GLN:CB	1:177:G:ALA:CA	4	0.31
(1,78)	1:219:J:GLN:CG	1:195:I:ASN:CA	3	0.31
(1,76)	1:219:L:GLN:CG	1:195:K:ASN:CA	1	0.31
(1,75)	1:219:G:GLN:CG	1:195:L:ASN:CA	9	0.31
(1,25)	1:232:L:ALA:CB	1:238:K:VAL:CB	5	0.31
(1,4)	1:162:J:ARG:CG	1:154:I:ARG:CA	1	0.31
(1,2284)	3:302:H:A1CCZ:F32	1:157:H:PRO:CG	1	0.3
(1,2284)	3:302:H:A1CCZ:F32	1:157:H:PRO:CG	8	0.3
(1,2204)	2:301:H:IHP:O25	3:302:H:A1CCZ:F32	8	0.3
(1,2191)	2:301:H:IHP:O21	3:302:H:A1CCZ:F33	1	0.3
(1,2123)	2:301:H:IHP:P4	1:158:K:LYS:HE2	3	0.3
(1,2123)	2:301:H:IHP:P4	1:158:K:LYS:HE3	3	0.3
(1,1100)	1:190:H:LEU:CD1	1:169:H:TYR:CB	6	0.3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,673)	1:165:H:VAL:CG2	1:163:H:ASP:CB	6	0.3
(1,561)	1:201:H:ILE:CG1	1:205:H:LEU:CA	3	0.3
(1,540)	1:230:H:VAL:CG1	1:221:H:VAL:CA	3	0.3
(1,218)	1:179:G:GLN:CB	1:177:G:ALA:CA	6	0.3
(1,25)	1:232:L:ALA:CB	1:238:K:VAL:CB	10	0.3
(2,12)	2:301:H:IHP:O23	3:302:H:A1CCZ:H12A	3	0.29
(2,12)	2:301:H:IHP:O23	3:302:H:A1CCZ:H12B	3	0.29
(1,2250)	3:302:H:A1CCZ:F32	1:198:H:CYS:CA	1	0.29
(1,1220)	1:214:K:MET:CG	1:191:K:VAL:CB	8	0.29
(1,945)	1:150:J:ILE:CD1	1:193:J:ASN:CG	10	0.29
(1,689)	1:201:J:ILE:CD1	1:202:J:LEU:C	6	0.29
(1,673)	1:165:J:VAL:CG2	1:163:J:ASP:CB	10	0.29
(1,561)	1:201:H:ILE:CG1	1:205:H:LEU:CA	1	0.29
(1,423)	1:190:G:LEU:CG	1:193:G:ASN:C	6	0.29
(1,387)	1:194:L:ALA:CB	1:154:L:ARG:CG	2	0.29
(1,227)	1:198:J:CYS:CB	1:199:J:LYS:CE	9	0.29
(1,218)	1:179:G:GLN:CB	1:177:G:ALA:CA	5	0.29
(1,2258)	3:302:H:A1CCZ:H11	1:232:H:ALA:CA	3	0.28
(1,2251)	3:302:H:A1CCZ:F33	1:198:H:CYS:CA	6	0.28
(1,2174)	2:301:H:IHP:P2	1:158:L:LYS:HA	1	0.28
(1,1385)	1:151:J:LEU:CG	1:189:J:LEU:CB	2	0.28
(1,1385)	1:151:J:LEU:CG	1:189:J:LEU:CB	9	0.28
(1,1233)	1:190:H:LEU:CD1	1:166:H:ASP:CA	2	0.28
(1,1233)	1:190:H:LEU:CD1	1:166:H:ASP:CA	10	0.28
(1,1220)	1:214:J:MET:CG	1:191:J:VAL:CB	1	0.28
(1,1220)	1:214:I:MET:CG	1:191:I:VAL:CB	2	0.28
(1,1205)	1:153:J:ILE:CB	1:193:J:ASN:CA	1	0.28
(1,689)	1:201:J:ILE:CD1	1:202:J:LEU:C	9	0.28
(1,561)	1:201:H:ILE:CG1	1:205:H:LEU:CA	7	0.28
(1,365)	1:196:K:PRO:CD	1:200:K:THR:CB	5	0.28
(1,218)	1:179:G:GLN:CB	1:177:G:ALA:CA	3	0.28
(1,218)	1:179:G:GLN:CB	1:177:G:ALA:CA	8	0.28
(1,2296)	3:302:H:A1CCZ:F32	1:196:H:PRO:CG	9	0.27
(1,2293)	3:302:H:A1CCZ:F33	1:160:H:PRO:CA	10	0.27
(1,2204)	2:301:H:IHP:O25	3:302:H:A1CCZ:F32	9	0.27
(1,1381)	1:217:I:ALA:CB	1:221:I:VAL:CG2	4	0.27
(1,1377)	1:205:I:LEU:CD1	1:210:I:THR:CA	2	0.27
(1,968)	1:221:K:VAL:CG2	1:219:K:GLN:CG	3	0.27
(1,945)	1:150:J:ILE:CD1	1:193:J:ASN:CG	6	0.27
(1,831)	1:150:K:ILE:CD1	1:190:K:LEU:CA	1	0.27
(1,685)	1:187:J:GLU:CB	1:184:J:TRP:CE2	9	0.27
(1,673)	1:165:H:VAL:CG2	1:163:H:ASP:CB	3	0.27

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,580)	1:153:K:ILE:CD1	1:193:K:ASN:CG	1	0.27
(1,561)	1:201:H:ILE:CG1	1:205:H:LEU:CA	6	0.27
(1,540)	1:230:J:VAL:CG2	1:221:J:VAL:CA	5	0.27
(1,365)	1:196:I:PRO:CD	1:200:I:THR:CB	9	0.27
(1,267)	1:188:K:THR:CG2	1:185:K:MET:CB	10	0.27
(1,74)	1:231:J:LEU:N	1:228:K:ALA:CB	8	0.27
(1,73)	1:231:I:LEU:N	1:228:J:ALA:CB	8	0.27
(1,48)	1:221:K:VAL:CG1	1:224:L:PRO:CD	5	0.27
(1,48)	1:221:K:VAL:CG2	1:224:L:PRO:CD	5	0.27
(1,25)	1:232:L:ALA:CB	1:238:K:VAL:CB	1	0.27
(1,6)	1:162:H:ARG:CG	1:154:G:ARG:CA	7	0.27
(1,3)	1:162:K:ARG:CG	1:154:J:ARG:CA	2	0.27
(1,2262)	3:302:H:A1CCZ:H7A	1:232:H:ALA:CA	6	0.26
(1,2262)	3:302:H:A1CCZ:H7B	1:232:H:ALA:CA	6	0.26
(1,2258)	3:302:H:A1CCZ:H11	1:232:H:ALA:CA	9	0.26
(1,2221)	3:302:H:A1CCZ:F33	1:224:H:PRO:CG	4	0.26
(1,1533)	1:190:H:LEU:CG	1:187:H:GLU:CB	4	0.26
(1,1497)	1:165:H:VAL:CG2	1:214:H:MET:CA	4	0.26
(1,1385)	1:151:G:LEU:CG	1:189:G:LEU:CB	10	0.26
(1,1377)	1:205:J:LEU:CD1	1:210:J:THR:CA	3	0.26
(1,689)	1:201:K:ILE:CD1	1:202:K:LEU:C	2	0.26
(1,412)	1:202:I:LEU:CG	1:194:I:ALA:CA	5	0.26
(1,389)	1:210:H:THR:CG2	1:211:H:LEU:CG	5	0.26
(1,365)	1:196:J:PRO:CD	1:200:J:THR:CB	7	0.26
(1,218)	1:179:G:GLN:CB	1:177:G:ALA:CA	2	0.26
(1,75)	1:219:G:GLN:CG	1:195:L:ASN:CA	3	0.26
(1,73)	1:231:I:LEU:N	1:228:J:ALA:CB	9	0.26
(1,1)	1:162:G:ARG:CG	1:154:L:ARG:CA	2	0.26
(1,2284)	3:302:H:A1CCZ:F32	1:157:H:PRO:CG	10	0.25
(1,2258)	3:302:H:A1CCZ:H11	1:232:H:ALA:CA	10	0.25
(1,2132)	2:301:H:IHP:P4	1:158:K:LYS:HZ1	7	0.25
(1,2132)	2:301:H:IHP:P4	1:158:K:LYS:HZ2	7	0.25
(1,2132)	2:301:H:IHP:P4	1:158:K:LYS:HZ3	7	0.25
(1,2124)	2:301:H:IHP:P4	1:158:L:LYS:HE2	4	0.25
(1,2124)	2:301:H:IHP:P4	1:158:L:LYS:HE3	4	0.25
(1,2124)	2:301:H:IHP:P4	1:158:L:LYS:HE2	10	0.25
(1,2124)	2:301:H:IHP:P4	1:158:L:LYS:HE3	10	0.25
(1,2123)	2:301:H:IHP:P4	1:158:K:LYS:HE2	4	0.25
(1,2123)	2:301:H:IHP:P4	1:158:K:LYS:HE3	4	0.25
(1,2122)	2:301:H:IHP:P4	1:158:J:LYS:HE2	1	0.25
(1,2122)	2:301:H:IHP:P4	1:158:J:LYS:HE3	1	0.25
(1,1533)	1:190:I:LEU:CG	1:187:I:GLU:CB	9	0.25

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1519)	1:167:G:ARG:CD	1:171:G:THR:CA	1	0.25
(1,1514)	1:193:J:ASN:CB	1:188:J:THR:C	10	0.25
(1,1318)	1:172:K:LEU:CD1	1:183:K:ASN:CB	1	0.25
(1,1313)	1:190:L:LEU:CD1	1:202:L:LEU:CG	6	0.25
(1,1297)	1:218:G:CYS:CB	1:226:G:HIS:CD2	9	0.25
(1,1203)	1:191:K:VAL:CG1	1:194:K:ALA:CA	10	0.25
(1,1013)	1:189:I:LEU:CA	1:153:I:ILE:C	1	0.25
(1,1013)	1:189:I:LEU:CA	1:153:I:ILE:C	4	0.25
(1,974)	1:153:J:ILE:CD1	1:151:J:LEU:C	8	0.25
(1,936)	1:172:K:LEU:CD1	1:189:K:LEU:CB	6	0.25
(1,384)	1:185:J:MET:CG	1:151:J:LEU:CB	5	0.25
(1,297)	1:244:H:ILE:CG1	1:237:H:GLN:CA	8	0.25
(1,166)	1:219:H:GLN:CG	1:160:H:PRO:CA	2	0.25
(1,78)	1:219:J:GLN:CG	1:195:I:ASN:CA	5	0.25
(1,8)	1:195:I:ASN:CA	1:219:J:GLN:CA	4	0.25
(1,1)	1:162:G:ARG:CG	1:154:L:ARG:CA	9	0.25
(1,2233)	3:302:H:A1CCZ:F32	1:195:H:ASN:CA	1	0.24
(1,2124)	2:301:H:IHP:P4	1:158:L:LYS:HE2	6	0.24
(1,2124)	2:301:H:IHP:P4	1:158:L:LYS:HE3	6	0.24
(1,2123)	2:301:H:IHP:P4	1:158:K:LYS:HE2	8	0.24
(1,2123)	2:301:H:IHP:P4	1:158:K:LYS:HE3	8	0.24
(1,1497)	1:165:K:VAL:CG2	1:214:K:MET:CA	2	0.24
(1,1381)	1:217:I:ALA:CB	1:221:I:VAL:CG2	8	0.24
(1,1233)	1:190:H:LEU:CD1	1:166:H:ASP:CA	3	0.24
(1,1013)	1:189:L:LEU:CA	1:153:L:ILE:C	10	0.24
(1,580)	1:153:L:ILE:CD1	1:193:L:ASN:CG	5	0.24
(1,414)	1:201:H:ILE:CG2	1:197:H:ASP:CB	3	0.24
(1,414)	1:201:H:ILE:CG2	1:197:H:ASP:CB	8	0.24
(1,389)	1:210:H:THR:CG2	1:211:H:LEU:CG	2	0.24
(1,267)	1:188:K:THR:CG2	1:185:K:MET:CB	2	0.24
(1,227)	1:198:H:CYS:CB	1:199:H:LYS:CE	3	0.24
(1,227)	1:198:J:CYS:CB	1:199:J:LYS:CE	4	0.24
(1,74)	1:231:J:LEU:N	1:228:K:ALA:CB	6	0.24
(1,48)	1:221:K:VAL:CG1	1:224:L:PRO:CD	3	0.24
(1,48)	1:221:K:VAL:CG2	1:224:L:PRO:CD	3	0.24
(1,10)	1:195:K:ASN:CA	1:219:L:GLN:CA	1	0.24
(1,1)	1:162:G:ARG:CG	1:154:L:ARG:CA	6	0.24
(2,92)	2:301:H:IHP:O25	3:302:H:A1CCZ:H12A	10	0.23
(2,92)	2:301:H:IHP:O25	3:302:H:A1CCZ:H12B	10	0.23
(1,2190)	2:301:H:IHP:O21	3:302:H:A1CCZ:F32	5	0.23
(1,2163)	2:301:H:IHP:P1	1:224:J:PRO:HG2	1	0.23
(1,2163)	2:301:H:IHP:P1	1:224:J:PRO:HG3	1	0.23

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2158)	2:301:H:IHP:P3	1:159:G:GLU:H	3	0.23
(1,2124)	2:301:H:IHP:P4	1:158:L:LYS:HE2	5	0.23
(1,2124)	2:301:H:IHP:P4	1:158:L:LYS:HE3	5	0.23
(1,1438)	1:172:J:LEU:CG	1:183:J:ASN:CA	5	0.23
(1,1313)	1:190:G:LEU:CD1	1:202:G:LEU:CG	4	0.23
(1,808)	1:191:K:VAL:CG1	1:193:K:ASN:CA	8	0.23
(1,580)	1:153:K:ILE:CD1	1:193:K:ASN:CG	9	0.23
(1,378)	1:151:L:LEU:CD1	1:153:L:ILE:CB	10	0.23
(1,267)	1:188:K:THR:CG2	1:185:K:MET:CB	3	0.23
(1,227)	1:198:J:CYS:CB	1:199:J:LYS:CE	7	0.23
(1,48)	1:221:K:VAL:CG1	1:224:L:PRO:CD	10	0.23
(1,48)	1:221:K:VAL:CG2	1:224:L:PRO:CD	10	0.23
(1,3)	1:162:K:ARG:CG	1:154:J:ARG:CA	1	0.23
(2,92)	2:301:H:IHP:O25	3:302:H:A1CCZ:H12A	5	0.22
(2,92)	2:301:H:IHP:O25	3:302:H:A1CCZ:H12B	5	0.22
(1,2293)	3:302:H:A1CCZ:F33	1:160:H:PRO:CA	5	0.22
(1,2251)	3:302:H:A1CCZ:F33	1:198:H:CYS:CA	8	0.22
(1,1533)	1:190:K:LEU:CG	1:187:K:GLU:CB	3	0.22
(1,1438)	1:172:J:LEU:CG	1:183:J:ASN:CA	4	0.22
(1,1381)	1:217:L:ALA:CB	1:221:L:VAL:CG2	6	0.22
(1,1237)	1:155:H:GLN:CA	1:160:H:PRO:CA	4	0.22
(1,1233)	1:190:K:LEU:CD1	1:166:K:ASP:CA	7	0.22
(1,989)	1:221:I:VAL:CG1	1:223:I:GLY:CA	4	0.22
(1,756)	1:191:K:VAL:CG1	1:194:K:ALA:C	10	0.22
(1,689)	1:201:H:ILE:CD1	1:202:H:LEU:C	7	0.22
(1,389)	1:210:H:THR:CG2	1:211:H:LEU:CG	9	0.22
(1,389)	1:210:H:THR:CG2	1:211:H:LEU:CG	10	0.22
(1,248)	1:156:J:GLY:CA	1:196:J:PRO:CD	1	0.22
(1,204)	1:150:K:ILE:CD1	1:189:K:LEU:CA	4	0.22
(1,74)	1:231:J:LEU:N	1:228:K:ALA:CB	7	0.22
(1,25)	1:232:L:ALA:CB	1:238:K:VAL:CB	4	0.22
(1,8)	1:195:I:ASN:CA	1:219:J:GLN:CA	7	0.22
(2,12)	2:301:H:IHP:O23	3:302:H:A1CCZ:H12A	2	0.21
(2,12)	2:301:H:IHP:O23	3:302:H:A1CCZ:H12B	2	0.21
(1,2132)	2:301:H:IHP:P4	1:158:K:LYS:HZ1	9	0.21
(1,2132)	2:301:H:IHP:P4	1:158:K:LYS:HZ2	9	0.21
(1,2132)	2:301:H:IHP:P4	1:158:K:LYS:HZ3	9	0.21
(1,2124)	2:301:H:IHP:P4	1:158:L:LYS:HE2	7	0.21
(1,2124)	2:301:H:IHP:P4	1:158:L:LYS:HE3	7	0.21
(1,2123)	2:301:H:IHP:P4	1:158:K:LYS:HE2	1	0.21
(1,2123)	2:301:H:IHP:P4	1:158:K:LYS:HE3	1	0.21
(1,2123)	2:301:H:IHP:P4	1:158:K:LYS:HE2	10	0.21

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2123)	2:301:H:IHP:P4	1:158:K:LYS:HE3	10	0.21
(1,1620)	1:190:G:LEU:CD1	1:194:G:ALA:C	10	0.21
(1,1591)	1:175:I:GLU:CB	1:185:I:MET:CB	4	0.21
(1,1533)	1:190:H:LEU:CG	1:187:H:GLU:CB	2	0.21
(1,1469)	1:214:I:MET:CB	1:205:I:LEU:CA	7	0.21
(1,1220)	1:214:I:MET:CG	1:191:I:VAL:CB	5	0.21
(1,1100)	1:190:H:LEU:CD1	1:169:H:TYR:CB	9	0.21
(1,974)	1:153:I:ILE:CD1	1:151:I:LEU:C	2	0.21
(1,936)	1:172:K:LEU:CD1	1:189:K:LEU:CB	4	0.21
(1,831)	1:150:K:ILE:CD1	1:190:K:LEU:CA	2	0.21
(1,561)	1:201:J:ILE:CG1	1:205:J:LEU:CA	10	0.21
(1,505)	1:174:K:ALA:CA	1:148:K:THR:CA	7	0.21
(1,389)	1:210:K:THR:CG2	1:211:K:LEU:CG	1	0.21
(1,387)	1:194:K:ALA:CB	1:154:K:ARG:CG	4	0.21
(1,387)	1:194:I:ALA:CB	1:154:I:ARG:CG	7	0.21
(1,169)	1:165:K:VAL:CG2	1:202:K:LEU:CG	1	0.21
(1,166)	1:219:H:GLN:CG	1:160:H:PRO:CA	9	0.21
(1,73)	1:231:I:LEU:N	1:228:J:ALA:CB	10	0.21
(1,4)	1:162:J:ARG:CG	1:154:I:ARG:CA	5	0.21
(1,3)	1:162:K:ARG:CG	1:154:J:ARG:CA	5	0.21
(1,2204)	2:301:H:IHP:O25	3:302:H:A1CCZ:F32	4	0.2
(1,1233)	1:190:H:LEU:CD1	1:166:H:ASP:CA	6	0.2
(1,1220)	1:214:K:MET:CG	1:191:K:VAL:CB	4	0.2
(1,1205)	1:153:K:ILE:CB	1:193:K:ASN:CA	8	0.2
(1,1100)	1:190:H:LEU:CD1	1:169:H:TYR:CB	10	0.2
(1,968)	1:221:I:VAL:CG2	1:219:I:GLN:CG	6	0.2
(1,936)	1:172:K:LEU:CD1	1:189:K:LEU:CB	10	0.2
(1,756)	1:191:L:VAL:CG1	1:194:L:ALA:C	4	0.2
(1,640)	1:190:G:LEU:CD1	1:193:G:ASN:C	10	0.2
(1,540)	1:230:H:VAL:CG1	1:221:H:VAL:CA	9	0.2
(1,505)	1:174:J:ALA:CA	1:148:J:THR:CA	2	0.2
(1,442)	1:228:L:ALA:CB	1:224:L:PRO:CG	7	0.2
(1,389)	1:210:H:THR:CG2	1:211:H:LEU:CG	3	0.2
(1,389)	1:210:H:THR:CG2	1:211:H:LEU:CG	4	0.2
(1,278)	1:155:K:GLN:CB	1:196:K:PRO:CA	2	0.2
(1,227)	1:198:J:CYS:CB	1:199:J:LYS:CE	6	0.2
(1,206)	1:160:I:PRO:CA	1:164:I:TYR:CD2	5	0.2
(1,204)	1:150:H:ILE:CD1	1:189:H:LEU:CA	3	0.2
(1,166)	1:219:H:GLN:CG	1:160:H:PRO:CA	6	0.2
(1,78)	1:219:J:GLN:CG	1:195:I:ASN:CA	8	0.2
(1,73)	1:231:I:LEU:N	1:228:J:ALA:CB	2	0.2
(1,8)	1:195:I:ASN:CA	1:219:J:GLN:CA	3	0.2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,6)	1:162:H:ARG:CG	1:154:G:ARG:CA	5	0.2
(1,2308)	3:302:H:A1CCZ:F31	1:228:H:ALA:CA	8	0.19
(1,2296)	3:302:H:A1CCZ:F32	1:196:H:PRO:CG	5	0.19
(1,2190)	2:301:H:IHP:O21	3:302:H:A1CCZ:F32	1	0.19
(1,2163)	2:301:H:IHP:P1	1:224:J:PRO:HG2	10	0.19
(1,2163)	2:301:H:IHP:P1	1:224:J:PRO:HG3	10	0.19
(1,2133)	2:301:H:IHP:P4	1:158:L:LYS:HZ1	9	0.19
(1,2133)	2:301:H:IHP:P4	1:158:L:LYS:HZ2	9	0.19
(1,2133)	2:301:H:IHP:P4	1:158:L:LYS:HZ3	9	0.19
(1,2123)	2:301:H:IHP:P4	1:158:K:LYS:HE2	9	0.19
(1,2123)	2:301:H:IHP:P4	1:158:K:LYS:HE3	9	0.19
(1,1620)	1:190:G:LEU:CD1	1:194:G:ALA:C	4	0.19
(1,1533)	1:190:H:LEU:CG	1:187:H:GLU:CB	6	0.19
(1,1481)	1:194:I:ALA:CB	1:202:I:LEU:CB	10	0.19
(1,1377)	1:205:I:LEU:CD1	1:210:I:THR:CA	6	0.19
(1,1313)	1:190:G:LEU:CD1	1:202:G:LEU:CG	2	0.19
(1,1233)	1:190:H:LEU:CD1	1:166:H:ASP:CA	8	0.19
(1,1013)	1:189:I:LEU:CA	1:153:I:ILE:C	3	0.19
(1,539)	1:187:J:GLU:CB	1:184:J:TRP:CZ3	6	0.19
(1,442)	1:228:H:ALA:CB	1:224:H:PRO:CG	8	0.19
(1,420)	1:202:L:LEU:CD1	1:199:L:LYS:CD	5	0.19
(1,389)	1:210:H:THR:CG2	1:211:H:LEU:CG	8	0.19
(1,387)	1:194:K:ALA:CB	1:154:K:ARG:CG	8	0.19
(1,297)	1:244:H:ILE:CG1	1:237:H:GLN:CA	3	0.19
(1,267)	1:188:K:THR:CG2	1:185:K:MET:CB	4	0.19
(1,73)	1:231:I:LEU:N	1:228:J:ALA:CB	4	0.19
(2,14)	2:301:H:IHP:O33	3:302:H:A1CCZ:H12A	9	0.18
(2,14)	2:301:H:IHP:O33	3:302:H:A1CCZ:H12B	9	0.18
(1,2275)	3:302:H:A1CCZ:H11	1:231:I:LEU:CA	7	0.18
(1,2250)	3:302:H:A1CCZ:F32	1:198:H:CYS:CA	10	0.18
(1,2233)	3:302:H:A1CCZ:F32	1:195:H:ASN:CA	7	0.18
(1,2210)	2:301:H:IHP:O45	3:302:H:A1CCZ:F32	8	0.18
(1,2123)	2:301:H:IHP:P4	1:158:K:LYS:HE2	6	0.18
(1,2123)	2:301:H:IHP:P4	1:158:K:LYS:HE3	6	0.18
(1,1381)	1:217:I:ALA:CB	1:221:I:VAL:CG2	9	0.18
(1,1100)	1:190:H:LEU:CD1	1:169:H:TYR:CB	1	0.18
(1,989)	1:221:K:VAL:CG1	1:223:K:GLY:CA	10	0.18
(1,808)	1:191:L:VAL:CG1	1:193:L:ASN:CA	6	0.18
(1,673)	1:165:J:VAL:CG2	1:163:J:ASP:CB	4	0.18
(1,25)	1:232:L:ALA:CB	1:238:K:VAL:CB	3	0.18
(1,5)	1:162:I:ARG:CG	1:154:H:ARG:CA	10	0.18
(1,3)	1:162:K:ARG:CG	1:154:J:ARG:CA	3	0.18

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,3)	1:162:K:ARG:CG	1:154:J:ARG:CA	7	0.18
(2,8)	2:301:H:IHP:O23	3:302:H:A1CCZ:H9A	2	0.17
(2,8)	2:301:H:IHP:O23	3:302:H:A1CCZ:H9B	2	0.17
(1,2308)	3:302:H:A1CCZ:F31	1:228:H:ALA:CA	4	0.17
(1,2262)	3:302:H:A1CCZ:H7A	1:232:H:ALA:CA	5	0.17
(1,2262)	3:302:H:A1CCZ:H7B	1:232:H:ALA:CA	5	0.17
(1,2204)	2:301:H:IHP:O25	3:302:H:A1CCZ:F32	10	0.17
(1,2197)	2:301:H:IHP:O41	3:302:H:A1CCZ:F33	2	0.17
(1,2157)	2:301:H:IHP:P3	1:158:L:LYS:HA	6	0.17
(1,1514)	1:193:J:ASN:CB	1:188:J:THR:C	8	0.17
(1,1473)	1:153:I:ILE:CG2	1:165:I:VAL:C	4	0.17
(1,968)	1:221:I:VAL:CG2	1:219:I:GLN:CG	1	0.17
(1,945)	1:150:J:ILE:CD1	1:193:J:ASN:CG	1	0.17
(1,945)	1:150:J:ILE:CD1	1:193:J:ASN:CG	5	0.17
(1,640)	1:190:I:LEU:CD1	1:193:I:ASN:C	2	0.17
(1,580)	1:153:K:ILE:CD1	1:193:K:ASN:CG	3	0.17
(1,580)	1:153:L:ILE:CD1	1:193:L:ASN:CG	4	0.17
(1,539)	1:187:G:GLU:CB	1:184:G:TRP:CZ3	4	0.17
(1,539)	1:187:L:GLU:CB	1:184:L:TRP:CZ3	8	0.17
(1,505)	1:174:K:ALA:CA	1:148:K:THR:CA	10	0.17
(1,389)	1:210:K:THR:CG2	1:211:K:LEU:CG	7	0.17
(1,387)	1:194:K:ALA:CB	1:154:K:ARG:CG	10	0.17
(1,297)	1:244:H:ILE:CG1	1:237:H:GLN:CA	5	0.17
(1,274)	1:156:I:GLY:CA	1:160:I:PRO:C	6	0.17
(1,11)	1:195:L:ASN:CA	1:219:G:GLN:CA	10	0.17
(1,5)	1:162:I:ARG:CG	1:154:H:ARG:CA	6	0.17
(1,2284)	3:302:H:A1CCZ:F32	1:157:H:PRO:CG	4	0.16
(1,2251)	3:302:H:A1CCZ:F33	1:198:H:CYS:CA	2	0.16
(1,2196)	2:301:H:IHP:O41	3:302:H:A1CCZ:F32	10	0.16
(1,2163)	2:301:H:IHP:P1	1:224:J:PRO:HG2	5	0.16
(1,2163)	2:301:H:IHP:P1	1:224:J:PRO:HG3	5	0.16
(1,1591)	1:175:K:GLU:CB	1:185:K:MET:CB	3	0.16
(1,1563)	1:148:G:THR:CA	1:174:G:ALA:C	7	0.16
(1,1533)	1:190:H:LEU:CG	1:187:H:GLU:CB	10	0.16
(1,1473)	1:153:J:ILE:CG2	1:165:J:VAL:C	5	0.16
(1,673)	1:165:J:VAL:CG2	1:163:J:ASP:CB	9	0.16
(1,640)	1:190:G:LEU:CD1	1:193:G:ASN:C	9	0.16
(1,539)	1:187:J:GLU:CB	1:184:J:TRP:CZ3	1	0.16
(1,423)	1:190:G:LEU:CG	1:193:G:ASN:C	4	0.16
(1,399)	1:150:K:ILE:CD1	1:190:K:LEU:CD1	4	0.16
(1,297)	1:244:H:ILE:CG1	1:237:H:GLN:CA	10	0.16
(1,166)	1:219:J:GLN:CG	1:160:J:PRO:CA	4	0.16

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,76)	1:219:L:GLN:CG	1:195:K:ASN:CA	10	0.16
(1,4)	1:162:J:ARG:CG	1:154:I:ARG:CA	3	0.16
(1,4)	1:162:J:ARG:CG	1:154:I:ARG:CA	6	0.16
(1,1)	1:162:G:ARG:CG	1:154:L:ARG:CA	10	0.16
(2,92)	2:301:H:IHP:O25	3:302:H:A1CCZ:H12A	3	0.15
(2,92)	2:301:H:IHP:O25	3:302:H:A1CCZ:H12B	3	0.15
(1,2310)	3:302:H:A1CCZ:F31	1:228:I:ALA:CA	7	0.15
(1,2308)	3:302:H:A1CCZ:F31	1:228:H:ALA:CA	5	0.15
(1,2294)	3:302:H:A1CCZ:F32	1:196:H:PRO:CA	7	0.15
(1,2292)	3:302:H:A1CCZ:F32	1:160:H:PRO:CA	3	0.15
(1,2204)	2:301:H:IHP:O25	3:302:H:A1CCZ:F32	5	0.15
(1,2124)	2:301:H:IHP:P4	1:158:L:LYS:HE2	8	0.15
(1,2124)	2:301:H:IHP:P4	1:158:L:LYS:HE3	8	0.15
(1,1620)	1:190:H:LEU:CD1	1:194:H:ALA:C	6	0.15
(1,1620)	1:190:G:LEU:CD1	1:194:G:ALA:C	7	0.15
(1,1519)	1:167:H:ARG:CD	1:171:H:THR:CA	7	0.15
(1,1297)	1:218:J:CYS:CB	1:226:J:HIS:CD2	6	0.15
(1,1203)	1:191:L:VAL:CG1	1:194:L:ALA:CA	4	0.15
(1,1172)	1:244:L:ILE:CG1	1:237:L:GLN:CB	1	0.15
(1,1172)	1:244:L:ILE:CG1	1:237:L:GLN:CB	4	0.15
(1,989)	1:221:I:VAL:CG1	1:223:I:GLY:CA	3	0.15
(1,936)	1:172:H:LEU:CD1	1:189:H:LEU:CB	2	0.15
(1,936)	1:172:K:LEU:CD1	1:189:K:LEU:CB	5	0.15
(1,808)	1:191:K:VAL:CG1	1:193:K:ASN:CA	7	0.15
(1,756)	1:191:L:VAL:CG1	1:194:L:ALA:C	3	0.15
(1,640)	1:190:L:LEU:CD1	1:193:L:ASN:C	6	0.15
(1,384)	1:185:L:MET:CG	1:151:L:LEU:CB	6	0.15
(1,297)	1:244:I:ILE:CG1	1:237:I:GLN:CA	4	0.15
(1,297)	1:244:L:ILE:CG1	1:237:L:GLN:CA	6	0.15
(1,297)	1:244:J:ILE:CG1	1:237:J:GLN:CA	9	0.15
(1,267)	1:188:K:THR:CG2	1:185:K:MET:CB	7	0.15
(1,204)	1:150:H:ILE:CD1	1:189:H:LEU:CA	1	0.15
(2,93)	2:301:H:IHP:O35	3:302:H:A1CCZ:H11	5	0.14
(1,2308)	3:302:H:A1CCZ:F31	1:228:H:ALA:CA	1	0.14
(1,2250)	3:302:H:A1CCZ:F32	1:198:H:CYS:CA	4	0.14
(1,2210)	2:301:H:IHP:O45	3:302:H:A1CCZ:F32	9	0.14
(1,2208)	2:301:H:IHP:O35	3:302:H:A1CCZ:F33	9	0.14
(1,2163)	2:301:H:IHP:P1	1:224:J:PRO:HG2	4	0.14
(1,2163)	2:301:H:IHP:P1	1:224:J:PRO:HG3	4	0.14
(1,2133)	2:301:H:IHP:P4	1:158:L:LYS:HZ1	6	0.14
(1,2133)	2:301:H:IHP:P4	1:158:L:LYS:HZ2	6	0.14
(1,2133)	2:301:H:IHP:P4	1:158:L:LYS:HZ3	6	0.14

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2132)	2:301:H:IHP:P4	1:158:K:LYS:HZ1	2	0.14
(1,2132)	2:301:H:IHP:P4	1:158:K:LYS:HZ2	2	0.14
(1,2132)	2:301:H:IHP:P4	1:158:K:LYS:HZ3	2	0.14
(1,1650)	1:204:H:ALA:CB	1:206:H:GLY:C	1	0.14
(1,1591)	1:175:I:GLU:CB	1:185:I:MET:CB	1	0.14
(1,1591)	1:175:L:GLU:CB	1:185:L:MET:CB	7	0.14
(1,1533)	1:190:L:LEU:CG	1:187:L:GLU:CB	5	0.14
(1,1473)	1:153:J:ILE:CG2	1:165:J:VAL:C	1	0.14
(1,1469)	1:214:I:MET:CB	1:205:I:LEU:CA	3	0.14
(1,1313)	1:190:G:LEU:CD1	1:202:G:LEU:CG	9	0.14
(1,1100)	1:190:H:LEU:CD1	1:169:H:TYR:CB	2	0.14
(1,936)	1:172:K:LEU:CD1	1:189:K:LEU:CB	9	0.14
(1,915)	1:235:G:MET:CB	1:239:G:THR:CA	7	0.14
(1,505)	1:174:I:ALA:CA	1:148:I:THR:CA	8	0.14
(1,423)	1:190:K:LEU:CG	1:193:K:ASN:C	9	0.14
(1,423)	1:190:G:LEU:CG	1:193:G:ASN:C	10	0.14
(1,414)	1:201:I:ILE:CG2	1:197:I:ASP:CB	1	0.14
(1,399)	1:150:K:ILE:CD1	1:190:K:LEU:CD1	3	0.14
(1,297)	1:244:L:ILE:CG1	1:237:L:GLN:CA	2	0.14
(1,297)	1:244:L:ILE:CG1	1:237:L:GLN:CA	7	0.14
(1,267)	1:188:K:THR:CG2	1:185:K:MET:CB	1	0.14
(1,166)	1:219:J:GLN:CG	1:160:J:PRO:CA	8	0.14
(1,24)	1:232:G:ALA:CB	1:238:L:VAL:CB	7	0.14
(2,94)	2:301:H:IHP:O45	3:302:H:A1CCZ:H11	8	0.13
(1,2210)	2:301:H:IHP:O45	3:302:H:A1CCZ:F32	2	0.13
(1,2196)	2:301:H:IHP:O41	3:302:H:A1CCZ:F32	9	0.13
(1,2163)	2:301:H:IHP:P1	1:224:J:PRO:HG2	9	0.13
(1,2163)	2:301:H:IHP:P1	1:224:J:PRO:HG3	9	0.13
(1,1650)	1:204:J:ALA:CB	1:206:J:GLY:C	6	0.13
(1,1591)	1:175:L:GLU:CB	1:185:L:MET:CB	2	0.13
(1,1533)	1:190:H:LEU:CG	1:187:H:GLU:CB	1	0.13
(1,1519)	1:167:K:ARG:CD	1:171:K:THR:CA	8	0.13
(1,1495)	1:202:L:LEU:CG	1:161:L:PHE:CB	5	0.13
(1,1220)	1:214:I:MET:CG	1:191:I:VAL:CB	10	0.13
(1,1123)	1:211:L:LEU:CD1	1:210:L:THR:CB	6	0.13
(1,1100)	1:190:K:LEU:CD1	1:169:K:TYR:CB	7	0.13
(1,989)	1:221:I:VAL:CG1	1:223:I:GLY:CA	9	0.13
(1,968)	1:221:I:VAL:CG2	1:219:I:GLN:CG	10	0.13
(1,915)	1:235:G:MET:CB	1:239:G:THR:CA	1	0.13
(1,673)	1:165:J:VAL:CG2	1:163:J:ASP:CB	5	0.13
(1,673)	1:165:K:VAL:CG2	1:163:K:ASP:CB	8	0.13
(1,539)	1:187:G:GLU:CB	1:184:G:TRP:CZ3	2	0.13

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,505)	1:174:K:ALA:CA	1:148:K:THR:CA	9	0.13
(1,442)	1:228:K:ALA:CB	1:224:K:PRO:CG	6	0.13
(1,248)	1:156:K:GLY:CA	1:196:K:PRO:CD	10	0.13
(1,2133)	2:301:H:IHP:P4	1:158:L:LYS:HZ1	3	0.12
(1,2133)	2:301:H:IHP:P4	1:158:L:LYS:HZ2	3	0.12
(1,2133)	2:301:H:IHP:P4	1:158:L:LYS:HZ3	3	0.12
(1,2133)	2:301:H:IHP:P4	1:158:L:LYS:HZ1	4	0.12
(1,2133)	2:301:H:IHP:P4	1:158:L:LYS:HZ2	4	0.12
(1,2133)	2:301:H:IHP:P4	1:158:L:LYS:HZ3	4	0.12
(1,1565)	1:214:I:MET:CG	1:190:I:LEU:CB	8	0.12
(1,1514)	1:193:L:ASN:CB	1:188:L:THR:C	2	0.12
(1,1381)	1:217:I:ALA:CB	1:221:I:VAL:CG2	2	0.12
(1,1282)	1:217:G:ALA:CB	1:215:G:MET:CB	3	0.12
(1,1123)	1:211:L:LEU:CD1	1:210:L:THR:CB	3	0.12
(1,831)	1:150:K:ILE:CD1	1:190:K:LEU:CA	7	0.12
(1,808)	1:191:L:VAL:CG1	1:193:L:ASN:CA	1	0.12
(1,619)	1:208:H:GLY:CA	1:210:H:THR:CB	8	0.12
(1,560)	1:201:I:ILE:CD1	1:161:I:PHE:CD1	4	0.12
(1,560)	1:201:K:ILE:CD1	1:161:K:PHE:CD1	7	0.12
(1,423)	1:190:G:LEU:CG	1:193:G:ASN:C	8	0.12
(1,206)	1:160:J:PRO:CA	1:164:J:TYR:CD2	2	0.12
(1,166)	1:219:H:GLN:CG	1:160:H:PRO:CA	1	0.12
(1,76)	1:219:L:GLN:CG	1:195:K:ASN:CA	8	0.12
(1,8)	1:195:I:ASN:CA	1:219:J:GLN:CA	9	0.12
(1,5)	1:162:I:ARG:CG	1:154:H:ARG:CA	4	0.12
(1,2318)	3:302:H:A1CCZ:F31	1:231:H:LEU:CB	6	0.11
(1,2288)	3:302:H:A1CCZ:F33	1:157:G:PRO:CG	3	0.11
(1,2169)	2:301:H:IHP:P1	1:224:J:PRO:HD2	10	0.11
(1,2169)	2:301:H:IHP:P1	1:224:J:PRO:HD3	10	0.11
(1,2132)	2:301:H:IHP:P4	1:158:K:LYS:HZ1	5	0.11
(1,2132)	2:301:H:IHP:P4	1:158:K:LYS:HZ2	5	0.11
(1,2132)	2:301:H:IHP:P4	1:158:K:LYS:HZ3	5	0.11
(1,1650)	1:204:H:ALA:CB	1:206:H:GLY:C	10	0.11
(1,1620)	1:190:G:LEU:CD1	1:194:G:ALA:C	8	0.11
(1,1519)	1:167:I:ARG:CD	1:171:I:THR:CA	2	0.11
(1,1437)	1:211:H:LEU:CD2	1:209:H:ALA:CA	6	0.11
(1,1237)	1:155:H:GLN:CA	1:160:H:PRO:CA	1	0.11
(1,1237)	1:155:H:GLN:CA	1:160:H:PRO:CA	2	0.11
(1,1172)	1:244:L:ILE:CG1	1:237:L:GLN:CB	2	0.11
(1,1172)	1:244:L:ILE:CG1	1:237:L:GLN:CB	3	0.11
(1,1123)	1:211:L:LEU:CD1	1:210:L:THR:CB	10	0.11
(1,989)	1:221:I:VAL:CG1	1:223:I:GLY:CA	6	0.11

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,936)	1:172:I:LEU:CD1	1:189:I:LEU:CB	1	0.11
(1,936)	1:172:K:LEU:CD1	1:189:K:LEU:CB	3	0.11
(1,808)	1:191:K:VAL:CG1	1:193:K:ASN:CA	2	0.11
(1,745)	1:167:G:ARG:CB	1:159:G:GLU:CG	7	0.11
(1,657)	1:172:H:LEU:CG	1:153:H:ILE:CB	7	0.11
(1,640)	1:190:L:LEU:CD1	1:193:L:ASN:C	1	0.11
(1,540)	1:230:H:VAL:CG1	1:221:H:VAL:CA	10	0.11
(1,384)	1:185:J:MET:CG	1:151:J:LEU:CB	4	0.11
(1,248)	1:156:L:GLY:CA	1:196:L:PRO:CD	4	0.11
(1,248)	1:156:I:GLY:CA	1:196:I:PRO:CD	6	0.11
(1,206)	1:160:L:PRO:CA	1:164:L:TYR:CD2	3	0.11
(1,76)	1:219:L:GLN:CG	1:195:K:ASN:CA	7	0.11
(1,24)	1:232:G:ALA:CB	1:238:L:VAL:CB	6	0.11
(1,3)	1:162:K:ARG:CG	1:154:J:ARG:CA	4	0.11
(1,2140)	2:301:H:IHP:P6	1:224:L:PRO:HD2	3	0.1
(1,2140)	2:301:H:IHP:P6	1:224:L:PRO:HD3	3	0.1
(1,2132)	2:301:H:IHP:P4	1:158:K:LYS:HZ1	3	0.1
(1,2132)	2:301:H:IHP:P4	1:158:K:LYS:HZ2	3	0.1
(1,2132)	2:301:H:IHP:P4	1:158:K:LYS:HZ3	3	0.1
(1,2124)	2:301:H:IHP:P4	1:158:L:LYS:HE2	9	0.1
(1,2124)	2:301:H:IHP:P4	1:158:L:LYS:HE3	9	0.1
(1,1473)	1:153:J:ILE:CG2	1:165:J:VAL:C	6	0.1
(1,1381)	1:217:I:ALA:CB	1:221:I:VAL:CG2	1	0.1
(1,1313)	1:190:K:LEU:CD1	1:202:K:LEU:CG	3	0.1
(1,1241)	1:216:G:THR:CA	1:212:G:GLU:CD	7	0.1
(1,1123)	1:211:J:LEU:CD1	1:210:J:THR:CB	1	0.1
(1,1100)	1:190:H:LEU:CD1	1:169:H:TYR:CB	8	0.1
(1,399)	1:150:J:ILE:CD1	1:190:J:LEU:CD1	9	0.1
(1,78)	1:219:J:GLN:CG	1:195:I:ASN:CA	10	0.1
(1,76)	1:219:L:GLN:CG	1:195:K:ASN:CA	2	0.1
(1,24)	1:232:G:ALA:CB	1:238:L:VAL:CB	9	0.1
(1,8)	1:195:I:ASN:CA	1:219:J:GLN:CA	8	0.1

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

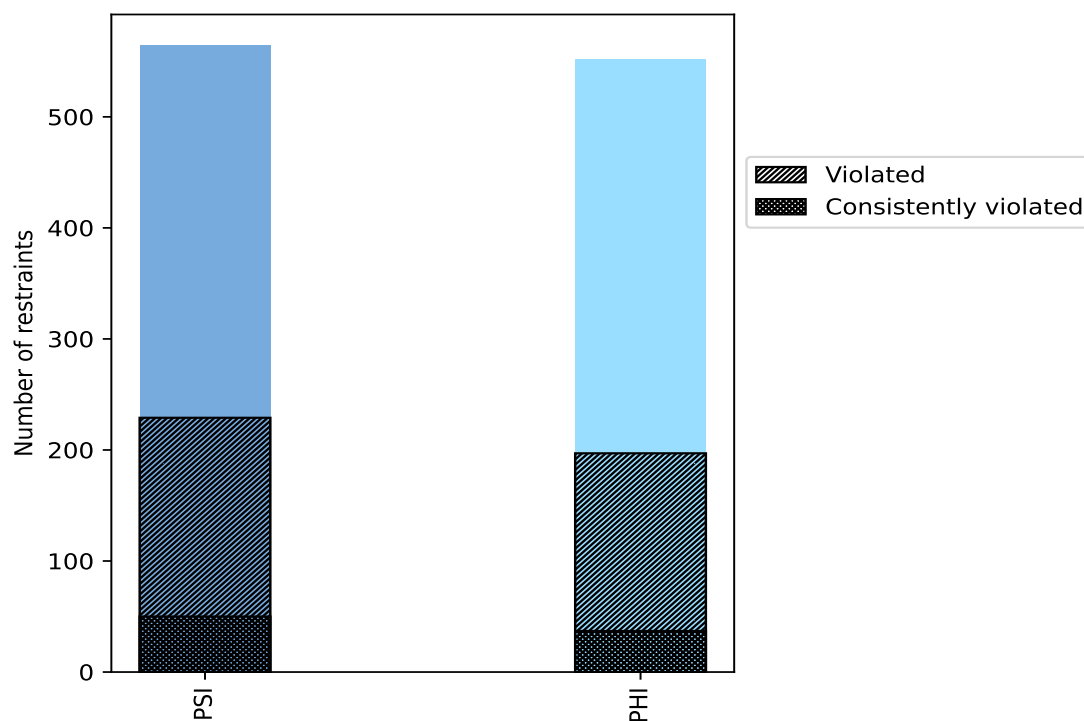
10.1 Summary of dihedral-angle violations [i](#)

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

Angle type	Count	% ¹	Violated ³			Consistently Violated ⁴		
			Count	% ²	% ¹	Count	% ²	% ¹
PSI	564	50.5	229	40.6	20.5	50	8.9	4.5
PHI	552	49.5	197	35.7	17.7	37	6.7	3.3
Total	1116	100.0	426	38.2	38.2	87	7.8	7.8

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

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



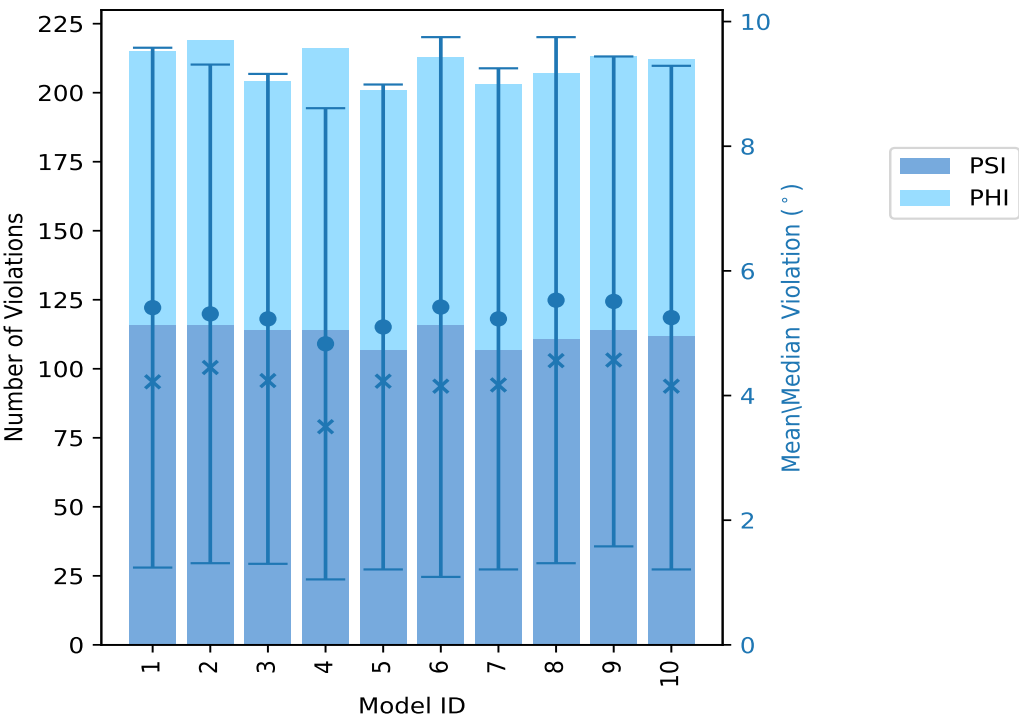
Violated and consistently violated restraints are shown using different hatch patterns in their respective categories

10.2 Dihedral-angle violation statistics for each model ⓘ

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

Model ID	Number of violations			Mean (°)	Max (°)	SD (°)	Median (°)
	PSI	PHI	Total				
1	116	99	215	5.41	28.06	4.17	4.22
2	116	103	219	5.31	21.78	4.0	4.45
3	114	90	204	5.23	28.32	3.93	4.24
4	114	102	216	4.83	27.69	3.78	3.5
5	107	94	201	5.1	21.91	3.89	4.23
6	116	97	213	5.42	26.76	4.33	4.15
7	107	96	203	5.23	27.99	4.02	4.17
8	111	96	207	5.53	28.43	4.22	4.56
9	114	99	213	5.51	22.44	3.93	4.57
10	112	100	212	5.25	28.71	4.04	4.15

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

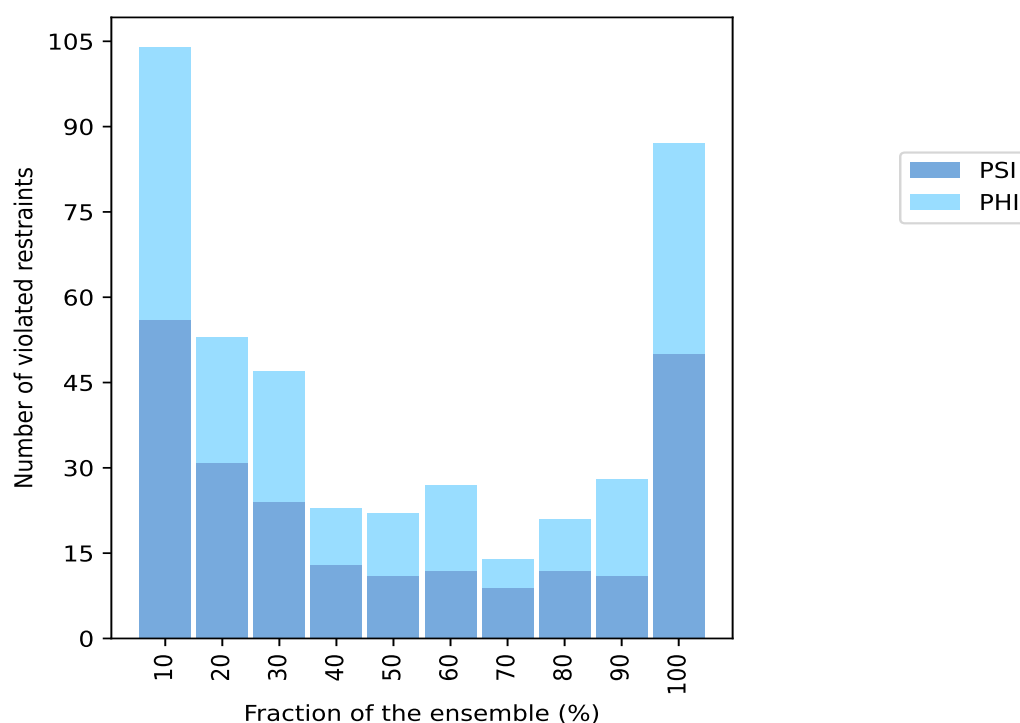
10.3 Dihedral-angle violation statistics for the ensemble [i](#)

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	
PSI	PHI	Total	Count ¹	%
56	48	104	1	10.0
31	22	53	2	20.0
24	23	47	3	30.0
13	10	23	4	40.0
11	11	22	5	50.0
12	15	27	6	60.0
9	5	14	7	70.0
12	9	21	8	80.0
11	17	28	9	90.0
50	37	87	10	100.0

¹ Number of models with violations

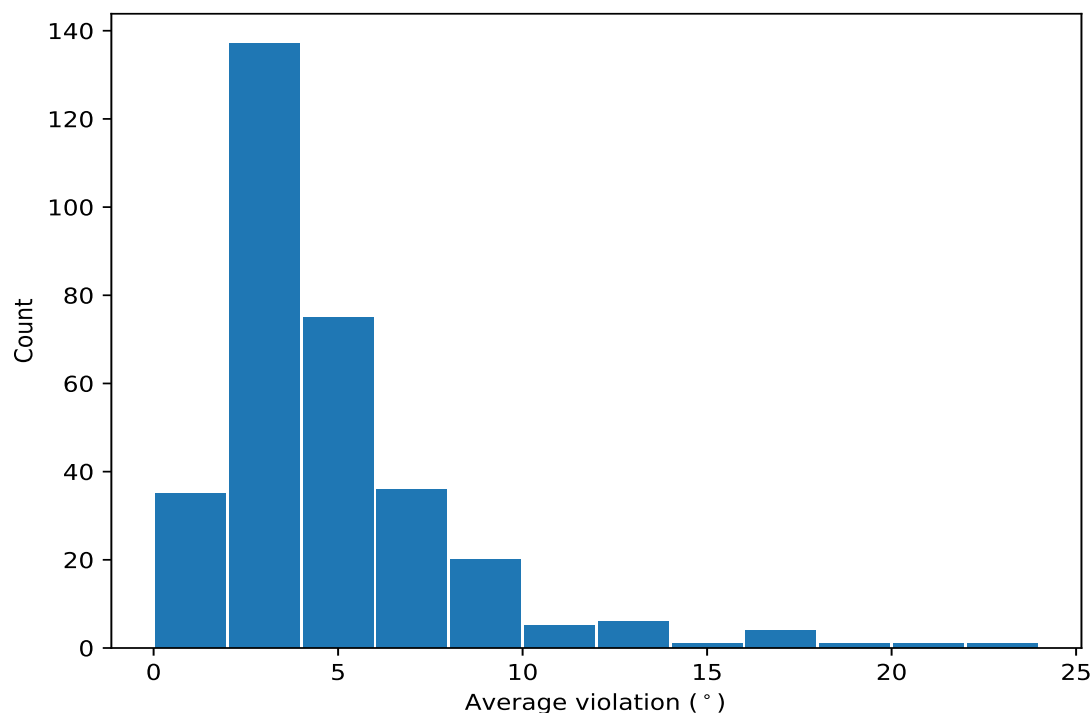
10.3.1 Bar graph : Dihedral-angle Violation statistics for the ensemble [i](#)



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
(1,526)	1:195:J:ASN:N	1:195:J:ASN:CA	1:195:J:ASN:C	1:196:J:PRO:N	10	23.43	4.67	24.34
(1,525)	1:195:I:ASN:N	1:195:I:ASN:CA	1:195:I:ASN:C	1:196:I:PRO:N	10	20.64	5.45	21.29
(1,528)	1:195:L:ASN:N	1:195:L:ASN:CA	1:195:L:ASN:C	1:196:L:PRO:N	10	17.69	2.63	16.67
(1,523)	1:195:G:ASN:N	1:195:G:ASN:CA	1:195:G:ASN:C	1:196:G:PRO:N	10	17.37	0.85	17.56
(1,524)	1:195:H:ASN:N	1:195:H:ASN:CA	1:195:H:ASN:C	1:196:H:PRO:N	10	13.18	3.13	13.54
(1,43)	1:149:G:SER:N	1:149:G:SER:CA	1:149:G:SER:C	1:150:G:ILE:N	10	12.83	1.55	13.0
(1,890)	1:228:H:ALA:C	1:229:H:ARG:N	1:229:H:ARG:CA	1:229:H:ARG:C	10	12.4	1.7	13.06
(1,527)	1:195:K:ASN:N	1:195:K:ASN:CA	1:195:K:ASN:C	1:196:K:PRO:N	10	12.14	4.05	10.38
(1,448)	1:187:J:GLU:C	1:188:J:THR:N	1:188:J:THR:CA	1:188:J:THR:C	10	10.9	3.49	10.0
(1,1045)	1:242:G:ALA:C	1:243:G:THR:N	1:243:G:THR:CA	1:243:G:THR:C	10	10.55	0.43	10.4
(1,1047)	1:242:I:ALA:C	1:243:I:THR:N	1:243:I:THR:CA	1:243:I:THR:C	10	9.91	1.53	9.84
(1,1049)	1:242:K:ALA:C	1:243:K:THR:N	1:243:K:THR:CA	1:243:K:THR:C	10	9.59	0.92	9.42
(1,48)	1:149:L:SER:N	1:149:L:SER:CA	1:149:L:SER:C	1:150:L:ILE:N	10	9.46	4.91	8.59

Continued on next page..

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Models ¹	Mean	SD ²	Median
(1,44)	1:149:H:SER:N	1:149:H:SER:CA	1:149:H:SER:C	1:150:H:ILE:N	10	9.28	2.86	9.07
(1,39)	1:148:I:THR:C	1:149:I:SER:N	1:149:I:SER:CA	1:149:I:SER:C	10	9.22	3.56	9.43
(1,1046)	1:242:H:ALA:C	1:243:H:THR:N	1:243:H:THR:CA	1:243:H:THR:C	10	9.16	0.58	9.16
(1,45)	1:149:I:SER:N	1:149:I:SER:CA	1:149:I:SER:C	1:150:I:ILE:N	10	8.93	2.76	8.88
(1,61)	1:152:G:ASP:N	1:152:G:ASP:CA	1:152:G:ASP:C	1:153:G:ILE:N	10	8.86	1.57	9.24
(1,445)	1:187:G:GLU:C	1:188:G:THR:N	1:188:G:THR:CA	1:188:G:THR:C	10	8.51	1.33	8.68
(1,1048)	1:242:J:ALA:C	1:243:J:THR:N	1:243:J:THR:CA	1:243:J:THR:C	10	8.51	1.25	8.19
(1,794)	1:219:H:GLN:C	1:220:H:GLY:N	1:220:H:GLY:CA	1:220:H:GLY:C	10	8.14	1.59	7.93
(1,1026)	1:239:L:THR:C	1:240:L:ASN:N	1:240:L:ASN:CA	1:240:L:ASN:C	10	8.06	1.38	8.64
(1,1112)	1:242:H:ALA:N	1:242:H:ALA:CA	1:242:H:ALA:C	1:243:H:THR:N	10	7.8	0.92	7.94
(1,38)	1:148:H:THR:C	1:149:H:SER:N	1:149:H:SER:CA	1:149:H:SER:C	10	7.78	3.39	8.64
(1,632)	1:204:H:ALA:N	1:204:H:ALA:CA	1:204:H:ALA:C	1:205:H:LEU:N	10	7.65	2.51	7.7
(1,482)	1:190:H:LEU:C	1:191:H:VAL:N	1:191:H:VAL:CA	1:191:H:VAL:C	10	7.65	3.73	6.98
(1,981)	1:236:I:SER:N	1:236:I:SER:CA	1:236:I:SER:C	1:237:I:GLN:N	10	7.5	1.66	7.39
(1,558)	1:197:L:ASP:C	1:198:L:CYS:N	1:198:L:CYS:CA	1:198:L:CYS:C	10	7.36	1.0	7.3
(1,1024)	1:239:J:THR:C	1:240:J:ASN:N	1:240:J:ASN:CA	1:240:J:ASN:C	10	7.22	1.89	7.3
(1,1050)	1:242:L:ALA:C	1:243:L:THR:N	1:243:L:THR:CA	1:243:L:THR:C	10	7.18	0.4	7.28
(1,983)	1:236:K:SER:N	1:236:K:SER:CA	1:236:K:SER:C	1:237:K:GLN:N	10	7.04	1.15	6.96
(1,804)	1:220:L:GLY:N	1:220:L:GLY:CA	1:220:L:GLY:C	1:221:L:VAL:N	10	6.97	2.38	6.97
(1,116)	1:158:H:LYS:N	1:158:H:LYS:CA	1:158:H:LYS:C	1:159:H:GLU:N	10	6.79	2.14	6.04
(1,64)	1:152:J:ASP:N	1:152:J:ASP:CA	1:152:J:ASP:C	1:153:J:ILE:N	10	6.74	3.5	6.52
(1,27)	1:147:I:PRO:N	1:147:I:PRO:CA	1:147:I:PRO:C	1:148:I:THR:N	10	6.7	2.02	7.01
(1,1113)	1:242:I:ALA:N	1:242:I:ALA:CA	1:242:I:ALA:C	1:243:I:THR:N	10	6.5	1.84	5.88
(1,979)	1:236:G:SER:N	1:236:G:SER:CA	1:236:G:SER:C	1:237:G:GLN:N	10	6.47	0.69	6.38
(1,446)	1:187:H:GLU:C	1:188:H:THR:N	1:188:H:THR:CA	1:188:H:THR:C	10	6.46	3.16	4.8
(1,28)	1:147:J:PRO:N	1:147:J:PRO:CA	1:147:J:PRO:C	1:148:J:THR:N	10	6.4	3.21	5.63
(1,312)	1:174:L:ALA:N	1:174:L:ALA:CA	1:174:L:ALA:C	1:175:L:GLU:N	10	6.34	3.0	6.42
(1,1025)	1:239:K:THR:C	1:240:K:ASN:N	1:240:K:ASN:CA	1:240:K:ASN:C	10	6.25	1.29	6.31
(1,1030)	1:240:J:ASN:N	1:240:J:ASN:CA	1:240:J:ASN:C	1:241:J:THR:N	10	6.23	2.34	5.87
(1,450)	1:187:L:GLU:C	1:188:L:THR:N	1:188:L:THR:CA	1:188:L:THR:C	10	6.02	1.93	6.3
(1,1021)	1:239:G:THR:C	1:240:G:ASN:N	1:240:G:ASN:CA	1:240:G:ASN:C	10	5.92	0.88	6.06
(1,1032)	1:240:L:ASN:N	1:240:L:ASN:CA	1:240:L:ASN:C	1:241:L:THR:N	10	5.92	1.46	6.11
(1,423)	1:185:I:MET:C	1:186:I:THR:N	1:186:I:THR:CA	1:186:I:THR:C	10	5.9	2.34	6.13
(1,1031)	1:240:K:ASN:N	1:240:K:ASN:CA	1:240:K:ASN:C	1:241:K:THR:N	10	5.86	1.79	5.9
(1,89)	1:154:K:ARG:C	1:155:K:GLN:N	1:155:K:GLN:CA	1:155:K:GLN:C	10	5.82	1.72	5.58
(1,1014)	1:238:L:VAL:C	1:239:L:THR:N	1:239:L:THR:CA	1:239:L:THR:C	10	5.8	1.09	5.62
(1,1115)	1:242:K:ALA:N	1:242:K:ALA:CA	1:242:K:ALA:C	1:243:K:THR:N	10	5.44	1.04	5.24
(1,120)	1:158:L:LYS:N	1:158:L:LYS:CA	1:158:L:LYS:C	1:159:L:GLU:N	10	5.43	1.8	5.67
(1,1023)	1:239:I:THR:C	1:240:I:ASN:N	1:240:I:ASN:CA	1:240:I:ASN:C	10	5.42	1.53	5.35
(1,1114)	1:242:J:ALA:N	1:242:J:ALA:CA	1:242:J:ALA:C	1:243:J:THR:N	10	5.37	1.3	5.24
(1,1111)	1:242:G:ALA:N	1:242:G:ALA:CA	1:242:G:ALA:C	1:243:G:THR:N	10	5.35	0.77	5.36
(1,115)	1:158:G:LYS:N	1:158:G:LYS:CA	1:158:G:LYS:C	1:159:G:GLU:N	10	5.33	1.36	4.94
(1,1020)	1:239:L:THR:N	1:239:L:THR:CA	1:239:L:THR:C	1:240:L:ASN:N	10	5.14	1.24	5.72
(1,59)	1:151:K:LEU:N	1:151:K:LEU:CA	1:151:K:LEU:C	1:152:K:ASP:N	10	5.09	1.66	5.03
(1,674)	1:209:H:ALA:C	1:210:H:THR:N	1:210:H:THR:CA	1:210:H:THR:C	10	5.08	1.42	5.38
(1,1029)	1:240:I:ASN:N	1:240:I:ASN:CA	1:240:I:ASN:C	1:241:I:THR:N	10	4.95	1.34	4.73
(1,531)	1:195:I:ASN:C	1:196:I:PRO:N	1:196:I:PRO:CA	1:196:I:PRO:C	10	4.89	1.8	4.63
(1,1027)	1:240:G:ASN:N	1:240:G:ASN:CA	1:240:G:ASN:C	1:241:G:THR:N	10	4.81	1.32	4.38
(1,380)	1:182:H:LYS:N	1:182:H:LYS:CA	1:182:H:LYS:C	1:183:H:ASN:N	10	4.77	2.19	3.99
(1,1116)	1:242:L:ALA:N	1:242:L:ALA:CA	1:242:L:ALA:C	1:243:L:THR:N	10	4.45	0.57	4.42
(1,1022)	1:239:H:THR:C	1:240:H:ASN:N	1:240:H:ASN:CA	1:240:H:ASN:C	10	4.44	0.82	4.24

Continued on next page..

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Models ¹	Mean	SD ²	Median
(1,1028)	1:240:H:ASN:N	1:240:H:ASN:CA	1:240:H:ASN:C	1:241:H:THR:N	10	4.33	1.34	4.63
(1,1009)	1:238:G:VAL:C	1:239:G:THR:N	1:239:G:THR:CA	1:239:G:THR:C	10	4.27	2.09	3.62
(1,434)	1:186:H:THR:C	1:187:H:GLU:N	1:187:H:GLU:CA	1:187:H:GLU:C	10	4.25	2.42	3.46
(1,117)	1:158:I:LYS:N	1:158:I:LYS:CA	1:158:I:LYS:C	1:159:I:GLU:N	10	4.19	1.2	4.17
(1,533)	1:195:K:ASN:C	1:196:K:PRO:N	1:196:K:PRO:CA	1:196:K:PRO:C	10	4.13	1.4	3.92
(1,793)	1:219:G:GLN:C	1:220:G:GLY:N	1:220:G:GLY:CA	1:220:G:GLY:C	10	3.95	1.14	3.87
(1,1010)	1:238:H:VAL:C	1:239:H:THR:N	1:239:H:THR:CA	1:239:H:THR:C	10	3.95	0.67	3.76
(1,980)	1:236:H:SER:N	1:236:H:SER:CA	1:236:H:SER:C	1:237:H:GLN:N	10	3.85	1.4	4.14
(1,1018)	1:239:J:THR:N	1:239:J:THR:CA	1:239:J:THR:C	1:240:J:ASN:N	10	3.71	1.75	4.27
(1,889)	1:228:G:ALA:C	1:229:G:ARG:N	1:229:G:ARG:CA	1:229:G:ARG:C	10	3.69	0.82	3.87
(1,1044)	1:241:L:THR:N	1:241:L:THR:CA	1:241:L:THR:C	1:242:L:ALA:N	10	3.2	1.21	3.35
(1,60)	1:151:L:LEU:N	1:151:L:LEU:CA	1:151:L:LEU:C	1:152:L:ASP:N	10	3.09	1.99	3.05
(1,1013)	1:238:K:VAL:C	1:239:K:THR:N	1:239:K:THR:CA	1:239:K:THR:C	10	3.08	0.56	3.0
(1,1040)	1:241:H:THR:N	1:241:H:THR:CA	1:241:H:THR:C	1:242:H:ALA:N	10	2.92	1.33	2.8
(1,451)	1:188:G:THR:N	1:188:G:THR:CA	1:188:G:THR:C	1:189:G:LEU:N	10	2.91	0.89	2.84
(1,1039)	1:241:G:THR:N	1:241:G:THR:CA	1:241:G:THR:C	1:242:G:ALA:N	10	2.83	0.96	2.94
(1,1043)	1:241:K:THR:N	1:241:K:THR:CA	1:241:K:THR:C	1:242:K:ALA:N	10	2.67	1.33	2.7
(1,37)	1:148:G:THR:C	1:149:G:SER:N	1:149:G:SER:CA	1:149:G:SER:C	10	2.54	1.14	2.42
(1,973)	1:235:G:MET:C	1:236:G:SER:N	1:236:G:SER:CA	1:236:G:SER:C	10	2.35	0.85	2.28
(1,1016)	1:239:H:THR:N	1:239:H:THR:CA	1:239:H:THR:C	1:240:H:ASN:N	10	2.33	0.71	2.16
(1,1042)	1:241:J:THR:N	1:241:J:THR:CA	1:241:J:THR:C	1:242:J:ALA:N	10	2.31	0.99	2.5
(1,1015)	1:239:G:THR:N	1:239:G:THR:CA	1:239:G:THR:C	1:240:G:ASN:N	10	2.23	0.73	2.2
(1,529)	1:195:G:ASN:C	1:196:G:PRO:N	1:196:G:PRO:CA	1:196:G:PRO:C	10	2.23	0.46	2.19
(1,65)	1:152:K:ASP:N	1:152:K:ASP:CA	1:152:K:ASP:C	1:153:K:ILE:N	9	13.59	7.57	15.65
(1,891)	1:228:I:ALA:C	1:229:I:ARG:N	1:229:I:ARG:CA	1:229:I:ARG:C	9	9.73	1.43	10.12
(1,30)	1:147:L:PRO:N	1:147:L:PRO:CA	1:147:L:PRO:C	1:148:L:THR:N	9	9.28	3.47	10.55
(1,36)	1:147:L:PRO:C	1:148:L:THR:N	1:148:L:THR:CA	1:148:L:THR:C	9	8.27	3.56	8.53
(1,46)	1:149:J:SER:N	1:149:J:SER:CA	1:149:J:SER:C	1:150:J:ILE:N	9	8.25	3.43	9.87
(1,530)	1:195:H:ASN:C	1:196:H:PRO:N	1:196:H:PRO:CA	1:196:H:PRO:C	9	8.12	2.57	8.73
(1,483)	1:190:I:LEU:C	1:191:I:VAL:N	1:191:I:VAL:CA	1:191:I:VAL:C	9	6.59	2.61	5.89
(1,41)	1:148:K:THR:C	1:149:K:SER:N	1:149:K:SER:CA	1:149:K:SER:C	9	6.52	3.21	7.43
(1,309)	1:174:I:ALA:N	1:174:I:ALA:CA	1:174:I:ALA:C	1:175:I:GLU:N	9	6.08	2.4	6.77
(1,33)	1:147:I:PRO:C	1:148:I:THR:N	1:148:I:THR:CA	1:148:I:THR:C	9	5.57	1.25	5.47
(1,984)	1:236:L:SER:N	1:236:L:SER:CA	1:236:L:SER:C	1:237:L:GLN:N	9	5.4	2.1	5.41
(1,798)	1:219:L:GLN:C	1:220:L:GLY:N	1:220:L:GLY:CA	1:220:L:GLY:C	9	5.37	1.86	5.38
(1,1104)	1:207:L:PRO:N	1:207:L:PRO:CA	1:207:L:PRO:C	1:208:L:GLY:N	9	4.76	0.38	4.79
(1,320)	1:177:H:ALA:N	1:177:H:ALA:CA	1:177:H:ALA:C	1:178:H:SER:N	9	4.71	1.47	4.4
(1,26)	1:147:H:PRO:N	1:147:H:PRO:CA	1:147:H:PRO:C	1:148:H:THR:N	9	4.0	2.01	3.34
(1,982)	1:236:J:SER:N	1:236:J:SER:CA	1:236:J:SER:C	1:237:J:GLN:N	9	3.72	3.29	2.18
(1,426)	1:185:L:MET:C	1:186:L:THR:N	1:186:L:THR:CA	1:186:L:THR:C	9	3.58	1.89	3.27
(1,998)	1:237:H:GLN:C	1:238:H:VAL:N	1:238:H:VAL:CA	1:238:H:VAL:C	9	3.44	1.5	3.86
(1,1011)	1:238:I:VAL:C	1:239:I:THR:N	1:239:I:THR:CA	1:239:I:THR:C	9	3.26	1.1	3.11
(1,449)	1:187:K:GLU:C	1:188:K:THR:N	1:188:K:THR:CA	1:188:K:THR:C	9	3.18	1.55	3.29
(1,305)	1:173:K:ARG:C	1:174:K:ALA:N	1:174:K:ALA:CA	1:174:K:ALA:C	9	3.03	1.38	2.61
(1,1103)	1:207:K:PRO:N	1:207:K:PRO:CA	1:207:K:PRO:C	1:208:K:GLY:N	9	3.02	0.33	2.99
(1,1019)	1:239:K:THR:N	1:239:K:THR:CA	1:239:K:THR:C	1:240:K:ASN:N	9	2.65	0.85	2.7
(1,1037)	1:240:K:ASN:C	1:241:K:THR:N	1:241:K:THR:CA	1:241:K:THR:C	9	2.6	1.26	1.97
(1,894)	1:228:L:ALA:C	1:229:L:ARG:N	1:229:L:ARG:CA	1:229:L:ARG:C	9	2.47	1.13	1.79
(1,1012)	1:238:J:VAL:C	1:239:J:THR:N	1:239:J:THR:CA	1:239:J:THR:C	9	2.38	1.14	2.04
(1,534)	1:195:L:ASN:C	1:196:L:PRO:N	1:196:L:PRO:CA	1:196:L:PRO:C	9	2.35	0.97	2.2
(1,85)	1:154:G:ARG:C	1:155:G:GLN:N	1:155:G:GLN:CA	1:155:G:GLN:C	9	2.0	0.52	1.76

Continued on next page..

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Models ¹	Mean	SD ²	Median
(1,66)	1:152:L:ASP:N	1:152:L:ASP:CA	1:152:L:ASP:C	1:153:L:ILE:N	8	8.68	4.4	10.07
(1,858)	1:225:L:GLY:C	1:226:L:HIS:N	1:226:L:HIS:CA	1:226:L:HIS:C	8	7.75	0.78	8.22
(1,893)	1:228:K:ALA:C	1:229:K:ARG:N	1:229:K:ARG:CA	1:229:K:ARG:C	8	7.08	1.78	7.26
(1,532)	1:195:J:ASN:C	1:196:J:PRO:N	1:196:J:PRO:CA	1:196:J:PRO:C	8	6.16	3.29	5.24
(1,62)	1:152:H:ASP:N	1:152:H:ASP:CA	1:152:H:ASP:C	1:153:H:ILE:N	8	5.62	2.14	5.78
(1,815)	1:221:K:VAL:N	1:221:K:VAL:CA	1:221:K:VAL:C	1:222:K:GLY:N	8	5.03	1.32	5.14
(1,32)	1:147:H:PRO:C	1:148:H:THR:N	1:148:H:THR:CA	1:148:H:THR:C	8	4.63	2.49	4.62
(1,57)	1:151:I:LEU:N	1:151:I:LEU:CA	1:151:I:LEU:C	1:152:I:ASP:N	8	4.54	2.23	4.54
(1,70)	1:153:J:ILE:N	1:153:J:ILE:CA	1:153:J:ILE:C	1:154:J:ARG:N	8	4.47	1.36	4.92
(1,813)	1:221:I:VAL:N	1:221:I:VAL:CA	1:221:I:VAL:C	1:222:I:GLY:N	8	4.04	2.8	2.44
(1,675)	1:209:I:ALA:C	1:210:I:THR:N	1:210:I:THR:CA	1:210:I:THR:C	8	3.85	0.81	3.74
(1,1002)	1:237:L:GLN:C	1:238:L:VAL:N	1:238:L:VAL:CA	1:238:L:VAL:C	8	3.72	0.82	4.11
(1,669)	1:209:I:ALA:N	1:209:I:ALA:CA	1:209:I:ALA:C	1:210:I:THR:N	8	3.47	1.33	3.32
(1,1017)	1:239:I:THR:N	1:239:I:THR:CA	1:239:I:THR:C	1:240:I:ASN:N	8	3.22	0.89	3.36
(1,307)	1:174:G:ALA:N	1:174:G:ALA:CA	1:174:G:ALA:C	1:175:G:GLU:N	8	3.04	1.7	2.78
(1,895)	1:229:G:ARG:N	1:229:G:ARG:CA	1:229:G:ARG:C	1:230:G:VAL:N	8	2.97	1.27	3.46
(1,1038)	1:240:L:ASN:C	1:241:L:THR:N	1:241:L:THR:CA	1:241:L:THR:C	8	2.89	1.11	2.78
(1,444)	1:187:L:GLU:N	1:187:L:GLU:CA	1:187:L:GLU:C	1:188:L:THR:N	8	2.56	1.08	2.37
(1,175)	1:163:G:ASP:N	1:163:G:ASP:CA	1:163:G:ASP:C	1:164:G:TYR:N	8	2.23	0.89	2.14
(1,976)	1:235:J:MET:C	1:236:J:SER:N	1:236:J:SER:CA	1:236:J:SER:C	8	2.19	0.46	2.48
(1,1034)	1:240:H:ASN:C	1:241:H:THR:N	1:241:H:THR:CA	1:241:H:THR:C	8	1.85	0.66	1.62
(1,500)	1:192:H:GLN:N	1:192:H:GLN:CA	1:192:H:GLN:C	1:193:H:ASN:N	7	11.75	3.62	11.25
(1,47)	1:149:K:SER:N	1:149:K:SER:CA	1:149:K:SER:C	1:150:K:ILE:N	7	8.12	4.22	7.28
(1,310)	1:174:J:ALA:N	1:174:J:ALA:CA	1:174:J:ALA:C	1:175:J:GLU:N	7	7.11	2.07	6.32
(1,317)	1:176:K:GLN:C	1:177:K:ALA:N	1:177:K:ALA:CA	1:177:K:ALA:C	7	7.06	0.76	7.37
(1,676)	1:209:J:ALA:C	1:210:J:THR:N	1:210:J:THR:CA	1:210:J:THR:C	7	6.53	2.22	7.38
(1,501)	1:192:I:GLN:N	1:192:I:GLN:CA	1:192:I:GLN:C	1:193:I:ASN:N	7	6.48	2.17	6.09
(1,796)	1:219:J:GLN:C	1:220:J:GLY:N	1:220:J:GLY:CA	1:220:J:GLY:C	7	4.77	1.8	5.21
(1,800)	1:220:H:GLY:N	1:220:H:GLY:CA	1:220:H:GLY:C	1:221:H:VAL:N	7	4.59	1.42	4.52
(1,316)	1:176:J:GLN:C	1:177:J:ALA:N	1:177:J:ALA:CA	1:177:J:ALA:C	7	4.5	1.87	4.66
(1,447)	1:187:I:GLU:C	1:188:I:THR:N	1:188:I:THR:CA	1:188:I:THR:C	7	4.28	2.54	2.76
(1,803)	1:220:K:GLY:N	1:220:K:GLY:CA	1:220:K:GLY:C	1:221:K:VAL:N	7	4.22	2.74	2.88
(1,441)	1:187:I:GLU:N	1:187:I:GLU:CA	1:187:I:GLU:C	1:188:I:THR:N	7	4.16	1.71	4.2
(1,634)	1:204:J:ALA:N	1:204:J:ALA:CA	1:204:J:ALA:C	1:205:J:LEU:N	7	3.05	1.07	2.86
(1,896)	1:229:H:ARG:N	1:229:H:ARG:CA	1:229:H:ARG:C	1:230:H:VAL:N	7	3.04	1.19	2.83
(1,54)	1:150:L:ILE:C	1:151:L:LEU:N	1:151:L:LEU:CA	1:151:L:LEU:C	6	18.31	4.82	16.81
(1,63)	1:152:I:ASP:N	1:152:I:ASP:CA	1:152:I:ASP:C	1:153:I:ILE:N	6	11.65	5.76	14.98
(1,53)	1:150:K:ILE:C	1:151:K:LEU:N	1:151:K:LEU:CA	1:151:K:LEU:C	6	10.68	5.16	9.6
(1,797)	1:219:K:GLN:C	1:220:K:GLY:N	1:220:K:GLY:CA	1:220:K:GLY:C	6	5.94	1.46	6.04
(1,652)	1:207:J:PRO:C	1:208:J:GLY:N	1:208:J:GLY:CA	1:208:J:GLY:C	6	4.8	3.37	4.69
(1,827)	1:223:K:GLY:N	1:223:K:GLY:CA	1:223:K:GLY:C	1:224:K:PRO:N	6	4.75	1.95	4.63
(1,911)	1:230:K:VAL:N	1:230:K:VAL:CA	1:230:K:VAL:C	1:231:K:LEU:N	6	4.66	2.18	4.74
(1,677)	1:209:K:ALA:C	1:210:K:THR:N	1:210:K:THR:CA	1:210:K:THR:C	6	4.41	1.48	4.81
(1,90)	1:154:L:ARG:C	1:155:L:GLN:N	1:155:L:GLN:CA	1:155:L:GLN:C	6	4.33	2.77	3.86
(1,314)	1:176:H:GLN:C	1:177:H:ALA:N	1:177:H:ALA:CA	1:177:H:ALA:C	6	4.33	2.16	3.53
(1,410)	1:184:H:TRP:C	1:185:H:MET:N	1:185:H:MET:CA	1:185:H:MET:C	6	4.16	2.69	3.76
(1,1077)	1:175:I:GLU:N	1:175:I:GLU:CA	1:175:I:GLU:C	1:176:I:GLN:N	6	3.97	0.89	3.72
(1,764)	1:217:H:ALA:N	1:217:H:ALA:CA	1:217:H:ALA:C	1:218:H:CYS:N	6	3.67	1.67	3.08
(1,42)	1:148:L:THR:C	1:149:L:SER:N	1:149:L:SER:CA	1:149:L:SER:C	6	3.46	1.38	3.22
(1,88)	1:154:J:ARG:C	1:155:J:GLN:N	1:155:J:GLN:CA	1:155:J:GLN:C	6	3.42	1.52	3.24
(1,229)	1:167:G:ARG:C	1:168:G:PHE:N	1:168:G:PHE:CA	1:168:G:PHE:C	6	3.31	0.8	3.11

Continued on next page..

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Models ¹	Mean	SD ²	Median
(1,442)	1:187:J:GLU:N	1:187:J:GLU:CA	1:187:J:GLU:C	1:188:J:THR:N	6	3.14	1.59	2.94
(1,540)	1:196:L:PRO:N	1:196:L:PRO:CA	1:196:L:PRO:C	1:197:L:ASP:N	6	3.08	0.76	3.26
(1,1041)	1:241:I:THR:N	1:241:I:THR:CA	1:241:I:THR:C	1:242:I:ALA:N	6	3.05	0.51	3.14
(1,274)	1:171:J:THR:N	1:171:J:THR:CA	1:171:J:THR:C	1:172:J:LEU:N	6	2.84	1.09	2.46
(1,1073)	1:174:K:ALA:C	1:175:K:GLU:N	1:175:K:GLU:CA	1:175:K:GLU:C	6	2.74	1.01	2.68
(1,104)	1:157:H:PRO:N	1:157:H:PRO:CA	1:157:H:PRO:C	1:158:H:LYS:N	6	2.73	1.76	2.22
(1,326)	1:177:H:ALA:C	1:178:H:SER:N	1:178:H:SER:CA	1:178:H:SER:C	6	2.58	1.56	1.76
(1,728)	1:214:H:MET:N	1:214:H:MET:CA	1:214:H:MET:C	1:215:H:MET:N	6	2.42	0.97	2.12
(1,1035)	1:240:I:ASN:C	1:241:I:THR:N	1:241:I:THR:CA	1:241:I:THR:C	6	2.38	0.98	1.9
(1,988)	1:236:J:SER:C	1:237:J:GLN:N	1:237:J:GLN:CA	1:237:J:GLN:C	6	1.76	0.61	1.64
(1,1054)	1:243:J:THR:N	1:243:J:THR:CA	1:243:J:THR:C	1:244:J:ILE:N	6	1.24	0.11	1.28
(1,51)	1:150:I:ILE:C	1:151:I:LEU:N	1:151:I:LEU:CA	1:151:I:LEU:C	5	17.46	5.51	15.91
(1,515)	1:193:K:ASN:N	1:193:K:ASN:CA	1:193:K:ASN:C	1:194:K:ALA:N	5	8.9	7.72	7.2
(1,897)	1:229:I:ARG:N	1:229:I:ARG:CA	1:229:I:ARG:C	1:230:I:VAL:N	5	5.3	1.4	5.26
(1,868)	1:226:J:HIS:C	1:227:J:LYS:N	1:227:J:LYS:CA	1:227:J:LYS:C	5	4.78	3.43	3.21
(1,178)	1:163:J:ASP:N	1:163:J:ASP:CA	1:163:J:ASP:C	1:164:J:TYR:N	5	3.59	0.39	3.73
(1,87)	1:154:I:ARG:C	1:155:I:GLN:N	1:155:I:GLN:CA	1:155:I:GLN:C	5	3.4	0.88	3.13
(1,68)	1:153:H:ILE:N	1:153:H:ILE:CA	1:153:H:ILE:C	1:154:H:ARG:N	5	3.4	2.14	2.5
(1,243)	1:168:I:PHE:C	1:169:I:TYR:N	1:169:I:TYR:CA	1:169:I:TYR:C	5	2.98	0.91	2.79
(1,849)	1:225:I:GLY:N	1:225:I:GLY:CA	1:225:I:GLY:C	1:226:I:HIS:N	5	2.93	1.11	2.84
(1,118)	1:158:J:LYS:N	1:158:J:LYS:CA	1:158:J:LYS:C	1:159:J:GLU:N	5	2.93	0.81	2.63
(1,107)	1:157:K:PRO:N	1:157:K:PRO:CA	1:157:K:PRO:C	1:158:K:LYS:N	5	2.86	1.16	2.7
(1,921)	1:231:I:LEU:N	1:231:I:LEU:CA	1:231:I:LEU:C	1:232:I:ALA:N	5	2.82	1.18	2.79
(1,1033)	1:240:G:ASN:C	1:241:G:THR:N	1:241:G:THR:CA	1:241:G:THR:C	5	2.78	0.93	3.25
(1,1036)	1:240:J:ASN:C	1:241:J:THR:N	1:241:J:THR:CA	1:241:J:THR:C	5	2.69	1.21	3.05
(1,396)	1:183:L:ASN:N	1:183:L:ASN:CA	1:183:L:ASN:C	1:184:L:TRP:N	5	2.5	1.25	2.32
(1,155)	1:161:K:PHE:N	1:161:K:PHE:CA	1:161:K:PHE:C	1:162:K:ARG:N	5	2.49	1.13	2.12
(1,230)	1:167:H:ARG:C	1:168:H:PHE:N	1:168:H:PHE:CA	1:168:H:PHE:C	5	2.25	0.64	1.89
(1,716)	1:213:H:GLU:N	1:213:H:GLU:CA	1:213:H:GLU:C	1:214:H:MET:N	5	2.15	0.92	2.15
(1,174)	1:162:L:ARG:C	1:163:L:ASP:N	1:163:L:ASP:CA	1:163:L:ASP:C	5	2.1	0.37	2.24
(1,626)	1:203:H:LYS:C	1:204:H:ALA:N	1:204:H:ALA:CA	1:204:H:ALA:C	5	1.87	0.5	1.91
(1,758)	1:216:H:THR:C	1:217:H:ALA:N	1:217:H:ALA:CA	1:217:H:ALA:C	5	1.87	0.73	1.52
(1,433)	1:186:G:THR:C	1:187:G:GLU:N	1:187:G:GLU:CA	1:187:G:GLU:C	5	1.78	0.45	1.81
(1,40)	1:148:J:THR:C	1:149:J:SER:N	1:149:J:SER:CA	1:149:J:SER:C	4	13.18	4.42	13.71
(1,140)	1:160:H:PRO:N	1:160:H:PRO:CA	1:160:H:PRO:C	1:161:H:PHE:N	4	7.43	1.16	7.87
(1,424)	1:185:J:MET:C	1:186:J:THR:N	1:186:J:THR:CA	1:186:J:THR:C	4	6.88	3.81	5.63
(1,912)	1:230:L:VAL:N	1:230:L:VAL:CA	1:230:L:VAL:C	1:231:L:LEU:N	4	5.86	0.72	5.57
(1,903)	1:229:I:ARG:C	1:230:I:VAL:N	1:230:I:VAL:CA	1:230:I:VAL:C	4	4.71	1.25	4.41
(1,34)	1:147:J:PRO:C	1:148:J:THR:N	1:148:J:THR:CA	1:148:J:THR:C	4	4.38	1.6	4.59
(1,767)	1:217:K:ALA:N	1:217:K:ALA:CA	1:217:K:ALA:C	1:218:K:CYS:N	4	4.1	1.85	4.23
(1,759)	1:216:I:THR:C	1:217:I:ALA:N	1:217:I:ALA:CA	1:217:I:ALA:C	4	3.7	1.8	2.78
(1,519)	1:194:I:ALA:C	1:195:I:ASN:N	1:195:I:ASN:CA	1:195:I:ASN:C	4	3.54	2.69	2.64
(1,974)	1:235:H:MET:C	1:236:H:SER:N	1:236:H:SER:CA	1:236:H:SER:C	4	3.09	1.38	3.23
(1,381)	1:182:I:LYS:N	1:182:I:LYS:CA	1:182:I:LYS:C	1:183:I:ASN:N	4	2.99	0.5	3.24
(1,947)	1:233:K:GLU:N	1:233:K:GLU:CA	1:233:K:GLU:C	1:234:K:ALA:N	4	2.88	1.39	2.48
(1,975)	1:235:I:MET:C	1:236:I:SER:N	1:236:I:SER:CA	1:236:I:SER:C	4	2.86	1.97	1.92
(1,416)	1:185:H:MET:N	1:185:H:MET:CA	1:185:H:MET:C	1:186:H:THR:N	4	2.73	0.78	2.99
(1,518)	1:194:H:ALA:C	1:195:H:ASN:N	1:195:H:ASN:CA	1:195:H:ASN:C	4	2.69	1.37	2.68
(1,1080)	1:175:L:GLU:N	1:175:L:GLU:CA	1:175:L:GLU:C	1:176:L:GLN:N	4	2.58	1.24	2.09
(1,802)	1:220:J:GLY:N	1:220:J:GLY:CA	1:220:J:GLY:C	1:221:J:VAL:N	4	2.51	0.65	2.62
(1,692)	1:211:H:LEU:N	1:211:H:LEU:CA	1:211:H:LEU:C	1:212:H:GLU:N	4	1.98	0.93	1.66

Continued on next page..

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Models ¹	Mean	SD ²	Median
(1,435)	1:186:I:THR:C	1:187:I:GLU:N	1:187:I:GLU:CA	1:187:I:GLU:C	4	1.94	0.38	1.99
(1,828)	1:223:L:GLY:N	1:223:L:GLY:CA	1:223:L:GLY:C	1:224:L:PRO:N	4	1.83	0.65	1.73
(1,308)	1:174:H:ALA:N	1:174:H:ALA:CA	1:174:H:ALA:C	1:175:H:GLU:N	4	1.64	0.5	1.52
(1,156)	1:161:L:PHE:N	1:161:L:PHE:CA	1:161:L:PHE:C	1:162:L:ARG:N	4	1.59	0.37	1.66
(1,237)	1:168:I:PHE:N	1:168:I:PHE:CA	1:168:I:PHE:C	1:169:I:TYR:N	4	1.39	0.32	1.33
(1,856)	1:225:J:GLY:C	1:226:J:HIS:N	1:226:J:HIS:CA	1:226:J:HIS:C	3	15.24	1.44	16.07
(1,477)	1:190:I:LEU:N	1:190:I:LEU:CA	1:190:I:LEU:C	1:191:I:VAL:N	3	7.71	4.81	8.31
(1,808)	1:220:J:GLY:C	1:221:J:VAL:N	1:221:J:VAL:CA	1:221:J:VAL:C	3	7.53	2.48	7.21
(1,990)	1:236:L:SER:C	1:237:L:GLN:N	1:237:L:GLN:CA	1:237:L:GLN:C	3	6.57	3.8	7.94
(1,645)	1:205:I:LEU:N	1:205:I:LEU:CA	1:205:I:LEU:C	1:206:I:GLY:N	3	5.96	2.8	7.13
(1,86)	1:154:H:ARG:C	1:155:H:GLN:N	1:155:H:GLN:CA	1:155:H:GLN:C	3	5.93	0.4	5.66
(1,522)	1:194:L:ALA:C	1:195:L:ASN:N	1:195:L:ASN:CA	1:195:L:ASN:C	3	5.22	3.04	4.49
(1,508)	1:192:J:GLN:C	1:193:J:ASN:N	1:193:J:ASN:CA	1:193:J:ASN:C	3	4.97	2.41	5.9
(1,556)	1:197:J:ASP:C	1:198:J:CYS:N	1:198:J:CYS:CA	1:198:J:CYS:C	3	4.86	0.63	4.65
(1,225)	1:167:I:ARG:N	1:167:I:ARG:CA	1:167:I:ARG:C	1:168:I:PHE:N	3	4.81	0.82	4.91
(1,484)	1:190:J:LEU:C	1:191:J:VAL:N	1:191:J:VAL:CA	1:191:J:VAL:C	3	4.62	2.69	2.86
(1,839)	1:224:K:PRO:N	1:224:K:PRO:CA	1:224:K:PRO:C	1:225:K:GLY:N	3	4.58	2.41	5.94
(1,29)	1:147:K:PRO:N	1:147:K:PRO:CA	1:147:K:PRO:C	1:148:K:THR:N	3	4.07	2.18	3.74
(1,436)	1:186:J:THR:C	1:187:J:GLU:N	1:187:J:GLU:CA	1:187:J:GLU:C	3	3.96	1.08	3.26
(1,580)	1:199:J:LYS:C	1:200:J:THR:N	1:200:J:THR:CA	1:200:J:THR:C	3	3.94	1.84	2.91
(1,269)	1:170:K:LYS:C	1:171:K:THR:N	1:171:K:THR:CA	1:171:K:THR:C	3	3.9	0.86	3.52
(1,119)	1:158:K:LYS:N	1:158:K:LYS:CA	1:158:K:LYS:C	1:159:K:GLU:N	3	3.82	0.76	3.89
(1,825)	1:223:I:GLY:N	1:223:I:GLY:CA	1:223:I:GLY:C	1:224:I:PRO:N	3	3.77	2.46	2.21
(1,231)	1:167:I:ARG:C	1:168:I:PHE:N	1:168:I:PHE:CA	1:168:I:PHE:C	3	3.67	1.45	3.94
(1,978)	1:235:L:MET:C	1:236:L:SER:N	1:236:L:SER:CA	1:236:L:SER:C	3	3.65	1.8	3.61
(1,1079)	1:175:K:GLU:N	1:175:K:GLU:CA	1:175:K:GLU:C	1:176:K:GLN:N	3	3.58	0.48	3.37
(1,814)	1:221:J:VAL:N	1:221:J:VAL:CA	1:221:J:VAL:C	1:222:J:GLY:N	3	3.41	0.43	3.5
(1,640)	1:204:J:ALA:C	1:205:J:LEU:N	1:205:J:LEU:CA	1:205:J:LEU:C	3	3.25	0.51	3.12
(1,404)	1:184:H:TRP:N	1:184:H:TRP:CA	1:184:H:TRP:C	1:185:H:MET:N	3	3.14	1.87	2.38
(1,906)	1:229:L:ARG:C	1:230:L:VAL:N	1:230:L:VAL:CA	1:230:L:VAL:C	3	3.14	0.47	3.45
(1,495)	1:191:I:VAL:C	1:192:I:GLN:N	1:192:I:GLN:CA	1:192:I:GLN:C	3	3.0	0.6	2.72
(1,820)	1:222:J:GLY:N	1:222:J:GLY:CA	1:222:J:GLY:C	1:223:J:GLY:N	3	2.99	0.56	3.32
(1,823)	1:223:G:GLY:N	1:223:G:GLY:CA	1:223:G:GLY:C	1:224:G:PRO:N	3	2.6	1.0	2.96
(1,384)	1:182:L:LYS:N	1:182:L:LYS:CA	1:182:L:LYS:C	1:183:L:ASN:N	3	2.53	1.1	2.49
(1,492)	1:191:L:VAL:N	1:191:L:VAL:CA	1:191:L:VAL:C	1:192:L:GLN:N	3	2.51	1.09	2.22
(1,476)	1:190:H:LEU:N	1:190:H:LEU:CA	1:190:H:LEU:C	1:191:H:VAL:N	3	2.46	1.52	1.51
(1,72)	1:153:L:ILE:N	1:153:L:ILE:CA	1:153:L:ILE:C	1:154:L:ARG:N	3	2.42	1.1	1.81
(1,242)	1:168:H:PHE:C	1:169:H:TYR:N	1:169:H:TYR:CA	1:169:H:TYR:C	3	2.22	0.56	2.38
(1,71)	1:153:K:ILE:N	1:153:K:ILE:CA	1:153:K:ILE:C	1:154:K:ARG:N	3	2.18	0.66	1.72
(1,907)	1:230:G:VAL:N	1:230:G:VAL:CA	1:230:G:VAL:C	1:231:G:LEU:N	3	2.17	1.42	1.23
(1,284)	1:172:H:LEU:N	1:172:H:LEU:CA	1:172:H:LEU:C	1:173:H:ARG:N	3	2.11	0.24	2.17
(1,693)	1:211:I:LEU:N	1:211:I:LEU:CA	1:211:I:LEU:C	1:212:I:GLU:N	3	2.07	0.51	1.72
(1,636)	1:204:L:ALA:N	1:204:L:ALA:CA	1:204:L:ALA:C	1:205:L:LEU:N	3	2.06	1.05	1.49
(1,182)	1:163:H:ASP:C	1:164:H:TYR:N	1:164:H:TYR:CA	1:164:H:TYR:C	3	1.99	0.7	1.92
(1,658)	1:208:J:GLY:N	1:208:J:GLY:CA	1:208:J:GLY:C	1:209:J:ALA:N	3	1.99	0.68	1.55
(1,20)	1:146:H:SER:C	1:147:H:PRO:N	1:147:H:PRO:CA	1:147:H:PRO:C	3	1.91	0.14	1.98
(1,172)	1:162:J:ARG:C	1:163:J:ASP:N	1:163:J:ASP:CA	1:163:J:ASP:C	3	1.85	0.52	2.02
(1,455)	1:188:K:THR:N	1:188:K:THR:CA	1:188:K:THR:C	1:189:K:LEU:N	3	1.73	0.27	1.6
(1,536)	1:196:H:PRO:N	1:196:H:PRO:CA	1:196:H:PRO:C	1:197:H:ASP:N	3	1.6	0.32	1.53
(1,1094)	1:206:H:GLY:C	1:207:H:PRO:N	1:207:H:PRO:CA	1:207:H:PRO:C	3	1.48	0.6	1.09
(1,318)	1:176:L:GLN:C	1:177:L:ALA:N	1:177:L:ALA:CA	1:177:L:ALA:C	3	1.43	0.08	1.45

Continued on next page..

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Models ¹	Mean	SD ²	Median
(1,52)	1:150:J:ILE:C	1:151:J:LEU:N	1:151:J:LEU:CA	1:151:J:LEU:C	3	1.09	0.08	1.06
(1,50)	1:150:H:ILE:C	1:151:H:LEU:N	1:151:H:LEU:CA	1:151:H:LEU:C	2	17.82	3.6	17.82
(1,795)	1:219:I:GLN:C	1:220:I:GLY:N	1:220:I:GLY:CA	1:220:I:GLY:C	2	5.8	2.11	5.8
(1,516)	1:193:L:ASN:N	1:193:L:ASN:CA	1:193:L:ASN:C	1:194:L:ALA:N	2	5.65	0.96	5.65
(1,513)	1:193:I:ASN:N	1:193:I:ASN:CA	1:193:I:ASN:C	1:194:I:ALA:N	2	5.62	1.76	5.62
(1,615)	1:202:I:LEU:C	1:203:I:LYS:N	1:203:I:LYS:CA	1:203:I:LYS:C	2	5.0	0.58	5.0
(1,843)	1:224:I:PRO:C	1:225:I:GLY:N	1:225:I:GLY:CA	1:225:I:GLY:C	2	4.98	2.4	4.98
(1,538)	1:196:J:PRO:N	1:196:J:PRO:CA	1:196:J:PRO:C	1:197:J:ASP:N	2	4.78	0.46	4.78
(1,488)	1:191:H:VAL:N	1:191:H:VAL:CA	1:191:H:VAL:C	1:192:H:GLN:N	2	4.5	1.76	4.5
(1,857)	1:225:K:GLY:C	1:226:K:HIS:N	1:226:K:HIS:CA	1:226:K:HIS:C	2	4.38	1.31	4.38
(1,900)	1:229:L:ARG:N	1:229:L:ARG:CA	1:229:L:ARG:C	1:230:L:VAL:N	2	3.99	0.46	3.99
(1,845)	1:224:K:PRO:C	1:225:K:GLY:N	1:225:K:GLY:CA	1:225:K:GLY:C	2	3.94	2.74	3.94
(1,832)	1:223:J:GLY:C	1:224:J:PRO:N	1:224:J:PRO:CA	1:224:J:PRO:C	2	3.79	0.66	3.79
(1,873)	1:227:I:LYS:N	1:227:I:LYS:CA	1:227:I:LYS:C	1:228:I:ALA:N	2	3.79	2.3	3.79
(1,694)	1:211:J:LEU:N	1:211:J:LEU:CA	1:211:J:LEU:C	1:212:J:GLU:N	2	3.78	2.68	3.78
(1,851)	1:225:K:GLY:N	1:225:K:GLY:CA	1:225:K:GLY:C	1:226:K:HIS:N	2	3.77	1.74	3.77
(1,494)	1:191:H:VAL:C	1:192:H:GLN:N	1:192:H:GLN:CA	1:192:H:GLN:C	2	3.62	0.67	3.62
(1,56)	1:151:H:LEU:N	1:151:H:LEU:CA	1:151:H:LEU:C	1:152:H:ASP:N	2	3.46	1.74	3.46
(1,741)	1:215:I:MET:N	1:215:I:MET:CA	1:215:I:MET:C	1:216:I:THR:N	2	3.41	0.04	3.41
(1,232)	1:167:J:ARG:C	1:168:J:PHE:N	1:168:J:PHE:CA	1:168:J:PHE:C	2	3.4	0.64	3.4
(1,437)	1:186:K:THR:C	1:187:K:GLU:N	1:187:K:GLU:CA	1:187:K:GLU:C	2	3.33	1.08	3.33
(1,188)	1:164:H:TYR:N	1:164:H:TYR:CA	1:164:H:TYR:C	1:165:H:VAL:N	2	3.22	1.54	3.22
(1,499)	1:192:G:GLN:N	1:192:G:GLN:CA	1:192:G:GLN:C	1:193:G:ASN:N	2	3.19	2.01	3.19
(1,608)	1:202:H:LEU:N	1:202:H:LEU:CA	1:202:H:LEU:C	1:203:H:LYS:N	2	3.18	1.63	3.18
(1,830)	1:223:H:GLY:C	1:224:H:PRO:N	1:224:H:PRO:CA	1:224:H:PRO:C	2	3.07	0.69	3.07
(1,58)	1:151:J:LEU:N	1:151:J:LEU:CA	1:151:J:LEU:C	1:152:J:ASP:N	2	2.97	1.58	2.97
(1,1101)	1:207:I:PRO:N	1:207:I:PRO:CA	1:207:I:PRO:C	1:208:I:GLY:N	2	2.94	0.01	2.94
(1,1072)	1:174:J:ALA:C	1:175:J:GLU:N	1:175:J:GLU:CA	1:175:J:GLU:C	2	2.84	0.38	2.84
(1,136)	1:159:J:GLU:C	1:160:J:PRO:N	1:160:J:PRO:CA	1:160:J:PRO:C	2	2.74	1.38	2.74
(1,673)	1:209:G:ALA:C	1:210:G:THR:N	1:210:G:THR:CA	1:210:G:THR:C	2	2.72	0.86	2.72
(1,327)	1:177:I:ALA:C	1:178:I:SER:N	1:178:I:SER:CA	1:178:I:SER:C	2	2.68	0.13	2.68
(1,831)	1:223:I:GLY:C	1:224:I:PRO:N	1:224:I:PRO:CA	1:224:I:PRO:C	2	2.64	0.92	2.64
(1,512)	1:193:H:ASN:N	1:193:H:ASN:CA	1:193:H:ASN:C	1:194:H:ALA:N	2	2.56	1.35	2.56
(1,478)	1:190:J:LEU:N	1:190:J:LEU:CA	1:190:J:LEU:C	1:191:J:VAL:N	2	2.54	0.87	2.54
(1,125)	1:158:K:LYS:C	1:159:K:GLU:N	1:159:K:GLU:CA	1:159:K:GLU:C	2	2.52	0.77	2.52
(1,864)	1:226:L:HIS:N	1:226:L:HIS:CA	1:226:L:HIS:C	1:227:L:LYS:N	2	2.42	1.1	2.42
(1,315)	1:176:I:GLN:C	1:177:I:ALA:N	1:177:I:ALA:CA	1:177:I:ALA:C	2	2.36	0.46	2.36
(1,454)	1:188:J:THR:N	1:188:J:THR:CA	1:188:J:THR:C	1:189:J:LEU:N	2	2.32	0.62	2.32
(1,663)	1:208:I:GLY:C	1:209:I:ALA:N	1:209:I:ALA:CA	1:209:I:ALA:C	2	2.07	0.83	2.07
(1,311)	1:174:K:ALA:N	1:174:K:ALA:CA	1:174:K:ALA:C	1:175:K:GLU:N	2	2.05	0.11	2.05
(1,273)	1:171:I:THR:N	1:171:I:THR:CA	1:171:I:THR:C	1:172:I:LEU:N	2	1.92	0.49	1.92
(1,1056)	1:243:L:THR:N	1:243:L:THR:CA	1:243:L:THR:C	1:244:L:ILE:N	2	1.78	0.15	1.78
(1,191)	1:164:K:TYR:N	1:164:K:TYR:CA	1:164:K:TYR:C	1:165:K:VAL:N	2	1.76	0.19	1.76
(1,431)	1:186:K:THR:N	1:186:K:THR:CA	1:186:K:THR:C	1:187:K:GLU:N	2	1.76	0.5	1.76
(1,826)	1:223:J:GLY:N	1:223:J:GLY:CA	1:223:J:GLY:C	1:224:J:PRO:N	2	1.74	0.02	1.74
(1,143)	1:160:K:PRO:N	1:160:K:PRO:CA	1:160:K:PRO:C	1:161:K:PHE:N	2	1.66	0.02	1.66
(1,672)	1:209:L:ALA:N	1:209:L:ALA:CA	1:209:L:ALA:C	1:210:L:THR:N	2	1.62	0.52	1.62
(1,1053)	1:243:I:THR:N	1:243:I:THR:CA	1:243:I:THR:C	1:244:I:ILE:N	2	1.46	0.44	1.46
(1,699)	1:211:I:LEU:C	1:212:I:GLU:N	1:212:I:GLU:CA	1:212:I:GLU:C	2	1.4	0.12	1.4
(1,671)	1:209:K:ALA:N	1:209:K:ALA:CA	1:209:K:ALA:C	1:210:K:THR:N	2	1.38	0.06	1.38
(1,301)	1:173:G:ARG:C	1:174:G:ALA:N	1:174:G:ALA:CA	1:174:G:ALA:C	2	1.34	0.09	1.34

Continued on next page..

Continued from previous page...

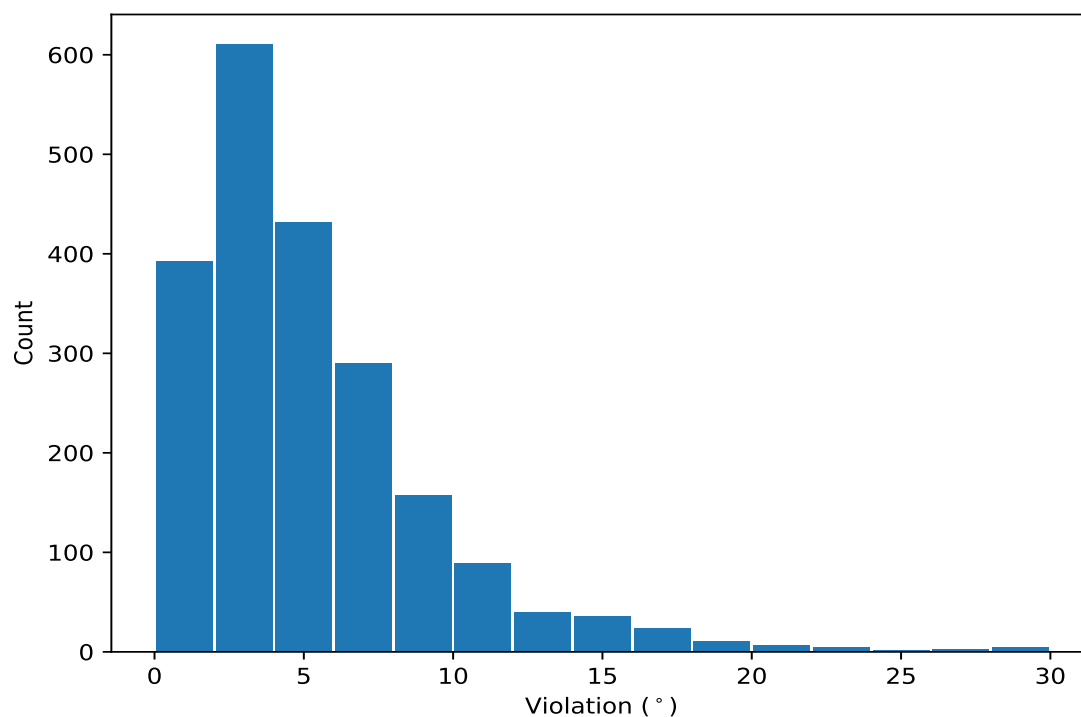
Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Models ¹	Mean	SD ²	Median
(1,905)	1:229:K:ARG:C	1:230:K:VAL:N	1:230:K:VAL:CA	1:230:K:VAL:C	2	1.26	0.04	1.26
(1,946)	1:233:J:GLU:N	1:233:J:GLU:CA	1:233:J:GLU:C	1:234:J:ALA:N	2	1.16	0.1	1.16
(1,179)	1:163:K:ASP:N	1:163:K:ASP:CA	1:163:K:ASP:C	1:164:K:TYR:N	2	1.13	0.06	1.13

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 (°)
(1,525)	1:195:I:ASN:N	1:195:I:ASN:CA	1:195:I:ASN:C	1:196:I:PRO:N	10	28.71
(1,526)	1:195:J:ASN:N	1:195:J:ASN:CA	1:195:J:ASN:C	1:196:J:PRO:N	8	28.43
(1,54)	1:150:L:ILE:C	1:151:L:LEU:N	1:151:L:LEU:CA	1:151:L:LEU:C	8	28.36
(1,526)	1:195:J:ASN:N	1:195:J:ASN:CA	1:195:J:ASN:C	1:196:J:PRO:N	3	28.32

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,525)	1:195:I:ASN:N	1:195:I:ASN:CA	1:195:I:ASN:C	1:196:I:PRO:N	1	28.06
(1,526)	1:195:J:ASN:N	1:195:J:ASN:CA	1:195:J:ASN:C	1:196:J:PRO:N	7	27.99
(1,526)	1:195:J:ASN:N	1:195:J:ASN:CA	1:195:J:ASN:C	1:196:J:PRO:N	4	27.69
(1,526)	1:195:J:ASN:N	1:195:J:ASN:CA	1:195:J:ASN:C	1:196:J:PRO:N	6	26.76
(1,51)	1:150:I:ILE:C	1:151:I:LEU:N	1:151:I:LEU:CA	1:151:I:LEU:C	6	25.79
(1,65)	1:152:K:ASP:N	1:152:K:ASP:CA	1:152:K:ASP:C	1:153:K:ILE:N	10	25.44
(1,525)	1:195:I:ASN:N	1:195:I:ASN:CA	1:195:I:ASN:C	1:196:I:PRO:N	3	23.89
(1,525)	1:195:I:ASN:N	1:195:I:ASN:CA	1:195:I:ASN:C	1:196:I:PRO:N	7	23.06
(1,528)	1:195:L:ASN:N	1:195:L:ASN:CA	1:195:L:ASN:C	1:196:L:PRO:N	9	22.44
(1,528)	1:195:L:ASN:N	1:195:L:ASN:CA	1:195:L:ASN:C	1:196:L:PRO:N	1	22.33
(1,65)	1:152:K:ASP:N	1:152:K:ASP:CA	1:152:K:ASP:C	1:153:K:ILE:N	9	22.15
(1,526)	1:195:J:ASN:N	1:195:J:ASN:CA	1:195:J:ASN:C	1:196:J:PRO:N	5	21.91
(1,515)	1:193:K:ASN:N	1:193:K:ASN:CA	1:193:K:ASN:C	1:194:K:ALA:N	5	21.89
(1,525)	1:195:I:ASN:N	1:195:I:ASN:CA	1:195:I:ASN:C	1:196:I:PRO:N	2	21.78
(1,51)	1:150:I:ILE:C	1:151:I:LEU:N	1:151:I:LEU:CA	1:151:I:LEU:C	1	21.65
(1,50)	1:150:H:ILE:C	1:151:H:LEU:N	1:151:H:LEU:CA	1:151:H:LEU:C	9	21.41
(1,525)	1:195:I:ASN:N	1:195:I:ASN:CA	1:195:I:ASN:C	1:196:I:PRO:N	5	20.8
(1,527)	1:195:K:ASN:N	1:195:K:ASN:CA	1:195:K:ASN:C	1:196:K:PRO:N	2	20.74
(1,526)	1:195:J:ASN:N	1:195:J:ASN:CA	1:195:J:ASN:C	1:196:J:PRO:N	1	19.86
(1,53)	1:150:K:ILE:C	1:151:K:LEU:N	1:151:K:LEU:CA	1:151:K:LEU:C	8	19.72
(1,526)	1:195:J:ASN:N	1:195:J:ASN:CA	1:195:J:ASN:C	1:196:J:PRO:N	2	19.62
(1,54)	1:150:L:ILE:C	1:151:L:LEU:N	1:151:L:LEU:CA	1:151:L:LEU:C	9	19.18
(1,524)	1:195:H:ASN:N	1:195:H:ASN:CA	1:195:H:ASN:C	1:196:H:PRO:N	6	19.08
(1,528)	1:195:L:ASN:N	1:195:L:ASN:CA	1:195:L:ASN:C	1:196:L:PRO:N	10	18.99
(1,40)	1:148:J:THR:C	1:149:J:SER:N	1:149:J:SER:CA	1:149:J:SER:C	6	18.66
(1,523)	1:195:G:ASN:N	1:195:G:ASN:CA	1:195:G:ASN:C	1:196:G:PRO:N	5	18.64
(1,523)	1:195:G:ASN:N	1:195:G:ASN:CA	1:195:G:ASN:C	1:196:G:PRO:N	7	18.32
(1,525)	1:195:I:ASN:N	1:195:I:ASN:CA	1:195:I:ASN:C	1:196:I:PRO:N	9	18.3
(1,526)	1:195:J:ASN:N	1:195:J:ASN:CA	1:195:J:ASN:C	1:196:J:PRO:N	9	18.18
(1,523)	1:195:G:ASN:N	1:195:G:ASN:CA	1:195:G:ASN:C	1:196:G:PRO:N	6	17.92
(1,523)	1:195:G:ASN:N	1:195:G:ASN:CA	1:195:G:ASN:C	1:196:G:PRO:N	3	17.71
(1,54)	1:150:L:ILE:C	1:151:L:LEU:N	1:151:L:LEU:CA	1:151:L:LEU:C	2	17.68
(1,528)	1:195:L:ASN:N	1:195:L:ASN:CA	1:195:L:ASN:C	1:196:L:PRO:N	2	17.63
(1,523)	1:195:G:ASN:N	1:195:G:ASN:CA	1:195:G:ASN:C	1:196:G:PRO:N	2	17.58
(1,523)	1:195:G:ASN:N	1:195:G:ASN:CA	1:195:G:ASN:C	1:196:G:PRO:N	1	17.55
(1,523)	1:195:G:ASN:N	1:195:G:ASN:CA	1:195:G:ASN:C	1:196:G:PRO:N	8	17.06
(1,48)	1:149:L:SER:N	1:149:L:SER:CA	1:149:L:SER:C	1:150:L:ILE:N	4	16.99
(1,523)	1:195:G:ASN:N	1:195:G:ASN:CA	1:195:G:ASN:C	1:196:G:PRO:N	4	16.96
(1,500)	1:192:H:GLN:N	1:192:H:GLN:CA	1:192:H:GLN:C	1:193:H:ASN:N	10	16.8
(1,528)	1:195:L:ASN:N	1:195:L:ASN:CA	1:195:L:ASN:C	1:196:L:PRO:N	5	16.77
(1,527)	1:195:K:ASN:N	1:195:K:ASN:CA	1:195:K:ASN:C	1:196:K:PRO:N	5	16.66
(1,528)	1:195:L:ASN:N	1:195:L:ASN:CA	1:195:L:ASN:C	1:196:L:PRO:N	7	16.58
(1,65)	1:152:K:ASP:N	1:152:K:ASP:CA	1:152:K:ASP:C	1:153:K:ILE:N	8	16.56
(1,528)	1:195:L:ASN:N	1:195:L:ASN:CA	1:195:L:ASN:C	1:196:L:PRO:N	6	16.55
(1,63)	1:152:I:ASP:N	1:152:I:ASP:CA	1:152:I:ASP:C	1:153:I:ILE:N	1	16.55
(1,448)	1:187:J:GLU:C	1:188:J:THR:N	1:188:J:THR:CA	1:188:J:THR:C	1	16.46
(1,856)	1:225:J:GLY:C	1:226:J:HIS:N	1:226:J:HIS:CA	1:226:J:HIS:C	8	16.44
(1,48)	1:149:L:SER:N	1:149:L:SER:CA	1:149:L:SER:C	1:150:L:ILE:N	3	16.27
(1,65)	1:152:K:ASP:N	1:152:K:ASP:CA	1:152:K:ASP:C	1:153:K:ILE:N	6	16.15
(1,523)	1:195:G:ASN:N	1:195:G:ASN:CA	1:195:G:ASN:C	1:196:G:PRO:N	9	16.13
(1,482)	1:190:H:LEU:C	1:191:H:VAL:N	1:191:H:VAL:CA	1:191:H:VAL:C	9	16.09

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,856)	1:225:J:GLY:C	1:226:J:HIS:N	1:226:J:HIS:CA	1:226:J:HIS:C	4	16.07
(1,528)	1:195:L:ASN:N	1:195:L:ASN:CA	1:195:L:ASN:C	1:196:L:PRO:N	8	16.07
(1,63)	1:152:I:ASP:N	1:152:I:ASP:CA	1:152:I:ASP:C	1:153:I:ILE:N	2	15.99
(1,54)	1:150:L:ILE:C	1:151:L:LEU:N	1:151:L:LEU:CA	1:151:L:LEU:C	6	15.95
(1,63)	1:152:I:ASP:N	1:152:I:ASP:CA	1:152:I:ASP:C	1:153:I:ILE:N	4	15.94
(1,51)	1:150:I:ILE:C	1:151:I:LEU:N	1:151:I:LEU:CA	1:151:I:LEU:C	4	15.91
(1,523)	1:195:G:ASN:N	1:195:G:ASN:CA	1:195:G:ASN:C	1:196:G:PRO:N	10	15.83
(1,525)	1:195:I:ASN:N	1:195:I:ASN:CA	1:195:I:ASN:C	1:196:I:PRO:N	6	15.81
(1,65)	1:152:K:ASP:N	1:152:K:ASP:CA	1:152:K:ASP:C	1:153:K:ILE:N	5	15.65
(1,527)	1:195:K:ASN:N	1:195:K:ASN:CA	1:195:K:ASN:C	1:196:K:PRO:N	7	15.58
(1,525)	1:195:I:ASN:N	1:195:I:ASN:CA	1:195:I:ASN:C	1:196:I:PRO:N	8	15.56
(1,526)	1:195:J:ASN:N	1:195:J:ASN:CA	1:195:J:ASN:C	1:196:J:PRO:N	10	15.55
(1,39)	1:148:I:THR:C	1:149:I:SER:N	1:149:I:SER:CA	1:149:I:SER:C	8	15.5
(1,524)	1:195:H:ASN:N	1:195:H:ASN:CA	1:195:H:ASN:C	1:196:H:PRO:N	2	15.3
(1,40)	1:148:J:THR:C	1:149:J:SER:N	1:149:J:SER:CA	1:149:J:SER:C	2	15.28
(1,524)	1:195:H:ASN:N	1:195:H:ASN:CA	1:195:H:ASN:C	1:196:H:PRO:N	3	15.01
(1,890)	1:228:H:ALA:C	1:229:H:ARG:N	1:229:H:ARG:CA	1:229:H:ARG:C	5	14.99
(1,47)	1:149:K:SER:N	1:149:K:SER:CA	1:149:K:SER:C	1:150:K:ILE:N	6	14.98
(1,528)	1:195:L:ASN:N	1:195:L:ASN:CA	1:195:L:ASN:C	1:196:L:PRO:N	3	14.97
(1,448)	1:187:J:GLU:C	1:188:J:THR:N	1:188:J:THR:CA	1:188:J:THR:C	9	14.95
(1,43)	1:149:G:SER:N	1:149:G:SER:CA	1:149:G:SER:C	1:150:G:ILE:N	4	14.72
(1,500)	1:192:H:GLN:N	1:192:H:GLN:CA	1:192:H:GLN:C	1:193:H:ASN:N	1	14.68
(1,528)	1:195:L:ASN:N	1:195:L:ASN:CA	1:195:L:ASN:C	1:196:L:PRO:N	4	14.56
(1,30)	1:147:L:PRO:N	1:147:L:PRO:CA	1:147:L:PRO:C	1:148:L:THR:N	2	14.56
(1,524)	1:195:H:ASN:N	1:195:H:ASN:CA	1:195:H:ASN:C	1:196:H:PRO:N	8	14.55
(1,54)	1:150:L:ILE:C	1:151:L:LEU:N	1:151:L:LEU:CA	1:151:L:LEU:C	10	14.54
(1,65)	1:152:K:ASP:N	1:152:K:ASP:CA	1:152:K:ASP:C	1:153:K:ILE:N	2	14.5
(1,43)	1:149:G:SER:N	1:149:G:SER:CA	1:149:G:SER:C	1:150:G:ILE:N	6	14.5
(1,43)	1:149:G:SER:N	1:149:G:SER:CA	1:149:G:SER:C	1:150:G:ILE:N	8	14.32
(1,69)	1:153:I:ILE:N	1:153:I:ILE:CA	1:153:I:ILE:C	1:154:I:ARG:N	1	14.31
(1,43)	1:149:G:SER:N	1:149:G:SER:CA	1:149:G:SER:C	1:150:G:ILE:N	2	14.31
(1,50)	1:150:H:ILE:C	1:151:H:LEU:N	1:151:H:LEU:CA	1:151:H:LEU:C	2	14.22
(1,46)	1:149:J:SER:N	1:149:J:SER:CA	1:149:J:SER:C	1:150:J:ILE:N	5	14.22
(1,44)	1:149:H:SER:N	1:149:H:SER:CA	1:149:H:SER:C	1:150:H:ILE:N	8	14.2
(1,54)	1:150:L:ILE:C	1:151:L:LEU:N	1:151:L:LEU:CA	1:151:L:LEU:C	7	14.13
(1,500)	1:192:H:GLN:N	1:192:H:GLN:CA	1:192:H:GLN:C	1:193:H:ASN:N	6	14.11
(1,63)	1:152:I:ASP:N	1:152:I:ASP:CA	1:152:I:ASP:C	1:153:I:ILE:N	3	14.03
(1,837)	1:224:I:PRO:N	1:224:I:PRO:CA	1:224:I:PRO:C	1:225:I:GLY:N	7	14.01
(1,53)	1:150:K:ILE:C	1:151:K:LEU:N	1:151:K:LEU:CA	1:151:K:LEU:C	10	13.95
(1,890)	1:228:H:ALA:C	1:229:H:ARG:N	1:229:H:ARG:CA	1:229:H:ARG:C	1	13.83
(1,36)	1:147:L:PRO:C	1:148:L:THR:N	1:148:L:THR:CA	1:148:L:THR:C	6	13.72
(1,524)	1:195:H:ASN:N	1:195:H:ASN:CA	1:195:H:ASN:C	1:196:H:PRO:N	7	13.68
(1,48)	1:149:L:SER:N	1:149:L:SER:CA	1:149:L:SER:C	1:150:L:ILE:N	7	13.67
(1,47)	1:149:K:SER:N	1:149:K:SER:CA	1:149:K:SER:C	1:150:K:ILE:N	5	13.65
(1,532)	1:195:J:ASN:C	1:196:J:PRO:N	1:196:J:PRO:CA	1:196:J:PRO:C	6	13.62
(1,448)	1:187:J:GLU:C	1:188:J:THR:N	1:188:J:THR:CA	1:188:J:THR:C	8	13.53
(1,43)	1:149:G:SER:N	1:149:G:SER:CA	1:149:G:SER:C	1:150:G:ILE:N	1	13.46
(1,524)	1:195:H:ASN:N	1:195:H:ASN:CA	1:195:H:ASN:C	1:196:H:PRO:N	4	13.39
(1,890)	1:228:H:ALA:C	1:229:H:ARG:N	1:229:H:ARG:CA	1:229:H:ARG:C	4	13.37
(1,66)	1:152:L:ASP:N	1:152:L:ASP:CA	1:152:L:ASP:C	1:153:L:ILE:N	7	13.34
(1,477)	1:190:I:LEU:N	1:190:I:LEU:CA	1:190:I:LEU:C	1:191:I:VAL:N	1	13.28

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,890)	1:228:H:ALA:C	1:229:H:ARG:N	1:229:H:ARG:CA	1:229:H:ARG:C	9	13.23
(1,856)	1:225:J:GLY:C	1:226:J:HIS:N	1:226:J:HIS:CA	1:226:J:HIS:C	9	13.22
(1,66)	1:152:L:ASP:N	1:152:L:ASP:CA	1:152:L:ASP:C	1:153:L:ILE:N	6	13.21
(1,39)	1:148:I:THR:C	1:149:I:SER:N	1:149:I:SER:CA	1:149:I:SER:C	1	13.08
(1,30)	1:147:L:PRO:N	1:147:L:PRO:CA	1:147:L:PRO:C	1:148:L:THR:N	6	13.07
(1,890)	1:228:H:ALA:C	1:229:H:ARG:N	1:229:H:ARG:CA	1:229:H:ARG:C	7	13.06
(1,890)	1:228:H:ALA:C	1:229:H:ARG:N	1:229:H:ARG:CA	1:229:H:ARG:C	10	13.06
(1,448)	1:187:J:GLU:C	1:188:J:THR:N	1:188:J:THR:CA	1:188:J:THR:C	4	13.05
(1,424)	1:185:J:MET:C	1:186:J:THR:N	1:186:J:THR:CA	1:186:J:THR:C	7	13.02
(1,51)	1:150:I:ILE:C	1:151:I:LEU:N	1:151:I:LEU:CA	1:151:I:LEU:C	3	12.98
(1,28)	1:147:J:PRO:N	1:147:J:PRO:CA	1:147:J:PRO:C	1:148:J:THR:N	6	12.87
(1,36)	1:147:L:PRO:C	1:148:L:THR:N	1:148:L:THR:CA	1:148:L:THR:C	2	12.8
(1,48)	1:149:L:SER:N	1:149:L:SER:CA	1:149:L:SER:C	1:150:L:ILE:N	1	12.64
(1,38)	1:148:H:THR:C	1:149:H:SER:N	1:149:H:SER:CA	1:149:H:SER:C	5	12.63
(1,515)	1:193:K:ASN:N	1:193:K:ASN:CA	1:193:K:ASN:C	1:194:K:ALA:N	3	12.6
(1,43)	1:149:G:SER:N	1:149:G:SER:CA	1:149:G:SER:C	1:150:G:ILE:N	9	12.54
(1,527)	1:195:K:ASN:N	1:195:K:ASN:CA	1:195:K:ASN:C	1:196:K:PRO:N	3	12.53
(1,483)	1:190:I:LEU:C	1:191:I:VAL:N	1:191:I:VAL:CA	1:191:I:VAL:C	1	12.46
(1,45)	1:149:I:SER:N	1:149:I:SER:CA	1:149:I:SER:C	1:150:I:ILE:N	3	12.37
(1,45)	1:149:I:SER:N	1:149:I:SER:CA	1:149:I:SER:C	1:150:I:ILE:N	10	12.37
(1,890)	1:228:H:ALA:C	1:229:H:ARG:N	1:229:H:ARG:CA	1:229:H:ARG:C	2	12.25
(1,64)	1:152:J:ASP:N	1:152:J:ASP:CA	1:152:J:ASP:C	1:153:J:ILE:N	6	12.23
(1,39)	1:148:I:THR:C	1:149:I:SER:N	1:149:I:SER:CA	1:149:I:SER:C	2	12.22
(1,40)	1:148:J:THR:C	1:149:J:SER:N	1:149:J:SER:CA	1:149:J:SER:C	8	12.14
(1,53)	1:150:K:ILE:C	1:151:K:LEU:N	1:151:K:LEU:CA	1:151:K:LEU:C	9	12.05
(1,524)	1:195:H:ASN:N	1:195:H:ASN:CA	1:195:H:ASN:C	1:196:H:PRO:N	10	12.03
(1,632)	1:204:H:ALA:N	1:204:H:ALA:CA	1:204:H:ALA:C	1:205:H:LEU:N	10	12.01
(1,45)	1:149:I:SER:N	1:149:I:SER:CA	1:149:I:SER:C	1:150:I:ILE:N	2	11.9
(1,44)	1:149:H:SER:N	1:149:H:SER:CA	1:149:H:SER:C	1:150:H:ILE:N	7	11.88
(1,43)	1:149:G:SER:N	1:149:G:SER:CA	1:149:G:SER:C	1:150:G:ILE:N	7	11.85
(1,1047)	1:242:I:ALA:C	1:243:I:THR:N	1:243:I:THR:CA	1:243:I:THR:C	1	11.65
(1,44)	1:149:H:SER:N	1:149:H:SER:CA	1:149:H:SER:C	1:150:H:ILE:N	4	11.65
(1,1047)	1:242:I:ALA:C	1:243:I:THR:N	1:243:I:THR:CA	1:243:I:THR:C	4	11.64
(1,1047)	1:242:I:ALA:C	1:243:I:THR:N	1:243:I:THR:CA	1:243:I:THR:C	7	11.64
(1,1049)	1:242:K:ALA:C	1:243:K:THR:N	1:243:K:THR:CA	1:243:K:THR:C	3	11.62
(1,66)	1:152:L:ASP:N	1:152:L:ASP:CA	1:152:L:ASP:C	1:153:L:ILE:N	10	11.5
(1,312)	1:174:L:ALA:N	1:174:L:ALA:CA	1:174:L:ALA:C	1:175:L:GLU:N	6	11.44
(1,446)	1:187:H:GLU:C	1:188:H:THR:N	1:188:H:THR:CA	1:188:H:THR:C	9	11.43
(1,891)	1:228:I:ALA:C	1:229:I:ARG:N	1:229:I:ARG:CA	1:229:I:ARG:C	3	11.42
(1,530)	1:195:H:ASN:C	1:196:H:PRO:N	1:196:H:PRO:CA	1:196:H:PRO:C	9	11.42
(1,891)	1:228:I:ALA:C	1:229:I:ARG:N	1:229:I:ARG:CA	1:229:I:ARG:C	1	11.4
(1,43)	1:149:G:SER:N	1:149:G:SER:CA	1:149:G:SER:C	1:150:G:ILE:N	10	11.31
(1,891)	1:228:I:ALA:C	1:229:I:ARG:N	1:229:I:ARG:CA	1:229:I:ARG:C	4	11.26
(1,500)	1:192:H:GLN:N	1:192:H:GLN:CA	1:192:H:GLN:C	1:193:H:ASN:N	4	11.25
(1,30)	1:147:L:PRO:N	1:147:L:PRO:CA	1:147:L:PRO:C	1:148:L:THR:N	10	11.25
(1,44)	1:149:H:SER:N	1:149:H:SER:CA	1:149:H:SER:C	1:150:H:ILE:N	3	11.21
(1,30)	1:147:L:PRO:N	1:147:L:PRO:CA	1:147:L:PRO:C	1:148:L:THR:N	7	11.21
(1,434)	1:186:H:THR:C	1:187:H:GLU:N	1:187:H:GLU:CA	1:187:H:GLU:C	8	11.19
(1,1045)	1:242:G:ALA:C	1:243:G:THR:N	1:243:G:THR:CA	1:243:G:THR:C	3	11.17
(1,982)	1:236:J:SER:N	1:236:J:SER:CA	1:236:J:SER:C	1:237:J:GLN:N	3	11.17
(1,524)	1:195:H:ASN:N	1:195:H:ASN:CA	1:195:H:ASN:C	1:196:H:PRO:N	5	11.14

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,1030)	1:240:J:ASN:N	1:240:J:ASN:CA	1:240:J:ASN:C	1:241:J:THR:N	1	11.13
(1,446)	1:187:H:GLU:C	1:188:H:THR:N	1:188:H:THR:CA	1:188:H:THR:C	7	11.13
(1,1045)	1:242:G:ALA:C	1:243:G:THR:N	1:243:G:THR:CA	1:243:G:THR:C	7	11.12
(1,38)	1:148:H:THR:C	1:149:H:SER:N	1:149:H:SER:CA	1:149:H:SER:C	9	11.11
(1,500)	1:192:H:GLN:N	1:192:H:GLN:CA	1:192:H:GLN:C	1:193:H:ASN:N	3	11.1
(1,890)	1:228:H:ALA:C	1:229:H:ARG:N	1:229:H:ARG:CA	1:229:H:ARG:C	6	11.02
(1,524)	1:195:H:ASN:N	1:195:H:ASN:CA	1:195:H:ASN:C	1:196:H:PRO:N	1	11.02
(1,61)	1:152:G:ASP:N	1:152:G:ASP:CA	1:152:G:ASP:C	1:153:G:ILE:N	6	11.02
(1,64)	1:152:J:ASP:N	1:152:J:ASP:CA	1:152:J:ASP:C	1:153:J:ILE:N	2	11.0
(1,46)	1:149:J:SER:N	1:149:J:SER:CA	1:149:J:SER:C	1:150:J:ILE:N	10	11.0
(1,1048)	1:242:J:ALA:C	1:243:J:THR:N	1:243:J:THR:CA	1:243:J:THR:C	7	10.99
(1,51)	1:150:I:ILE:C	1:151:I:LEU:N	1:151:I:LEU:CA	1:151:I:LEU:C	2	10.97
(1,1045)	1:242:G:ALA:C	1:243:G:THR:N	1:243:G:THR:CA	1:243:G:THR:C	6	10.96
(1,1045)	1:242:G:ALA:C	1:243:G:THR:N	1:243:G:THR:CA	1:243:G:THR:C	2	10.95
(1,41)	1:148:K:THR:C	1:149:K:SER:N	1:149:K:SER:CA	1:149:K:SER:C	9	10.94
(1,530)	1:195:H:ASN:C	1:196:H:PRO:N	1:196:H:PRO:CA	1:196:H:PRO:C	8	10.9
(1,116)	1:158:H:LYS:N	1:158:H:LYS:CA	1:158:H:LYS:C	1:159:H:GLU:N	7	10.87
(1,43)	1:149:G:SER:N	1:149:G:SER:CA	1:149:G:SER:C	1:150:G:ILE:N	5	10.87
(1,446)	1:187:H:GLU:C	1:188:H:THR:N	1:188:H:THR:CA	1:188:H:THR:C	8	10.86
(1,794)	1:219:H:GLN:C	1:220:H:GLY:N	1:220:H:GLY:CA	1:220:H:GLY:C	3	10.85
(1,1048)	1:242:J:ALA:C	1:243:J:THR:N	1:243:J:THR:CA	1:243:J:THR:C	3	10.83
(1,1047)	1:242:I:ALA:C	1:243:I:THR:N	1:243:I:THR:CA	1:243:I:THR:C	6	10.8
(1,445)	1:187:G:GLU:C	1:188:G:THR:N	1:188:G:THR:CA	1:188:G:THR:C	10	10.79
(1,482)	1:190:H:LEU:C	1:191:H:VAL:N	1:191:H:VAL:CA	1:191:H:VAL:C	10	10.78
(1,45)	1:149:I:SER:N	1:149:I:SER:CA	1:149:I:SER:C	1:150:I:ILE:N	5	10.73
(1,808)	1:220:J:GLY:C	1:221:J:VAL:N	1:221:J:VAL:CA	1:221:J:VAL:C	4	10.71
(1,30)	1:147:L:PRO:N	1:147:L:PRO:CA	1:147:L:PRO:C	1:148:L:THR:N	9	10.55
(1,1045)	1:242:G:ALA:C	1:243:G:THR:N	1:243:G:THR:CA	1:243:G:THR:C	4	10.47
(1,527)	1:195:K:ASN:N	1:195:K:ASN:CA	1:195:K:ASN:C	1:196:K:PRO:N	6	10.45
(1,43)	1:149:G:SER:N	1:149:G:SER:CA	1:149:G:SER:C	1:150:G:ILE:N	3	10.45
(1,27)	1:147:I:PRO:N	1:147:I:PRO:CA	1:147:I:PRO:C	1:148:I:THR:N	1	10.44
(1,64)	1:152:J:ASP:N	1:152:J:ASP:CA	1:152:J:ASP:C	1:153:J:ILE:N	10	10.43
(1,525)	1:195:I:ASN:N	1:195:I:ASN:CA	1:195:I:ASN:C	1:196:I:PRO:N	4	10.42
(1,423)	1:185:I:MET:C	1:186:I:THR:N	1:186:I:THR:CA	1:186:I:THR:C	8	10.41
(1,46)	1:149:J:SER:N	1:149:J:SER:CA	1:149:J:SER:C	1:150:J:ILE:N	1	10.41
(1,310)	1:174:J:ALA:N	1:174:J:ALA:CA	1:174:J:ALA:C	1:175:J:GLU:N	4	10.4
(1,1049)	1:242:K:ALA:C	1:243:K:THR:N	1:243:K:THR:CA	1:243:K:THR:C	4	10.38
(1,990)	1:236:L:SER:C	1:237:L:GLN:N	1:237:L:GLN:CA	1:237:L:GLN:C	6	10.38
(1,28)	1:147:J:PRO:N	1:147:J:PRO:CA	1:147:J:PRO:C	1:148:J:THR:N	2	10.38
(1,501)	1:192:I:GLN:N	1:192:I:GLN:CA	1:192:I:GLN:C	1:193:I:ASN:N	1	10.35
(1,1045)	1:242:G:ALA:C	1:243:G:THR:N	1:243:G:THR:CA	1:243:G:THR:C	10	10.32
(1,527)	1:195:K:ASN:N	1:195:K:ASN:CA	1:195:K:ASN:C	1:196:K:PRO:N	9	10.32
(1,1024)	1:239:J:THR:C	1:240:J:ASN:N	1:240:J:ASN:CA	1:240:J:ASN:C	1	10.31
(1,891)	1:228:I:ALA:C	1:229:I:ARG:N	1:229:I:ARG:CA	1:229:I:ARG:C	2	10.28
(1,632)	1:204:H:ALA:N	1:204:H:ALA:CA	1:204:H:ALA:C	1:205:H:LEU:N	2	10.24
(1,1045)	1:242:G:ALA:C	1:243:G:THR:N	1:243:G:THR:CA	1:243:G:THR:C	8	10.21
(1,482)	1:190:H:LEU:C	1:191:H:VAL:N	1:191:H:VAL:CA	1:191:H:VAL:C	6	10.2
(1,36)	1:147:L:PRO:C	1:148:L:THR:N	1:148:L:THR:CA	1:148:L:THR:C	10	10.19
(1,1045)	1:242:G:ALA:C	1:243:G:THR:N	1:243:G:THR:CA	1:243:G:THR:C	5	10.17
(1,804)	1:220:L:GLY:N	1:220:L:GLY:CA	1:220:L:GLY:C	1:221:L:VAL:N	8	10.16
(1,1045)	1:242:G:ALA:C	1:243:G:THR:N	1:243:G:THR:CA	1:243:G:THR:C	9	10.15

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,527)	1:195:K:ASN:N	1:195:K:ASN:CA	1:195:K:ASN:C	1:196:K:PRO:N	1	10.15
(1,1049)	1:242:K:ALA:C	1:243:K:THR:N	1:243:K:THR:CA	1:243:K:THR:C	1	10.13
(1,38)	1:148:H:THR:C	1:149:H:SER:N	1:149:H:SER:CA	1:149:H:SER:C	2	10.13
(1,891)	1:228:I:ALA:C	1:229:I:ARG:N	1:229:I:ARG:CA	1:229:I:ARG:C	5	10.12
(1,66)	1:152:L:ASP:N	1:152:L:ASP:CA	1:152:L:ASP:C	1:153:L:ILE:N	2	10.12
(1,44)	1:149:H:SER:N	1:149:H:SER:CA	1:149:H:SER:C	1:150:H:ILE:N	10	10.11
(1,39)	1:148:I:THR:C	1:149:I:SER:N	1:149:I:SER:CA	1:149:I:SER:C	3	10.1
(1,893)	1:228:K:ALA:C	1:229:K:ARG:N	1:229:K:ARG:CA	1:229:K:ARG:C	3	10.08
(1,45)	1:149:I:SER:N	1:149:I:SER:CA	1:149:I:SER:C	1:150:I:ILE:N	7	10.07
(1,66)	1:152:L:ASP:N	1:152:L:ASP:CA	1:152:L:ASP:C	1:153:L:ILE:N	9	10.03
(1,1049)	1:242:K:ALA:C	1:243:K:THR:N	1:243:K:THR:CA	1:243:K:THR:C	7	10.01
(1,448)	1:187:J:GLU:C	1:188:J:THR:N	1:188:J:THR:CA	1:188:J:THR:C	2	10.01
(1,1047)	1:242:I:ALA:C	1:243:I:THR:N	1:243:I:THR:CA	1:243:I:THR:C	3	10.0
(1,116)	1:158:H:LYS:N	1:158:H:LYS:CA	1:158:H:LYS:C	1:159:H:GLU:N	5	10.0
(1,1046)	1:242:H:ALA:C	1:243:H:THR:N	1:243:H:THR:CA	1:243:H:THR:C	7	9.99
(1,445)	1:187:G:GLU:C	1:188:G:THR:N	1:188:G:THR:CA	1:188:G:THR:C	3	9.99
(1,804)	1:220:L:GLY:N	1:220:L:GLY:CA	1:220:L:GLY:C	1:221:L:VAL:N	6	9.98
(1,448)	1:187:J:GLU:C	1:188:J:THR:N	1:188:J:THR:CA	1:188:J:THR:C	6	9.98
(1,61)	1:152:G:ASP:N	1:152:G:ASP:CA	1:152:G:ASP:C	1:153:G:ILE:N	4	9.97
(1,1045)	1:242:G:ALA:C	1:243:G:THR:N	1:243:G:THR:CA	1:243:G:THR:C	1	9.94
(1,61)	1:152:G:ASP:N	1:152:G:ASP:CA	1:152:G:ASP:C	1:153:G:ILE:N	10	9.93
(1,1026)	1:239:L:THR:C	1:240:L:ASN:N	1:240:L:ASN:CA	1:240:L:ASN:C	8	9.92
(1,1024)	1:239:J:THR:C	1:240:J:ASN:N	1:240:J:ASN:CA	1:240:J:ASN:C	7	9.92
(1,312)	1:174:L:ALA:N	1:174:L:ALA:CA	1:174:L:ALA:C	1:175:L:GLU:N	7	9.92
(1,89)	1:154:K:ARG:C	1:155:K:GLN:N	1:155:K:GLN:CA	1:155:K:GLN:C	8	9.92
(1,46)	1:149:J:SER:N	1:149:J:SER:CA	1:149:J:SER:C	1:150:J:ILE:N	7	9.92
(1,46)	1:149:J:SER:N	1:149:J:SER:CA	1:149:J:SER:C	1:150:J:ILE:N	3	9.87
(1,890)	1:228:H:ALA:C	1:229:H:ARG:N	1:229:H:ARG:CA	1:229:H:ARG:C	8	9.84
(1,1046)	1:242:H:ALA:C	1:243:H:THR:N	1:243:H:THR:CA	1:243:H:THR:C	8	9.79
(1,36)	1:147:L:PRO:C	1:148:L:THR:N	1:148:L:THR:CA	1:148:L:THR:C	9	9.77
(1,448)	1:187:J:GLU:C	1:188:J:THR:N	1:188:J:THR:CA	1:188:J:THR:C	10	9.75
(1,1047)	1:242:I:ALA:C	1:243:I:THR:N	1:243:I:THR:CA	1:243:I:THR:C	10	9.67
(1,794)	1:219:H:GLN:C	1:220:H:GLY:N	1:220:H:GLY:CA	1:220:H:GLY:C	8	9.67
(1,981)	1:236:I:SER:N	1:236:I:SER:CA	1:236:I:SER:C	1:237:I:GLN:N	7	9.66
(1,530)	1:195:H:ASN:C	1:196:H:PRO:N	1:196:H:PRO:CA	1:196:H:PRO:C	2	9.64
(1,1046)	1:242:H:ALA:C	1:243:H:THR:N	1:243:H:THR:CA	1:243:H:THR:C	3	9.63
(1,483)	1:190:I:LEU:C	1:191:I:VAL:N	1:191:I:VAL:CA	1:191:I:VAL:C	9	9.63
(1,1049)	1:242:K:ALA:C	1:243:K:THR:N	1:243:K:THR:CA	1:243:K:THR:C	6	9.62
(1,39)	1:148:I:THR:C	1:149:I:SER:N	1:149:I:SER:CA	1:149:I:SER:C	9	9.61
(1,794)	1:219:H:GLN:C	1:220:H:GLY:N	1:220:H:GLY:CA	1:220:H:GLY:C	2	9.6
(1,558)	1:197:L:ASP:C	1:198:L:CYS:N	1:198:L:CYS:CA	1:198:L:CYS:C	6	9.6
(1,1113)	1:242:I:ALA:N	1:242:I:ALA:CA	1:242:I:ALA:C	1:243:I:THR:N	1	9.54
(1,527)	1:195:K:ASN:N	1:195:K:ASN:CA	1:195:K:ASN:C	1:196:K:PRO:N	10	9.54
(1,1046)	1:242:H:ALA:C	1:243:H:THR:N	1:243:H:THR:CA	1:243:H:THR:C	4	9.51
(1,312)	1:174:L:ALA:N	1:174:L:ALA:CA	1:174:L:ALA:C	1:175:L:GLU:N	5	9.4
(1,890)	1:228:H:ALA:C	1:229:H:ARG:N	1:229:H:ARG:CA	1:229:H:ARG:C	3	9.36
(1,38)	1:148:H:THR:C	1:149:H:SER:N	1:149:H:SER:CA	1:149:H:SER:C	3	9.35
(1,1026)	1:239:L:THR:C	1:240:L:ASN:N	1:240:L:ASN:CA	1:240:L:ASN:C	10	9.33
(1,41)	1:148:K:THR:C	1:149:K:SER:N	1:149:K:SER:CA	1:149:K:SER:C	8	9.32
(1,500)	1:192:H:GLN:N	1:192:H:GLN:CA	1:192:H:GLN:C	1:193:H:ASN:N	7	9.31
(1,61)	1:152:G:ASP:N	1:152:G:ASP:CA	1:152:G:ASP:C	1:153:G:ILE:N	1	9.3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,61)	1:152:G:ASP:N	1:152:G:ASP:CA	1:152:G:ASP:C	1:153:G:ILE:N	2	9.29
(1,48)	1:149:L:SER:N	1:149:L:SER:CA	1:149:L:SER:C	1:150:L:ILE:N	5	9.29
(1,445)	1:187:G:GLU:C	1:188:G:THR:N	1:188:G:THR:CA	1:188:G:THR:C	1	9.27
(1,59)	1:151:K:LEU:N	1:151:K:LEU:CA	1:151:K:LEU:C	1:152:K:ASP:N	8	9.27
(1,530)	1:195:H:ASN:C	1:196:H:PRO:N	1:196:H:PRO:CA	1:196:H:PRO:C	1	9.25
(1,522)	1:194:L:ALA:C	1:195:L:ASN:N	1:195:L:ASN:CA	1:195:L:ASN:C	5	9.25
(1,39)	1:148:I:THR:C	1:149:I:SER:N	1:149:I:SER:CA	1:149:I:SER:C	5	9.24
(1,1049)	1:242:K:ALA:C	1:243:K:THR:N	1:243:K:THR:CA	1:243:K:THR:C	8	9.22
(1,981)	1:236:I:SER:N	1:236:I:SER:CA	1:236:I:SER:C	1:237:I:GLN:N	10	9.19
(1,61)	1:152:G:ASP:N	1:152:G:ASP:CA	1:152:G:ASP:C	1:153:G:ILE:N	7	9.19
(1,61)	1:152:G:ASP:N	1:152:G:ASP:CA	1:152:G:ASP:C	1:153:G:ILE:N	9	9.19
(1,1047)	1:242:I:ALA:C	1:243:I:THR:N	1:243:I:THR:CA	1:243:I:THR:C	2	9.18
(1,981)	1:236:I:SER:N	1:236:I:SER:CA	1:236:I:SER:C	1:237:I:GLN:N	1	9.18
(1,1047)	1:242:I:ALA:C	1:243:I:THR:N	1:243:I:THR:CA	1:243:I:THR:C	5	9.17
(1,1046)	1:242:H:ALA:C	1:243:H:THR:N	1:243:H:THR:CA	1:243:H:THR:C	5	9.17
(1,1026)	1:239:L:THR:C	1:240:L:ASN:N	1:240:L:ASN:CA	1:240:L:ASN:C	3	9.17
(1,1046)	1:242:H:ALA:C	1:243:H:THR:N	1:243:H:THR:CA	1:243:H:THR:C	6	9.16
(1,1031)	1:240:K:ASN:N	1:240:K:ASN:CA	1:240:K:ASN:C	1:241:K:THR:N	5	9.16
(1,38)	1:148:H:THR:C	1:149:H:SER:N	1:149:H:SER:CA	1:149:H:SER:C	4	9.15
(1,868)	1:226:J:HIS:C	1:227:J:LYS:N	1:227:J:LYS:CA	1:227:J:LYS:C	9	9.12
(1,803)	1:220:K:GLY:N	1:220:K:GLY:CA	1:220:K:GLY:C	1:221:K:VAL:N	2	9.12
(1,309)	1:174:I:ALA:N	1:174:I:ALA:CA	1:174:I:ALA:C	1:175:I:GLU:N	5	9.12
(1,1026)	1:239:L:THR:C	1:240:L:ASN:N	1:240:L:ASN:CA	1:240:L:ASN:C	5	9.11
(1,314)	1:176:H:GLN:C	1:177:H:ALA:N	1:177:H:ALA:CA	1:177:H:ALA:C	1	9.11
(1,813)	1:221:I:VAL:N	1:221:I:VAL:CA	1:221:I:VAL:C	1:222:I:GLY:N	1	9.09
(1,1049)	1:242:K:ALA:C	1:243:K:THR:N	1:243:K:THR:CA	1:243:K:THR:C	10	9.08
(1,1030)	1:240:J:ASN:N	1:240:J:ASN:CA	1:240:J:ASN:C	1:241:J:THR:N	7	9.07
(1,1026)	1:239:L:THR:C	1:240:L:ASN:N	1:240:L:ASN:CA	1:240:L:ASN:C	4	9.06
(1,981)	1:236:I:SER:N	1:236:I:SER:CA	1:236:I:SER:C	1:237:I:GLN:N	6	9.05
(1,1046)	1:242:H:ALA:C	1:243:H:THR:N	1:243:H:THR:CA	1:243:H:THR:C	10	9.03
(1,445)	1:187:G:GLU:C	1:188:G:THR:N	1:188:G:THR:CA	1:188:G:THR:C	5	9.03
(1,891)	1:228:I:ALA:C	1:229:I:ARG:N	1:229:I:ARG:CA	1:229:I:ARG:C	9	8.98
(1,1112)	1:242:H:ALA:N	1:242:H:ALA:CA	1:242:H:ALA:C	1:243:H:THR:N	10	8.97
(1,41)	1:148:K:THR:C	1:149:K:SER:N	1:149:K:SER:CA	1:149:K:SER:C	3	8.96
(1,1112)	1:242:H:ALA:N	1:242:H:ALA:CA	1:242:H:ALA:C	1:243:H:THR:N	4	8.89
(1,61)	1:152:G:ASP:N	1:152:G:ASP:CA	1:152:G:ASP:C	1:153:G:ILE:N	3	8.88
(1,310)	1:174:J:ALA:N	1:174:J:ALA:CA	1:174:J:ALA:C	1:175:J:GLU:N	10	8.86
(1,32)	1:147:H:PRO:C	1:148:H:THR:N	1:148:H:THR:CA	1:148:H:THR:C	9	8.86
(1,983)	1:236:K:SER:N	1:236:K:SER:CA	1:236:K:SER:C	1:237:K:GLN:N	10	8.83
(1,652)	1:207:J:PRO:C	1:208:J:GLY:N	1:208:J:GLY:CA	1:208:J:GLY:C	3	8.83
(1,531)	1:195:I:ASN:C	1:196:I:PRO:N	1:196:I:PRO:CA	1:196:I:PRO:C	8	8.82
(1,448)	1:187:J:GLU:C	1:188:J:THR:N	1:188:J:THR:CA	1:188:J:THR:C	7	8.82
(1,447)	1:187:I:GLU:C	1:188:I:THR:N	1:188:I:THR:CA	1:188:I:THR:C	9	8.82
(1,1113)	1:242:I:ALA:N	1:242:I:ALA:CA	1:242:I:ALA:C	1:243:I:THR:N	4	8.79
(1,1046)	1:242:H:ALA:C	1:243:H:THR:N	1:243:H:THR:CA	1:243:H:THR:C	1	8.78
(1,891)	1:228:I:ALA:C	1:229:I:ARG:N	1:229:I:ARG:CA	1:229:I:ARG:C	6	8.77
(1,804)	1:220:L:GLY:N	1:220:L:GLY:CA	1:220:L:GLY:C	1:221:L:VAL:N	1	8.77
(1,676)	1:209:J:ALA:C	1:210:J:THR:N	1:210:J:THR:CA	1:210:J:THR:C	3	8.77
(1,380)	1:182:H:LYS:N	1:182:H:LYS:CA	1:182:H:LYS:C	1:183:H:ASN:N	2	8.75
(1,1049)	1:242:K:ALA:C	1:243:K:THR:N	1:243:K:THR:CA	1:243:K:THR:C	5	8.74
(1,530)	1:195:H:ASN:C	1:196:H:PRO:N	1:196:H:PRO:CA	1:196:H:PRO:C	10	8.73

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,445)	1:187:G:GLU:C	1:188:G:THR:N	1:188:G:THR:CA	1:188:G:THR:C	2	8.73
(1,57)	1:151:I:LEU:N	1:151:I:LEU:CA	1:151:I:LEU:C	1:152:I:ASP:N	6	8.73
(1,798)	1:219:L:GLN:C	1:220:L:GLY:N	1:220:L:GLY:CA	1:220:L:GLY:C	2	8.72
(1,1047)	1:242:I:ALA:C	1:243:I:THR:N	1:243:I:THR:CA	1:243:I:THR:C	9	8.71
(1,1025)	1:239:K:THR:C	1:240:K:ASN:N	1:240:K:ASN:CA	1:240:K:ASN:C	1	8.71
(1,632)	1:204:H:ALA:N	1:204:H:ALA:CA	1:204:H:ALA:C	1:205:H:LEU:N	5	8.7
(1,448)	1:187:J:GLU:C	1:188:J:THR:N	1:188:J:THR:CA	1:188:J:THR:C	3	8.68
(1,868)	1:226:J:HIS:C	1:227:J:LYS:N	1:227:J:LYS:CA	1:227:J:LYS:C	8	8.67
(1,28)	1:147:J:PRO:N	1:147:J:PRO:CA	1:147:J:PRO:C	1:148:J:THR:N	10	8.66
(1,645)	1:205:I:LEU:N	1:205:I:LEU:CA	1:205:I:LEU:C	1:206:I:GLY:N	4	8.65
(1,632)	1:204:H:ALA:N	1:204:H:ALA:CA	1:204:H:ALA:C	1:205:H:LEU:N	9	8.64
(1,1049)	1:242:K:ALA:C	1:243:K:THR:N	1:243:K:THR:CA	1:243:K:THR:C	9	8.63
(1,62)	1:152:H:ASP:N	1:152:H:ASP:CA	1:152:H:ASP:C	1:153:H:ILE:N	9	8.63
(1,445)	1:187:G:GLU:C	1:188:G:THR:N	1:188:G:THR:CA	1:188:G:THR:C	6	8.62
(1,410)	1:184:H:TRP:C	1:185:H:MET:N	1:185:H:MET:CA	1:185:H:MET:C	5	8.62
(1,794)	1:219:H:GLN:C	1:220:H:GLY:N	1:220:H:GLY:CA	1:220:H:GLY:C	7	8.61
(1,309)	1:174:I:ALA:N	1:174:I:ALA:CA	1:174:I:ALA:C	1:175:I:GLU:N	7	8.59
(1,858)	1:225:L:GLY:C	1:226:L:HIS:N	1:226:L:HIS:CA	1:226:L:HIS:C	1	8.58
(1,310)	1:174:J:ALA:N	1:174:J:ALA:CA	1:174:J:ALA:C	1:175:J:GLU:N	6	8.55
(1,983)	1:236:K:SER:N	1:236:K:SER:CA	1:236:K:SER:C	1:237:K:GLN:N	3	8.53
(1,36)	1:147:L:PRO:C	1:148:L:THR:N	1:148:L:THR:CA	1:148:L:THR:C	7	8.53
(1,1112)	1:242:H:ALA:N	1:242:H:ALA:CA	1:242:H:ALA:C	1:243:H:THR:N	6	8.51
(1,1049)	1:242:K:ALA:C	1:243:K:THR:N	1:243:K:THR:CA	1:243:K:THR:C	2	8.51
(1,1046)	1:242:H:ALA:C	1:243:H:THR:N	1:243:H:THR:CA	1:243:H:THR:C	9	8.49
(1,527)	1:195:K:ASN:N	1:195:K:ASN:CA	1:195:K:ASN:C	1:196:K:PRO:N	4	8.49
(1,450)	1:187:L:GLU:C	1:188:L:THR:N	1:188:L:THR:CA	1:188:L:THR:C	1	8.49
(1,548)	1:197:H:ASP:N	1:197:H:ASP:CA	1:197:H:ASP:C	1:198:H:CYS:N	7	8.46
(1,1112)	1:242:H:ALA:N	1:242:H:ALA:CA	1:242:H:ALA:C	1:243:H:THR:N	7	8.42
(1,484)	1:190:J:LEU:C	1:191:J:VAL:N	1:191:J:VAL:CA	1:191:J:VAL:C	9	8.42
(1,450)	1:187:L:GLU:C	1:188:L:THR:N	1:188:L:THR:CA	1:188:L:THR:C	8	8.42
(1,140)	1:160:H:PRO:N	1:160:H:PRO:CA	1:160:H:PRO:C	1:161:H:PHE:N	1	8.42
(1,90)	1:154:L:ARG:C	1:155:L:GLN:N	1:155:L:GLN:CA	1:155:L:GLN:C	8	8.4
(1,1031)	1:240:K:ASN:N	1:240:K:ASN:CA	1:240:K:ASN:C	1:241:K:THR:N	9	8.39
(1,984)	1:236:L:SER:N	1:236:L:SER:CA	1:236:L:SER:C	1:237:L:GLN:N	9	8.39
(1,858)	1:225:L:GLY:C	1:226:L:HIS:N	1:226:L:HIS:CA	1:226:L:HIS:C	2	8.34
(1,140)	1:160:H:PRO:N	1:160:H:PRO:CA	1:160:H:PRO:C	1:161:H:PHE:N	4	8.34
(1,893)	1:228:K:ALA:C	1:229:K:ARG:N	1:229:K:ARG:CA	1:229:K:ARG:C	5	8.33
(1,984)	1:236:L:SER:N	1:236:L:SER:CA	1:236:L:SER:C	1:237:L:GLN:N	7	8.32
(1,316)	1:176:J:GLN:C	1:177:J:ALA:N	1:177:J:ALA:CA	1:177:J:ALA:C	5	8.32
(1,116)	1:158:H:LYS:N	1:158:H:LYS:CA	1:158:H:LYS:C	1:159:H:GLU:N	2	8.32
(1,477)	1:190:I:LEU:N	1:190:I:LEU:CA	1:190:I:LEU:C	1:191:I:VAL:N	2	8.31
(1,1048)	1:242:J:ALA:C	1:243:J:THR:N	1:243:J:THR:CA	1:243:J:THR:C	8	8.3
(1,1048)	1:242:J:ALA:C	1:243:J:THR:N	1:243:J:THR:CA	1:243:J:THR:C	10	8.29
(1,858)	1:225:L:GLY:C	1:226:L:HIS:N	1:226:L:HIS:CA	1:226:L:HIS:C	5	8.29
(1,1112)	1:242:H:ALA:N	1:242:H:ALA:CA	1:242:H:ALA:C	1:243:H:THR:N	3	8.28
(1,1048)	1:242:J:ALA:C	1:243:J:THR:N	1:243:J:THR:CA	1:243:J:THR:C	6	8.28
(1,858)	1:225:L:GLY:C	1:226:L:HIS:N	1:226:L:HIS:CA	1:226:L:HIS:C	6	8.27
(1,1026)	1:239:L:THR:C	1:240:L:ASN:N	1:240:L:ASN:CA	1:240:L:ASN:C	9	8.22
(1,115)	1:158:G:LYS:N	1:158:G:LYS:CA	1:158:G:LYS:C	1:159:G:GLU:N	10	8.22
(1,60)	1:151:L:LEU:N	1:151:L:LEU:CA	1:151:L:LEU:C	1:152:L:ASP:N	8	8.22
(1,47)	1:149:K:SER:N	1:149:K:SER:CA	1:149:K:SER:C	1:150:K:ILE:N	10	8.22

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,893)	1:228:K:ALA:C	1:229:K:ARG:N	1:229:K:ARG:CA	1:229:K:ARG:C	8	8.21
(1,1024)	1:239:J:THR:C	1:240:J:ASN:N	1:240:J:ASN:CA	1:240:J:ASN:C	3	8.16
(1,858)	1:225:L:GLY:C	1:226:L:HIS:N	1:226:L:HIS:CA	1:226:L:HIS:C	8	8.16
(1,676)	1:209:J:ALA:C	1:210:J:THR:N	1:210:J:THR:CA	1:210:J:THR:C	10	8.16
(1,893)	1:228:K:ALA:C	1:229:K:ARG:N	1:229:K:ARG:CA	1:229:K:ARG:C	4	8.15
(1,1113)	1:242:I:ALA:N	1:242:I:ALA:CA	1:242:I:ALA:C	1:243:I:THR:N	6	8.14
(1,797)	1:219:K:GLN:C	1:220:K:GLY:N	1:220:K:GLY:CA	1:220:K:GLY:C	3	8.12
(1,38)	1:148:H:THR:C	1:149:H:SER:N	1:149:H:SER:CA	1:149:H:SER:C	10	8.12
(1,1048)	1:242:J:ALA:C	1:243:J:THR:N	1:243:J:THR:CA	1:243:J:THR:C	2	8.1
(1,64)	1:152:J:ASP:N	1:152:J:ASP:CA	1:152:J:ASP:C	1:153:J:ILE:N	9	8.09
(1,1024)	1:239:J:THR:C	1:240:J:ASN:N	1:240:J:ASN:CA	1:240:J:ASN:C	5	8.07
(1,62)	1:152:H:ASP:N	1:152:H:ASP:CA	1:152:H:ASP:C	1:153:H:ILE:N	2	8.07
(1,676)	1:209:J:ALA:C	1:210:J:THR:N	1:210:J:THR:CA	1:210:J:THR:C	4	8.05
(1,44)	1:149:H:SER:N	1:149:H:SER:CA	1:149:H:SER:C	1:150:H:ILE:N	9	8.03
(1,1046)	1:242:H:ALA:C	1:243:H:THR:N	1:243:H:THR:CA	1:243:H:THR:C	2	8.02
(1,911)	1:230:K:VAL:N	1:230:K:VAL:CA	1:230:K:VAL:C	1:231:K:LEU:N	7	8.02
(1,558)	1:197:L:ASP:C	1:198:L:CYS:N	1:198:L:CYS:CA	1:198:L:CYS:C	1	8.02
(1,501)	1:192:I:GLN:N	1:192:I:GLN:CA	1:192:I:GLN:C	1:193:I:ASN:N	8	8.0
(1,66)	1:152:L:ASP:N	1:152:L:ASP:CA	1:152:L:ASP:C	1:153:L:ILE:N	8	7.99
(1,64)	1:152:J:ASP:N	1:152:J:ASP:CA	1:152:J:ASP:C	1:153:J:ILE:N	7	7.99
(1,983)	1:236:K:SER:N	1:236:K:SER:CA	1:236:K:SER:C	1:237:K:GLN:N	6	7.98
(1,804)	1:220:L:GLY:N	1:220:L:GLY:CA	1:220:L:GLY:C	1:221:L:VAL:N	10	7.98
(1,652)	1:207:J:PRO:C	1:208:J:GLY:N	1:208:J:GLY:CA	1:208:J:GLY:C	4	7.97
(1,794)	1:219:H:GLN:C	1:220:H:GLY:N	1:220:H:GLY:CA	1:220:H:GLY:C	4	7.96
(1,990)	1:236:L:SER:C	1:237:L:GLN:N	1:237:L:GLN:CA	1:237:L:GLN:C	2	7.94
(1,1048)	1:242:J:ALA:C	1:243:J:THR:N	1:243:J:THR:CA	1:243:J:THR:C	1	7.92
(1,41)	1:148:K:THR:C	1:149:K:SER:N	1:149:K:SER:CA	1:149:K:SER:C	6	7.91
(1,795)	1:219:I:GLN:C	1:220:I:GLY:N	1:220:I:GLY:CA	1:220:I:GLY:C	10	7.9
(1,794)	1:219:H:GLN:C	1:220:H:GLY:N	1:220:H:GLY:CA	1:220:H:GLY:C	9	7.9
(1,445)	1:187:G:GLU:C	1:188:G:THR:N	1:188:G:THR:CA	1:188:G:THR:C	4	7.9
(1,48)	1:149:L:SER:N	1:149:L:SER:CA	1:149:L:SER:C	1:150:L:ILE:N	9	7.9
(1,891)	1:228:I:ALA:C	1:229:I:ARG:N	1:229:I:ARG:CA	1:229:I:ARG:C	8	7.88
(1,27)	1:147:I:PRO:N	1:147:I:PRO:CA	1:147:I:PRO:C	1:148:I:THR:N	6	7.88
(1,590)	1:200:H:THR:C	1:201:H:ILE:N	1:201:H:ILE:CA	1:201:H:ILE:C	10	7.84
(1,423)	1:185:I:MET:C	1:186:I:THR:N	1:186:I:THR:CA	1:186:I:THR:C	4	7.84
(1,632)	1:204:H:ALA:N	1:204:H:ALA:CA	1:204:H:ALA:C	1:205:H:LEU:N	1	7.82
(1,1024)	1:239:J:THR:C	1:240:J:ASN:N	1:240:J:ASN:CA	1:240:J:ASN:C	9	7.81
(1,803)	1:220:K:GLY:N	1:220:K:GLY:CA	1:220:K:GLY:C	1:221:K:VAL:N	10	7.81
(1,558)	1:197:L:ASP:C	1:198:L:CYS:N	1:198:L:CYS:CA	1:198:L:CYS:C	9	7.77
(1,519)	1:194:I:ALA:C	1:195:I:ASN:N	1:195:I:ASN:CA	1:195:I:ASN:C	6	7.77
(1,317)	1:176:K:GLN:C	1:177:K:ALA:N	1:177:K:ALA:CA	1:177:K:ALA:C	2	7.76
(1,982)	1:236:J:SER:N	1:236:J:SER:CA	1:236:J:SER:C	1:237:J:GLN:N	9	7.75
(1,532)	1:195:J:ASN:C	1:196:J:PRO:N	1:196:J:PRO:CA	1:196:J:PRO:C	10	7.75
(1,1032)	1:240:L:ASN:N	1:240:L:ASN:CA	1:240:L:ASN:C	1:241:L:THR:N	5	7.71
(1,1023)	1:239:I:THR:C	1:240:I:ASN:N	1:240:I:ASN:CA	1:240:I:ASN:C	1	7.71
(1,530)	1:195:H:ASN:C	1:196:H:PRO:N	1:196:H:PRO:CA	1:196:H:PRO:C	3	7.7
(1,45)	1:149:I:SER:N	1:149:I:SER:CA	1:149:I:SER:C	1:150:I:ILE:N	9	7.7
(1,380)	1:182:H:LYS:N	1:182:H:LYS:CA	1:182:H:LYS:C	1:183:H:ASN:N	9	7.68
(1,317)	1:176:K:GLN:C	1:177:K:ALA:N	1:177:K:ALA:CA	1:177:K:ALA:C	9	7.68
(1,1050)	1:242:L:ALA:C	1:243:L:THR:N	1:243:L:THR:CA	1:243:L:THR:C	1	7.67
(1,1048)	1:242:J:ALA:C	1:243:J:THR:N	1:243:J:THR:CA	1:243:J:THR:C	9	7.67

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,38)	1:148:H:THR:C	1:149:H:SER:N	1:149:H:SER:CA	1:149:H:SER:C	1	7.67
(1,1014)	1:238:L:VAL:C	1:239:L:THR:N	1:239:L:THR:CA	1:239:L:THR:C	2	7.66
(1,804)	1:220:L:GLY:N	1:220:L:GLY:CA	1:220:L:GLY:C	1:221:L:VAL:N	3	7.66
(1,652)	1:207:J:PRO:C	1:208:J:GLY:N	1:208:J:GLY:CA	1:208:J:GLY:C	6	7.65
(1,445)	1:187:G:GLU:C	1:188:G:THR:N	1:188:G:THR:CA	1:188:G:THR:C	8	7.65
(1,317)	1:176:K:GLN:C	1:177:K:ALA:N	1:177:K:ALA:CA	1:177:K:ALA:C	4	7.65
(1,1048)	1:242:J:ALA:C	1:243:J:THR:N	1:243:J:THR:CA	1:243:J:THR:C	4	7.64
(1,1114)	1:242:J:ALA:N	1:242:J:ALA:CA	1:242:J:ALA:C	1:243:J:THR:N	7	7.63
(1,1115)	1:242:K:ALA:N	1:242:K:ALA:CA	1:242:K:ALA:C	1:243:K:THR:N	3	7.62
(1,1030)	1:240:J:ASN:N	1:240:J:ASN:CA	1:240:J:ASN:C	1:241:J:THR:N	8	7.62
(1,423)	1:185:I:MET:C	1:186:I:THR:N	1:186:I:THR:CA	1:186:I:THR:C	9	7.62
(1,558)	1:197:L:ASP:C	1:198:L:CYS:N	1:198:L:CYS:CA	1:198:L:CYS:C	3	7.61
(1,1112)	1:242:H:ALA:N	1:242:H:ALA:CA	1:242:H:ALA:C	1:243:H:THR:N	2	7.6
(1,981)	1:236:I:SER:N	1:236:I:SER:CA	1:236:I:SER:C	1:237:I:GLN:N	2	7.6
(1,1009)	1:238:G:VAL:C	1:239:G:THR:N	1:239:G:THR:CA	1:239:G:THR:C	9	7.58
(1,794)	1:219:H:GLN:C	1:220:H:GLY:N	1:220:H:GLY:CA	1:220:H:GLY:C	1	7.58
(1,632)	1:204:H:ALA:N	1:204:H:ALA:CA	1:204:H:ALA:C	1:205:H:LEU:N	6	7.58
(1,1050)	1:242:L:ALA:C	1:243:L:THR:N	1:243:L:THR:CA	1:243:L:THR:C	3	7.56
(1,1050)	1:242:L:ALA:C	1:243:L:THR:N	1:243:L:THR:CA	1:243:L:THR:C	8	7.55
(1,309)	1:174:I:ALA:N	1:174:I:ALA:CA	1:174:I:ALA:C	1:175:I:GLU:N	2	7.55
(1,120)	1:158:L:LYS:N	1:158:L:LYS:CA	1:158:L:LYS:C	1:159:L:GLU:N	7	7.55
(1,979)	1:236:G:SER:N	1:236:G:SER:CA	1:236:G:SER:C	1:237:G:GLN:N	4	7.54
(1,979)	1:236:G:SER:N	1:236:G:SER:CA	1:236:G:SER:C	1:237:G:GLN:N	10	7.54
(1,813)	1:221:I:VAL:N	1:221:I:VAL:CA	1:221:I:VAL:C	1:222:I:GLY:N	5	7.52
(1,1021)	1:239:G:THR:C	1:240:G:ASN:N	1:240:G:ASN:CA	1:240:G:ASN:C	9	7.49
(1,891)	1:228:I:ALA:C	1:229:I:ARG:N	1:229:I:ARG:CA	1:229:I:ARG:C	10	7.46
(1,1112)	1:242:H:ALA:N	1:242:H:ALA:CA	1:242:H:ALA:C	1:243:H:THR:N	5	7.45
(1,1050)	1:242:L:ALA:C	1:243:L:THR:N	1:243:L:THR:CA	1:243:L:THR:C	6	7.45
(1,1113)	1:242:I:ALA:N	1:242:I:ALA:CA	1:242:I:ALA:C	1:243:I:THR:N	3	7.44
(1,120)	1:158:L:LYS:N	1:158:L:LYS:CA	1:158:L:LYS:C	1:159:L:GLU:N	4	7.44
(1,41)	1:148:K:THR:C	1:149:K:SER:N	1:149:K:SER:CA	1:149:K:SER:C	5	7.43
(1,983)	1:236:K:SER:N	1:236:K:SER:CA	1:236:K:SER:C	1:237:K:GLN:N	4	7.4
(1,794)	1:219:H:GLN:C	1:220:H:GLY:N	1:220:H:GLY:CA	1:220:H:GLY:C	5	7.4
(1,140)	1:160:H:PRO:N	1:160:H:PRO:CA	1:160:H:PRO:C	1:161:H:PHE:N	10	7.4
(1,41)	1:148:K:THR:C	1:149:K:SER:N	1:149:K:SER:CA	1:149:K:SER:C	10	7.4
(1,1032)	1:240:L:ASN:N	1:240:L:ASN:CA	1:240:L:ASN:C	1:241:L:THR:N	3	7.39
(1,843)	1:224:I:PRO:C	1:225:I:GLY:N	1:225:I:GLY:CA	1:225:I:GLY:C	7	7.39
(1,513)	1:193:I:ASN:N	1:193:I:ASN:CA	1:193:I:ASN:C	1:194:I:ALA:N	2	7.39
(1,120)	1:158:L:LYS:N	1:158:L:LYS:CA	1:158:L:LYS:C	1:159:L:GLU:N	6	7.39
(1,33)	1:147:I:PRO:C	1:148:I:THR:N	1:148:I:THR:CA	1:148:I:THR:C	4	7.39
(1,27)	1:147:I:PRO:N	1:147:I:PRO:CA	1:147:I:PRO:C	1:148:I:THR:N	3	7.39
(1,676)	1:209:J:ALA:C	1:210:J:THR:N	1:210:J:THR:CA	1:210:J:THR:C	2	7.38
(1,1050)	1:242:L:ALA:C	1:243:L:THR:N	1:243:L:THR:CA	1:243:L:THR:C	2	7.37
(1,1027)	1:240:G:ASN:N	1:240:G:ASN:CA	1:240:G:ASN:C	1:241:G:THR:N	1	7.37
(1,530)	1:195:H:ASN:C	1:196:H:PRO:N	1:196:H:PRO:CA	1:196:H:PRO:C	4	7.37
(1,317)	1:176:K:GLN:C	1:177:K:ALA:N	1:177:K:ALA:CA	1:177:K:ALA:C	5	7.37
(1,827)	1:223:K:GLY:N	1:223:K:GLY:CA	1:223:K:GLY:C	1:224:K:PRO:N	8	7.36
(1,508)	1:192:J:GLN:C	1:193:J:ASN:N	1:193:J:ASN:CA	1:193:J:ASN:C	8	7.35
(1,798)	1:219:L:GLN:C	1:220:L:GLY:N	1:220:L:GLY:CA	1:220:L:GLY:C	7	7.34
(1,558)	1:197:L:ASP:C	1:198:L:CYS:N	1:198:L:CYS:CA	1:198:L:CYS:C	8	7.34
(1,33)	1:147:I:PRO:C	1:148:I:THR:N	1:148:I:THR:CA	1:148:I:THR:C	2	7.33

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,1032)	1:240:L:ASN:N	1:240:L:ASN:CA	1:240:L:ASN:C	1:241:L:THR:N	8	7.32
(1,632)	1:204:H:ALA:N	1:204:H:ALA:CA	1:204:H:ALA:C	1:205:H:LEU:N	4	7.32
(1,1114)	1:242:J:ALA:N	1:242:J:ALA:CA	1:242:J:ALA:C	1:243:J:THR:N	3	7.31
(1,39)	1:148:I:THR:C	1:149:I:SER:N	1:149:I:SER:CA	1:149:I:SER:C	4	7.31
(1,858)	1:225:L:GLY:C	1:226:L:HIS:N	1:226:L:HIS:CA	1:226:L:HIS:C	10	7.3
(1,309)	1:174:I:ALA:N	1:174:I:ALA:CA	1:174:I:ALA:C	1:175:I:GLU:N	3	7.3
(1,1025)	1:239:K:THR:C	1:240:K:ASN:N	1:240:K:ASN:CA	1:240:K:ASN:C	8	7.29
(1,47)	1:149:K:SER:N	1:149:K:SER:CA	1:149:K:SER:C	1:150:K:ILE:N	9	7.28
(1,36)	1:147:L:PRO:C	1:148:L:THR:N	1:148:L:THR:CA	1:148:L:THR:C	8	7.28
(1,1025)	1:239:K:THR:C	1:240:K:ASN:N	1:240:K:ASN:CA	1:240:K:ASN:C	9	7.26
(1,558)	1:197:L:ASP:C	1:198:L:CYS:N	1:198:L:CYS:CA	1:198:L:CYS:C	10	7.26
(1,68)	1:153:H:ILE:N	1:153:H:ILE:CA	1:153:H:ILE:C	1:154:H:ARG:N	7	7.26
(1,62)	1:152:H:ASP:N	1:152:H:ASP:CA	1:152:H:ASP:C	1:153:H:ILE:N	7	7.26
(1,44)	1:149:H:SER:N	1:149:H:SER:CA	1:149:H:SER:C	1:150:H:ILE:N	5	7.26
(1,30)	1:147:L:PRO:N	1:147:L:PRO:CA	1:147:L:PRO:C	1:148:L:THR:N	8	7.26
(1,825)	1:223:I:GLY:N	1:223:I:GLY:CA	1:223:I:GLY:C	1:224:I:PRO:N	6	7.24
(1,44)	1:149:H:SER:N	1:149:H:SER:CA	1:149:H:SER:C	1:150:H:ILE:N	6	7.24
(1,445)	1:187:G:GLU:C	1:188:G:THR:N	1:188:G:THR:CA	1:188:G:THR:C	9	7.22
(1,26)	1:147:H:PRO:N	1:147:H:PRO:CA	1:147:H:PRO:C	1:148:H:THR:N	2	7.22
(1,808)	1:220:J:GLY:C	1:221:J:VAL:N	1:221:J:VAL:CA	1:221:J:VAL:C	8	7.21
(1,515)	1:193:K:ASN:N	1:193:K:ASN:CA	1:193:K:ASN:C	1:194:K:ALA:N	6	7.2
(1,450)	1:187:L:GLU:C	1:188:L:THR:N	1:188:L:THR:CA	1:188:L:THR:C	4	7.2
(1,1014)	1:238:L:VAL:C	1:239:L:THR:N	1:239:L:THR:CA	1:239:L:THR:C	1	7.19
(1,1050)	1:242:L:ALA:C	1:243:L:THR:N	1:243:L:THR:CA	1:243:L:THR:C	5	7.18
(1,1023)	1:239:I:THR:C	1:240:I:ASN:N	1:240:I:ASN:CA	1:240:I:ASN:C	9	7.18
(1,981)	1:236:I:SER:N	1:236:I:SER:CA	1:236:I:SER:C	1:237:I:GLN:N	5	7.18
(1,815)	1:221:K:VAL:N	1:221:K:VAL:CA	1:221:K:VAL:C	1:222:K:GLY:N	2	7.18
(1,532)	1:195:J:ASN:C	1:196:J:PRO:N	1:196:J:PRO:CA	1:196:J:PRO:C	9	7.18
(1,1112)	1:242:H:ALA:N	1:242:H:ALA:CA	1:242:H:ALA:C	1:243:H:THR:N	1	7.17
(1,53)	1:150:K:ILE:C	1:151:K:LEU:N	1:151:K:LEU:CA	1:151:K:LEU:C	5	7.16
(1,27)	1:147:I:PRO:N	1:147:I:PRO:CA	1:147:I:PRO:C	1:148:I:THR:N	4	7.16
(1,441)	1:187:I:GLU:N	1:187:I:GLU:CA	1:187:I:GLU:C	1:188:I:THR:N	7	7.14
(1,89)	1:154:K:ARG:C	1:155:K:GLN:N	1:155:K:GLN:CA	1:155:K:GLN:C	10	7.14
(1,44)	1:149:H:SER:N	1:149:H:SER:CA	1:149:H:SER:C	1:150:H:ILE:N	1	7.14
(1,645)	1:205:I:LEU:N	1:205:I:LEU:CA	1:205:I:LEU:C	1:206:I:GLY:N	1	7.13
(1,45)	1:149:I:SER:N	1:149:I:SER:CA	1:149:I:SER:C	1:150:I:ILE:N	8	7.12
(1,27)	1:147:I:PRO:N	1:147:I:PRO:CA	1:147:I:PRO:C	1:148:I:THR:N	2	7.12
(1,28)	1:147:J:PRO:N	1:147:J:PRO:CA	1:147:J:PRO:C	1:148:J:THR:N	8	7.11
(1,1048)	1:242:J:ALA:C	1:243:J:THR:N	1:243:J:THR:CA	1:243:J:THR:C	5	7.1
(1,90)	1:154:L:ARG:C	1:155:L:GLN:N	1:155:L:GLN:CA	1:155:L:GLN:C	1	7.1
(1,482)	1:190:H:LEU:C	1:191:H:VAL:N	1:191:H:VAL:CA	1:191:H:VAL:C	3	7.07
(1,424)	1:185:J:MET:C	1:186:J:THR:N	1:186:J:THR:CA	1:186:J:THR:C	8	7.06
(1,912)	1:230:L:VAL:N	1:230:L:VAL:CA	1:230:L:VAL:C	1:231:L:LEU:N	7	7.05
(1,674)	1:209:H:ALA:C	1:210:H:THR:N	1:210:H:THR:CA	1:210:H:THR:C	7	7.05
(1,558)	1:197:L:ASP:C	1:198:L:CYS:N	1:198:L:CYS:CA	1:198:L:CYS:C	4	7.04
(1,89)	1:154:K:ARG:C	1:155:K:GLN:N	1:155:K:GLN:CA	1:155:K:GLN:C	9	7.04
(1,1032)	1:240:L:ASN:N	1:240:L:ASN:CA	1:240:L:ASN:C	1:241:L:THR:N	9	7.03
(1,1050)	1:242:L:ALA:C	1:243:L:THR:N	1:243:L:THR:CA	1:243:L:THR:C	4	7.02
(1,794)	1:219:H:GLN:C	1:220:H:GLY:N	1:220:H:GLY:CA	1:220:H:GLY:C	6	7.01
(1,482)	1:190:H:LEU:C	1:191:H:VAL:N	1:191:H:VAL:CA	1:191:H:VAL:C	1	7.01
(1,320)	1:177:H:ALA:N	1:177:H:ALA:CA	1:177:H:ALA:C	1:178:H:SER:N	8	7.01

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,979)	1:236:G:SER:N	1:236:G:SER:CA	1:236:G:SER:C	1:237:G:GLN:N	3	7.0
(1,981)	1:236:I:SER:N	1:236:I:SER:CA	1:236:I:SER:C	1:237:I:GLN:N	4	6.98
(1,116)	1:158:H:LYS:N	1:158:H:LYS:CA	1:158:H:LYS:C	1:159:H:GLU:N	8	6.97
(1,983)	1:236:K:SER:N	1:236:K:SER:CA	1:236:K:SER:C	1:237:K:GLN:N	1	6.96
(1,983)	1:236:K:SER:N	1:236:K:SER:CA	1:236:K:SER:C	1:237:K:GLN:N	2	6.96
(1,796)	1:219:J:GLN:C	1:220:J:GLY:N	1:220:J:GLY:CA	1:220:J:GLY:C	7	6.94
(1,482)	1:190:H:LEU:C	1:191:H:VAL:N	1:191:H:VAL:CA	1:191:H:VAL:C	8	6.94
(1,1021)	1:239:G:THR:C	1:240:G:ASN:N	1:240:G:ASN:CA	1:240:G:ASN:C	5	6.93
(1,632)	1:204:H:ALA:N	1:204:H:ALA:CA	1:204:H:ALA:C	1:205:H:LEU:N	3	6.93
(1,558)	1:197:L:ASP:C	1:198:L:CYS:N	1:198:L:CYS:CA	1:198:L:CYS:C	7	6.93
(1,527)	1:195:K:ASN:N	1:195:K:ASN:CA	1:195:K:ASN:C	1:196:K:PRO:N	8	6.93
(1,1014)	1:238:L:VAL:C	1:239:L:THR:N	1:239:L:THR:CA	1:239:L:THR:C	6	6.92
(1,797)	1:219:K:GLN:C	1:220:K:GLY:N	1:220:K:GLY:CA	1:220:K:GLY:C	10	6.92
(1,1023)	1:239:I:THR:C	1:240:I:ASN:N	1:240:I:ASN:CA	1:240:I:ASN:C	6	6.91
(1,1029)	1:240:I:ASN:N	1:240:I:ASN:CA	1:240:I:ASN:C	1:241:I:THR:N	1	6.9
(1,897)	1:229:I:ARG:N	1:229:I:ARG:CA	1:229:I:ARG:C	1:230:I:VAL:N	1	6.9
(1,827)	1:223:K:GLY:N	1:223:K:GLY:CA	1:223:K:GLY:C	1:224:K:PRO:N	6	6.9
(1,27)	1:147:I:PRO:N	1:147:I:PRO:CA	1:147:I:PRO:C	1:148:I:THR:N	10	6.9
(1,29)	1:147:K:PRO:N	1:147:K:PRO:CA	1:147:K:PRO:C	1:148:K:THR:N	10	6.89
(1,320)	1:177:H:ALA:N	1:177:H:ALA:CA	1:177:H:ALA:C	1:178:H:SER:N	6	6.88
(1,1050)	1:242:L:ALA:C	1:243:L:THR:N	1:243:L:THR:CA	1:243:L:THR:C	7	6.87
(1,483)	1:190:I:LEU:C	1:191:I:VAL:N	1:191:I:VAL:CA	1:191:I:VAL:C	10	6.87
(1,317)	1:176:K:GLN:C	1:177:K:ALA:N	1:177:K:ALA:CA	1:177:K:ALA:C	6	6.87
(1,797)	1:219:K:GLN:C	1:220:K:GLY:N	1:220:K:GLY:CA	1:220:K:GLY:C	1	6.86
(1,984)	1:236:L:SER:N	1:236:L:SER:CA	1:236:L:SER:C	1:237:L:GLN:N	1	6.83
(1,312)	1:174:L:ALA:N	1:174:L:ALA:CA	1:174:L:ALA:C	1:175:L:GLU:N	2	6.83
(1,380)	1:182:H:LYS:N	1:182:H:LYS:CA	1:182:H:LYS:C	1:183:H:ASN:N	1	6.82
(1,1050)	1:242:L:ALA:C	1:243:L:THR:N	1:243:L:THR:CA	1:243:L:THR:C	9	6.8
(1,1024)	1:239:J:THR:C	1:240:J:ASN:N	1:240:J:ASN:CA	1:240:J:ASN:C	10	6.78
(1,759)	1:216:I:THR:C	1:217:I:ALA:N	1:217:I:ALA:CA	1:217:I:ALA:C	4	6.78
(1,309)	1:174:I:ALA:N	1:174:I:ALA:CA	1:174:I:ALA:C	1:175:I:GLU:N	6	6.77
(1,1111)	1:242:G:ALA:N	1:242:G:ALA:CA	1:242:G:ALA:C	1:243:G:THR:N	7	6.75
(1,1009)	1:238:G:VAL:C	1:239:G:THR:N	1:239:G:THR:CA	1:239:G:THR:C	5	6.74
(1,897)	1:229:I:ARG:N	1:229:I:ARG:CA	1:229:I:ARG:C	1:230:I:VAL:N	9	6.74
(1,33)	1:147:I:PRO:C	1:148:I:THR:N	1:148:I:THR:CA	1:148:I:THR:C	6	6.74
(1,447)	1:187:I:GLU:C	1:188:I:THR:N	1:188:I:THR:CA	1:188:I:THR:C	6	6.73
(1,903)	1:229:I:ARG:C	1:230:I:VAL:N	1:230:I:VAL:CA	1:230:I:VAL:C	3	6.72
(1,27)	1:147:I:PRO:N	1:147:I:PRO:CA	1:147:I:PRO:C	1:148:I:THR:N	5	6.72
(1,1029)	1:240:I:ASN:N	1:240:I:ASN:CA	1:240:I:ASN:C	1:241:I:THR:N	8	6.71
(1,998)	1:237:H:GLN:C	1:238:H:VAL:N	1:238:H:VAL:CA	1:238:H:VAL:C	1	6.71
(1,501)	1:192:I:GLN:N	1:192:I:GLN:CA	1:192:I:GLN:C	1:193:I:ASN:N	7	6.7
(1,32)	1:147:H:PRO:C	1:148:H:THR:N	1:148:H:THR:CA	1:148:H:THR:C	2	6.69
(1,979)	1:236:G:SER:N	1:236:G:SER:CA	1:236:G:SER:C	1:237:G:GLN:N	9	6.68
(1,845)	1:224:K:PRO:C	1:225:K:GLY:N	1:225:K:GLY:CA	1:225:K:GLY:C	4	6.68
(1,1026)	1:239:L:THR:C	1:240:L:ASN:N	1:240:L:ASN:CA	1:240:L:ASN:C	2	6.67
(1,120)	1:158:L:LYS:N	1:158:L:LYS:CA	1:158:L:LYS:C	1:159:L:GLU:N	10	6.67
(1,1025)	1:239:K:THR:C	1:240:K:ASN:N	1:240:K:ASN:CA	1:240:K:ASN:C	10	6.66
(1,531)	1:195:I:ASN:C	1:196:I:PRO:N	1:196:I:PRO:CA	1:196:I:PRO:C	1	6.66
(1,40)	1:148:J:THR:C	1:149:J:SER:N	1:149:J:SER:CA	1:149:J:SER:C	4	6.66
(1,32)	1:147:H:PRO:C	1:148:H:THR:N	1:148:H:THR:CA	1:148:H:THR:C	5	6.65
(1,524)	1:195:H:ASN:N	1:195:H:ASN:CA	1:195:H:ASN:C	1:196:H:PRO:N	9	6.64

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,317)	1:176:K:GLN:C	1:177:K:ALA:N	1:177:K:ALA:CA	1:177:K:ALA:C	8	6.64
(1,115)	1:158:G:LYS:N	1:158:G:LYS:CA	1:158:G:LYS:C	1:159:G:GLU:N	1	6.64
(1,423)	1:185:I:MET:C	1:186:I:THR:N	1:186:I:THR:CA	1:186:I:THR:C	1	6.63
(1,309)	1:174:I:ALA:N	1:174:I:ALA:CA	1:174:I:ALA:C	1:175:I:GLU:N	10	6.62
(1,45)	1:149:I:SER:N	1:149:I:SER:CA	1:149:I:SER:C	1:150:I:ILE:N	4	6.62
(1,858)	1:225:L:GLY:C	1:226:L:HIS:N	1:226:L:HIS:CA	1:226:L:HIS:C	4	6.61
(1,516)	1:193:L:ASN:N	1:193:L:ASN:CA	1:193:L:ASN:C	1:194:L:ALA:N	8	6.61
(1,1047)	1:242:I:ALA:C	1:243:I:THR:N	1:243:I:THR:CA	1:243:I:THR:C	8	6.6
(1,1025)	1:239:K:THR:C	1:240:K:ASN:N	1:240:K:ASN:CA	1:240:K:ASN:C	5	6.6
(1,839)	1:224:K:PRO:N	1:224:K:PRO:CA	1:224:K:PRO:C	1:225:K:GLY:N	7	6.6
(1,450)	1:187:L:GLU:C	1:188:L:THR:N	1:188:L:THR:CA	1:188:L:THR:C	5	6.59
(1,426)	1:185:L:MET:C	1:186:L:THR:N	1:186:L:THR:CA	1:186:L:THR:C	5	6.58
(1,1027)	1:240:G:ASN:N	1:240:G:ASN:CA	1:240:G:ASN:C	1:241:G:THR:N	8	6.57
(1,1029)	1:240:I:ASN:N	1:240:I:ASN:CA	1:240:I:ASN:C	1:241:I:THR:N	9	6.55
(1,533)	1:195:K:ASN:C	1:196:K:PRO:N	1:196:K:PRO:CA	1:196:K:PRO:C	5	6.55
(1,580)	1:199:J:LYS:C	1:200:J:THR:N	1:200:J:THR:CA	1:200:J:THR:C	7	6.53
(1,30)	1:147:L:PRO:N	1:147:L:PRO:CA	1:147:L:PRO:C	1:148:L:THR:N	5	6.53
(1,1020)	1:239:L:THR:N	1:239:L:THR:CA	1:239:L:THR:C	1:240:L:ASN:N	8	6.52
(1,116)	1:158:H:LYS:N	1:158:H:LYS:CA	1:158:H:LYS:C	1:159:H:GLU:N	10	6.51
(1,800)	1:220:H:GLY:N	1:220:H:GLY:CA	1:220:H:GLY:C	1:221:H:VAL:N	8	6.5
(1,312)	1:174:L:ALA:N	1:174:L:ALA:CA	1:174:L:ALA:C	1:175:L:GLU:N	1	6.5
(1,86)	1:154:H:ARG:C	1:155:H:GLN:N	1:155:H:GLN:CA	1:155:H:GLN:C	5	6.5
(1,1026)	1:239:L:THR:C	1:240:L:ASN:N	1:240:L:ASN:CA	1:240:L:ASN:C	7	6.49
(1,1021)	1:239:G:THR:C	1:240:G:ASN:N	1:240:G:ASN:CA	1:240:G:ASN:C	7	6.48
(1,979)	1:236:G:SER:N	1:236:G:SER:CA	1:236:G:SER:C	1:237:G:GLN:N	5	6.48
(1,858)	1:225:L:GLY:C	1:226:L:HIS:N	1:226:L:HIS:CA	1:226:L:HIS:C	3	6.48
(1,1026)	1:239:L:THR:C	1:240:L:ASN:N	1:240:L:ASN:CA	1:240:L:ASN:C	1	6.47
(1,104)	1:157:H:PRO:N	1:157:H:PRO:CA	1:157:H:PRO:C	1:158:H:LYS:N	7	6.47
(1,26)	1:147:H:PRO:N	1:147:H:PRO:CA	1:147:H:PRO:C	1:148:H:THR:N	9	6.47
(1,423)	1:185:I:MET:C	1:186:I:THR:N	1:186:I:THR:CA	1:186:I:THR:C	2	6.46
(1,28)	1:147:J:PRO:N	1:147:J:PRO:CA	1:147:J:PRO:C	1:148:J:THR:N	4	6.46
(1,793)	1:219:G:GLN:C	1:220:G:GLY:N	1:220:G:GLY:CA	1:220:G:GLY:C	3	6.45
(1,694)	1:211:J:LEU:N	1:211:J:LEU:CA	1:211:J:LEU:C	1:212:J:GLU:N	1	6.45
(1,449)	1:187:K:GLU:C	1:188:K:THR:N	1:188:K:THR:CA	1:188:K:THR:C	1	6.44
(1,1030)	1:240:J:ASN:N	1:240:J:ASN:CA	1:240:J:ASN:C	1:241:J:THR:N	3	6.41
(1,983)	1:236:K:SER:N	1:236:K:SER:CA	1:236:K:SER:C	1:237:K:GLN:N	5	6.41
(1,1115)	1:242:K:ALA:N	1:242:K:ALA:CA	1:242:K:ALA:C	1:243:K:THR:N	6	6.4
(1,1112)	1:242:H:ALA:N	1:242:H:ALA:CA	1:242:H:ALA:C	1:243:H:THR:N	9	6.39
(1,798)	1:219:L:GLN:C	1:220:L:GLY:N	1:220:L:GLY:CA	1:220:L:GLY:C	9	6.39
(1,53)	1:150:K:ILE:C	1:151:K:LEU:N	1:151:K:LEU:CA	1:151:K:LEU:C	6	6.39
(1,893)	1:228:K:ALA:C	1:229:K:ARG:N	1:229:K:ARG:CA	1:229:K:ARG:C	7	6.37
(1,796)	1:219:J:GLN:C	1:220:J:GLY:N	1:220:J:GLY:CA	1:220:J:GLY:C	10	6.37
(1,815)	1:221:K:VAL:N	1:221:K:VAL:CA	1:221:K:VAL:C	1:222:K:GLY:N	5	6.36
(1,767)	1:217:K:ALA:N	1:217:K:ALA:CA	1:217:K:ALA:C	1:218:K:CYS:N	4	6.36
(1,558)	1:197:L:ASP:C	1:198:L:CYS:N	1:198:L:CYS:CA	1:198:L:CYS:C	2	6.36
(1,450)	1:187:L:GLU:C	1:188:L:THR:N	1:188:L:THR:CA	1:188:L:THR:C	10	6.36
(1,27)	1:147:I:PRO:N	1:147:I:PRO:CA	1:147:I:PRO:C	1:148:I:THR:N	7	6.36
(1,312)	1:174:L:ALA:N	1:174:L:ALA:CA	1:174:L:ALA:C	1:175:L:GLU:N	9	6.35
(1,1050)	1:242:L:ALA:C	1:243:L:THR:N	1:243:L:THR:CA	1:243:L:THR:C	10	6.34
(1,1032)	1:240:L:ASN:N	1:240:L:ASN:CA	1:240:L:ASN:C	1:241:L:THR:N	4	6.34
(1,1112)	1:242:H:ALA:N	1:242:H:ALA:CA	1:242:H:ALA:C	1:243:H:THR:N	8	6.33

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,1020)	1:239:L:THR:N	1:239:L:THR:CA	1:239:L:THR:C	1:240:L:ASN:N	4	6.33
(1,446)	1:187:H:GLU:C	1:188:H:THR:N	1:188:H:THR:CA	1:188:H:THR:C	5	6.33
(1,1028)	1:240:H:ASN:N	1:240:H:ASN:CA	1:240:H:ASN:C	1:241:H:THR:N	8	6.32
(1,310)	1:174:J:ALA:N	1:174:J:ALA:CA	1:174:J:ALA:C	1:175:J:GLU:N	8	6.32
(1,1023)	1:239:I:THR:C	1:240:I:ASN:N	1:240:I:ASN:CA	1:240:I:ASN:C	5	6.31
(1,1021)	1:239:G:THR:C	1:240:G:ASN:N	1:240:G:ASN:CA	1:240:G:ASN:C	8	6.31
(1,1009)	1:238:G:VAL:C	1:239:G:THR:N	1:239:G:THR:CA	1:239:G:THR:C	4	6.31
(1,983)	1:236:K:SER:N	1:236:K:SER:CA	1:236:K:SER:C	1:237:K:GLN:N	7	6.31
(1,1031)	1:240:K:ASN:N	1:240:K:ASN:CA	1:240:K:ASN:C	1:241:K:THR:N	8	6.29
(1,1020)	1:239:L:THR:N	1:239:L:THR:CA	1:239:L:THR:C	1:240:L:ASN:N	10	6.29
(1,979)	1:236:G:SER:N	1:236:G:SER:CA	1:236:G:SER:C	1:237:G:GLN:N	6	6.29
(1,804)	1:220:L:GLY:N	1:220:L:GLY:CA	1:220:L:GLY:C	1:221:L:VAL:N	4	6.28
(1,34)	1:147:J:PRO:C	1:148:J:THR:N	1:148:J:THR:CA	1:148:J:THR:C	6	6.28
(1,488)	1:191:H:VAL:N	1:191:H:VAL:CA	1:191:H:VAL:C	1:192:H:GLN:N	8	6.27
(1,676)	1:209:J:ALA:C	1:210:J:THR:N	1:210:J:THR:CA	1:210:J:THR:C	8	6.25
(1,450)	1:187:L:GLU:C	1:188:L:THR:N	1:188:L:THR:CA	1:188:L:THR:C	9	6.25
(1,983)	1:236:K:SER:N	1:236:K:SER:CA	1:236:K:SER:C	1:237:K:GLN:N	8	6.24
(1,975)	1:235:I:MET:C	1:236:I:SER:N	1:236:I:SER:CA	1:236:I:SER:C	7	6.24
(1,764)	1:217:H:ALA:N	1:217:H:ALA:CA	1:217:H:ALA:C	1:218:H:CYS:N	6	6.22
(1,981)	1:236:I:SER:N	1:236:I:SER:CA	1:236:I:SER:C	1:237:I:GLN:N	3	6.21
(1,39)	1:148:I:THR:C	1:149:I:SER:N	1:149:I:SER:CA	1:149:I:SER:C	7	6.2
(1,1031)	1:240:K:ASN:N	1:240:K:ASN:CA	1:240:K:ASN:C	1:241:K:THR:N	2	6.19
(1,674)	1:209:H:ALA:C	1:210:H:THR:N	1:210:H:THR:CA	1:210:H:THR:C	10	6.19
(1,426)	1:185:L:MET:C	1:186:L:THR:N	1:186:L:THR:CA	1:186:L:THR:C	10	6.19
(1,62)	1:152:H:ASP:N	1:152:H:ASP:CA	1:152:H:ASP:C	1:153:H:ILE:N	8	6.19
(1,117)	1:158:I:LYS:N	1:158:I:LYS:CA	1:158:I:LYS:C	1:159:I:GLU:N	1	6.18
(1,1115)	1:242:K:ALA:N	1:242:K:ALA:CA	1:242:K:ALA:C	1:243:K:THR:N	1	6.17
(1,1026)	1:239:L:THR:C	1:240:L:ASN:N	1:240:L:ASN:CA	1:240:L:ASN:C	6	6.17
(1,1024)	1:239:J:THR:C	1:240:J:ASN:N	1:240:J:ASN:CA	1:240:J:ASN:C	8	6.17
(1,48)	1:149:L:SER:N	1:149:L:SER:CA	1:149:L:SER:C	1:150:L:ILE:N	2	6.17
(1,1111)	1:242:G:ALA:N	1:242:G:ALA:CA	1:242:G:ALA:C	1:243:G:THR:N	10	6.15
(1,980)	1:236:H:SER:N	1:236:H:SER:CA	1:236:H:SER:C	1:237:H:GLN:N	10	6.14
(1,1009)	1:238:G:VAL:C	1:239:G:THR:N	1:239:G:THR:CA	1:239:G:THR:C	8	6.11
(1,310)	1:174:J:ALA:N	1:174:J:ALA:CA	1:174:J:ALA:C	1:175:J:GLU:N	2	6.11
(1,1021)	1:239:G:THR:C	1:240:G:ASN:N	1:240:G:ASN:CA	1:240:G:ASN:C	6	6.1
(1,1031)	1:240:K:ASN:N	1:240:K:ASN:CA	1:240:K:ASN:C	1:241:K:THR:N	1	6.09
(1,979)	1:236:G:SER:N	1:236:G:SER:CA	1:236:G:SER:C	1:237:G:GLN:N	1	6.09
(1,911)	1:230:K:VAL:N	1:230:K:VAL:CA	1:230:K:VAL:C	1:231:K:LEU:N	9	6.09
(1,873)	1:227:I:LYS:N	1:227:I:LYS:CA	1:227:I:LYS:C	1:228:I:ALA:N	5	6.09
(1,501)	1:192:I:GLN:N	1:192:I:GLN:CA	1:192:I:GLN:C	1:193:I:ASN:N	4	6.09
(1,61)	1:152:G:ASP:N	1:152:G:ASP:CA	1:152:G:ASP:C	1:153:G:ILE:N	8	6.09
(1,674)	1:209:H:ALA:C	1:210:H:THR:N	1:210:H:THR:CA	1:210:H:THR:C	4	6.08
(1,1020)	1:239:L:THR:N	1:239:L:THR:CA	1:239:L:THR:C	1:240:L:ASN:N	3	6.05
(1,482)	1:190:H:LEU:C	1:191:H:VAL:N	1:191:H:VAL:CA	1:191:H:VAL:C	2	6.05
(1,70)	1:153:J:ILE:N	1:153:J:ILE:CA	1:153:J:ILE:C	1:154:J:ARG:N	4	6.05
(1,410)	1:184:H:TRP:C	1:185:H:MET:N	1:185:H:MET:CA	1:185:H:MET:C	8	6.04
(1,59)	1:151:K:LEU:N	1:151:K:LEU:CA	1:151:K:LEU:C	1:152:K:ASP:N	3	6.04
(1,483)	1:190:I:LEU:C	1:191:I:VAL:N	1:191:I:VAL:CA	1:191:I:VAL:C	5	6.03
(1,482)	1:190:H:LEU:C	1:191:H:VAL:N	1:191:H:VAL:CA	1:191:H:VAL:C	4	6.03
(1,1025)	1:239:K:THR:C	1:240:K:ASN:N	1:240:K:ASN:CA	1:240:K:ASN:C	2	6.02
(1,1023)	1:239:I:THR:C	1:240:I:ASN:N	1:240:I:ASN:CA	1:240:I:ASN:C	8	6.02

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,1021)	1:239:G:THR:C	1:240:G:ASN:N	1:240:G:ASN:CA	1:240:G:ASN:C	2	6.01
(1,1114)	1:242:J:ALA:N	1:242:J:ALA:CA	1:242:J:ALA:C	1:243:J:THR:N	6	6.0
(1,45)	1:149:I:SER:N	1:149:I:SER:CA	1:149:I:SER:C	1:150:I:ILE:N	1	5.99
(1,979)	1:236:G:SER:N	1:236:G:SER:CA	1:236:G:SER:C	1:237:G:GLN:N	2	5.98
(1,800)	1:220:H:GLY:N	1:220:H:GLY:CA	1:220:H:GLY:C	1:221:H:VAL:N	6	5.98
(1,307)	1:174:G:ALA:N	1:174:G:ALA:CA	1:174:G:ALA:C	1:175:G:GLU:N	3	5.97
(1,115)	1:158:G:LYS:N	1:158:G:LYS:CA	1:158:G:LYS:C	1:159:G:GLU:N	3	5.97
(1,1030)	1:240:J:ASN:N	1:240:J:ASN:CA	1:240:J:ASN:C	1:241:J:THR:N	5	5.95
(1,839)	1:224:K:PRO:N	1:224:K:PRO:CA	1:224:K:PRO:C	1:225:K:GLY:N	8	5.94
(1,677)	1:209:K:ALA:C	1:210:K:THR:N	1:210:K:THR:CA	1:210:K:THR:C	2	5.94
(1,445)	1:187:G:GLU:C	1:188:G:THR:N	1:188:G:THR:CA	1:188:G:THR:C	7	5.93
(1,371)	1:181:K:VAL:N	1:181:K:VAL:CA	1:181:K:VAL:C	1:182:K:LYS:N	1	5.93
(1,115)	1:158:G:LYS:N	1:158:G:LYS:CA	1:158:G:LYS:C	1:159:G:GLU:N	4	5.93
(1,39)	1:148:I:THR:C	1:149:I:SER:N	1:149:I:SER:CA	1:149:I:SER:C	10	5.93
(1,796)	1:219:J:GLN:C	1:220:J:GLY:N	1:220:J:GLY:CA	1:220:J:GLY:C	5	5.92
(1,501)	1:192:I:GLN:N	1:192:I:GLN:CA	1:192:I:GLN:C	1:193:I:ASN:N	10	5.92
(1,450)	1:187:L:GLU:C	1:188:L:THR:N	1:188:L:THR:CA	1:188:L:THR:C	2	5.92
(1,1111)	1:242:G:ALA:N	1:242:G:ALA:CA	1:242:G:ALA:C	1:243:G:THR:N	2	5.91
(1,804)	1:220:L:GLY:N	1:220:L:GLY:CA	1:220:L:GLY:C	1:221:L:VAL:N	7	5.91
(1,1014)	1:238:L:VAL:C	1:239:L:THR:N	1:239:L:THR:CA	1:239:L:THR:C	10	5.9
(1,508)	1:192:J:GLN:C	1:193:J:ASN:N	1:193:J:ASN:CA	1:193:J:ASN:C	9	5.9
(1,1113)	1:242:I:ALA:N	1:242:I:ALA:CA	1:242:I:ALA:C	1:243:I:THR:N	7	5.89
(1,483)	1:190:I:LEU:C	1:191:I:VAL:N	1:191:I:VAL:CA	1:191:I:VAL:C	8	5.89
(1,70)	1:153:J:ILE:N	1:153:J:ILE:CA	1:153:J:ILE:C	1:154:J:ARG:N	10	5.89
(1,1113)	1:242:I:ALA:N	1:242:I:ALA:CA	1:242:I:ALA:C	1:243:I:THR:N	5	5.88
(1,1032)	1:240:L:ASN:N	1:240:L:ASN:CA	1:240:L:ASN:C	1:241:L:THR:N	10	5.88
(1,1020)	1:239:L:THR:N	1:239:L:THR:CA	1:239:L:THR:C	1:240:L:ASN:N	5	5.88
(1,1014)	1:238:L:VAL:C	1:239:L:THR:N	1:239:L:THR:CA	1:239:L:THR:C	9	5.88
(1,978)	1:235:L:MET:C	1:236:L:SER:N	1:236:L:SER:CA	1:236:L:SER:C	6	5.87
(1,120)	1:158:L:LYS:N	1:158:L:LYS:CA	1:158:L:LYS:C	1:159:L:GLU:N	1	5.87
(1,1115)	1:242:K:ALA:N	1:242:K:ALA:CA	1:242:K:ALA:C	1:243:K:THR:N	7	5.86
(1,804)	1:220:L:GLY:N	1:220:L:GLY:CA	1:220:L:GLY:C	1:221:L:VAL:N	2	5.85
(1,533)	1:195:K:ASN:C	1:196:K:PRO:N	1:196:K:PRO:CA	1:196:K:PRO:C	3	5.85
(1,912)	1:230:L:VAL:N	1:230:L:VAL:CA	1:230:L:VAL:C	1:231:L:LEU:N	9	5.83
(1,442)	1:187:J:GLU:N	1:187:J:GLU:CA	1:187:J:GLU:C	1:188:J:THR:N	3	5.83
(1,57)	1:151:I:LEU:N	1:151:I:LEU:CA	1:151:I:LEU:C	1:152:I:ASP:N	1	5.82
(1,46)	1:149:J:SER:N	1:149:J:SER:CA	1:149:J:SER:C	1:150:J:ILE:N	8	5.82
(1,677)	1:209:K:ALA:C	1:210:K:THR:N	1:210:K:THR:CA	1:210:K:THR:C	10	5.81
(1,450)	1:187:L:GLU:C	1:188:L:THR:N	1:188:L:THR:CA	1:188:L:THR:C	6	5.81
(1,423)	1:185:I:MET:C	1:186:I:THR:N	1:186:I:THR:CA	1:186:I:THR:C	6	5.8
(1,1030)	1:240:J:ASN:N	1:240:J:ASN:CA	1:240:J:ASN:C	1:241:J:THR:N	4	5.79
(1,1027)	1:240:G:ASN:N	1:240:G:ASN:CA	1:240:G:ASN:C	1:241:G:THR:N	9	5.79
(1,669)	1:209:I:ALA:N	1:209:I:ALA:CA	1:209:I:ALA:C	1:210:I:THR:N	1	5.79
(1,1024)	1:239:J:THR:C	1:240:J:ASN:N	1:240:J:ASN:CA	1:240:J:ASN:C	2	5.78
(1,61)	1:152:G:ASP:N	1:152:G:ASP:CA	1:152:G:ASP:C	1:153:G:ILE:N	5	5.78
(1,813)	1:221:I:VAL:N	1:221:I:VAL:CA	1:221:I:VAL:C	1:222:I:GLY:N	9	5.77
(1,893)	1:228:K:ALA:C	1:229:K:ARG:N	1:229:K:ARG:CA	1:229:K:ARG:C	2	5.76
(1,225)	1:167:I:ARG:N	1:167:I:ARG:CA	1:167:I:ARG:C	1:168:I:PHE:N	3	5.76
(1,644)	1:205:H:LEU:N	1:205:H:LEU:CA	1:205:H:LEU:C	1:206:H:GLY:N	8	5.75
(1,979)	1:236:G:SER:N	1:236:G:SER:CA	1:236:G:SER:C	1:237:G:GLN:N	7	5.74
(1,57)	1:151:I:LEU:N	1:151:I:LEU:CA	1:151:I:LEU:C	1:152:I:ASP:N	4	5.74

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,896)	1:229:H:ARG:N	1:229:H:ARG:CA	1:229:H:ARG:C	1:230:H:VAL:N	9	5.73
(1,89)	1:154:K:ARG:C	1:155:K:GLN:N	1:155:K:GLN:CA	1:155:K:GLN:C	1	5.73
(1,556)	1:197:J:ASP:C	1:198:J:CYS:N	1:198:J:CYS:CA	1:198:J:CYS:C	5	5.71
(1,404)	1:184:H:TRP:N	1:184:H:TRP:CA	1:184:H:TRP:C	1:185:H:MET:N	9	5.71
(1,1031)	1:240:K:ASN:N	1:240:K:ASN:CA	1:240:K:ASN:C	1:241:K:THR:N	7	5.7
(1,89)	1:154:K:ARG:C	1:155:K:GLN:N	1:155:K:GLN:CA	1:155:K:GLN:C	6	5.7
(1,857)	1:225:K:GLY:C	1:226:K:HIS:N	1:226:K:HIS:CA	1:226:K:HIS:C	9	5.69
(1,26)	1:147:H:PRO:N	1:147:H:PRO:CA	1:147:H:PRO:C	1:148:H:THR:N	5	5.69
(1,531)	1:195:I:ASN:C	1:196:I:PRO:N	1:196:I:PRO:CA	1:196:I:PRO:C	2	5.67
(1,1113)	1:242:I:ALA:N	1:242:I:ALA:CA	1:242:I:ALA:C	1:243:I:THR:N	9	5.66
(1,1111)	1:242:G:ALA:N	1:242:G:ALA:CA	1:242:G:ALA:C	1:243:G:THR:N	1	5.66
(1,86)	1:154:H:ARG:C	1:155:H:GLN:N	1:155:H:GLN:CA	1:155:H:GLN:C	7	5.66
(1,764)	1:217:H:ALA:N	1:217:H:ALA:CA	1:217:H:ALA:C	1:218:H:CYS:N	10	5.65
(1,320)	1:177:H:ALA:N	1:177:H:ALA:CA	1:177:H:ALA:C	1:178:H:SER:N	9	5.65
(1,1111)	1:242:G:ALA:N	1:242:G:ALA:CA	1:242:G:ALA:C	1:243:G:THR:N	6	5.64
(1,501)	1:192:I:GLN:N	1:192:I:GLN:CA	1:192:I:GLN:C	1:193:I:ASN:N	9	5.64
(1,86)	1:154:H:ARG:C	1:155:H:GLN:N	1:155:H:GLN:CA	1:155:H:GLN:C	6	5.64
(1,1018)	1:239:J:THR:N	1:239:J:THR:CA	1:239:J:THR:C	1:240:J:ASN:N	9	5.62
(1,558)	1:197:L:ASP:C	1:198:L:CYS:N	1:198:L:CYS:CA	1:198:L:CYS:C	5	5.62
(1,532)	1:195:J:ASN:C	1:196:J:PRO:N	1:196:J:PRO:CA	1:196:J:PRO:C	2	5.62
(1,674)	1:209:H:ALA:C	1:210:H:THR:N	1:210:H:THR:CA	1:210:H:THR:C	8	5.61
(1,88)	1:154:J:ARG:C	1:155:J:GLN:N	1:155:J:GLN:CA	1:155:J:GLN:C	10	5.6
(1,33)	1:147:I:PRO:C	1:148:I:THR:N	1:148:I:THR:CA	1:148:I:THR:C	10	5.6
(1,1113)	1:242:I:ALA:N	1:242:I:ALA:CA	1:242:I:ALA:C	1:243:I:THR:N	10	5.58
(1,984)	1:236:L:SER:N	1:236:L:SER:CA	1:236:L:SER:C	1:237:L:GLN:N	8	5.58
(1,615)	1:202:I:LEU:C	1:203:I:LYS:N	1:203:I:LYS:CA	1:203:I:LYS:C	10	5.58
(1,116)	1:158:H:LYS:N	1:158:H:LYS:CA	1:158:H:LYS:C	1:159:H:GLU:N	9	5.58
(1,1114)	1:242:J:ALA:N	1:242:J:ALA:CA	1:242:J:ALA:C	1:243:J:THR:N	2	5.56
(1,1020)	1:239:L:THR:N	1:239:L:THR:CA	1:239:L:THR:C	1:240:L:ASN:N	9	5.56
(1,305)	1:173:K:ARG:C	1:174:K:ALA:N	1:174:K:ALA:CA	1:174:K:ALA:C	7	5.56
(1,140)	1:160:H:PRO:N	1:160:H:PRO:CA	1:160:H:PRO:C	1:161:H:PHE:N	2	5.55
(1,42)	1:148:L:THR:C	1:149:L:SER:N	1:149:L:SER:CA	1:149:L:SER:C	7	5.55
(1,1028)	1:240:H:ASN:N	1:240:H:ASN:CA	1:240:H:ASN:C	1:241:H:THR:N	9	5.54
(1,310)	1:174:J:ALA:N	1:174:J:ALA:CA	1:174:J:ALA:C	1:175:J:GLU:N	3	5.54
(1,1018)	1:239:J:THR:N	1:239:J:THR:CA	1:239:J:THR:C	1:240:J:ASN:N	7	5.52
(1,851)	1:225:K:GLY:N	1:225:K:GLY:CA	1:225:K:GLY:C	1:226:K:HIS:N	3	5.52
(1,116)	1:158:H:LYS:N	1:158:H:LYS:CA	1:158:H:LYS:C	1:159:H:GLU:N	3	5.52
(1,1115)	1:242:K:ALA:N	1:242:K:ALA:CA	1:242:K:ALA:C	1:243:K:THR:N	4	5.51
(1,1025)	1:239:K:THR:C	1:240:K:ASN:N	1:240:K:ASN:CA	1:240:K:ASN:C	6	5.5
(1,1022)	1:239:H:THR:C	1:240:H:ASN:N	1:240:H:ASN:CA	1:240:H:ASN:C	9	5.49
(1,798)	1:219:L:GLN:C	1:220:L:GLY:N	1:220:L:GLY:CA	1:220:L:GLY:C	10	5.49
(1,70)	1:153:J:ILE:N	1:153:J:ILE:CA	1:153:J:ILE:C	1:154:J:ARG:N	3	5.49
(1,436)	1:186:J:THR:C	1:187:J:GLU:N	1:187:J:GLU:CA	1:187:J:GLU:C	10	5.48
(1,317)	1:176:K:GLN:C	1:177:K:ALA:N	1:177:K:ALA:CA	1:177:K:ALA:C	10	5.48
(1,1104)	1:207:L:PRO:N	1:207:L:PRO:CA	1:207:L:PRO:C	1:208:L:GLY:N	3	5.47
(1,120)	1:158:L:LYS:N	1:158:L:LYS:CA	1:158:L:LYS:C	1:159:L:GLU:N	8	5.47
(1,36)	1:147:L:PRO:C	1:148:L:THR:N	1:148:L:THR:CA	1:148:L:THR:C	5	5.47
(1,33)	1:147:I:PRO:C	1:148:I:THR:N	1:148:I:THR:CA	1:148:I:THR:C	5	5.47
(1,815)	1:221:K:VAL:N	1:221:K:VAL:CA	1:221:K:VAL:C	1:222:K:GLY:N	10	5.45
(1,89)	1:154:K:ARG:C	1:155:K:GLN:N	1:155:K:GLN:CA	1:155:K:GLN:C	5	5.45
(1,815)	1:221:K:VAL:N	1:221:K:VAL:CA	1:221:K:VAL:C	1:222:K:GLY:N	3	5.43

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,117)	1:158:I:LYS:N	1:158:I:LYS:CA	1:158:I:LYS:C	1:159:I:GLU:N	8	5.43
(1,984)	1:236:L:SER:N	1:236:L:SER:CA	1:236:L:SER:C	1:237:L:GLN:N	3	5.41
(1,380)	1:182:H:LYS:N	1:182:H:LYS:CA	1:182:H:LYS:C	1:183:H:ASN:N	10	5.41
(1,1022)	1:239:H:THR:C	1:240:H:ASN:N	1:240:H:ASN:CA	1:240:H:ASN:C	3	5.39
(1,674)	1:209:H:ALA:C	1:210:H:THR:N	1:210:H:THR:CA	1:210:H:THR:C	2	5.39
(1,1028)	1:240:H:ASN:N	1:240:H:ASN:CA	1:240:H:ASN:C	1:241:H:THR:N	5	5.38
(1,1011)	1:238:I:VAL:C	1:239:I:THR:N	1:239:I:THR:CA	1:239:I:THR:C	7	5.38
(1,798)	1:219:L:GLN:C	1:220:L:GLY:N	1:220:L:GLY:CA	1:220:L:GLY:C	6	5.38
(1,682)	1:210:J:THR:N	1:210:J:THR:CA	1:210:J:THR:C	1:211:J:LEU:N	3	5.38
(1,674)	1:209:H:ALA:C	1:210:H:THR:N	1:210:H:THR:CA	1:210:H:THR:C	1	5.38
(1,48)	1:149:L:SER:N	1:149:L:SER:CA	1:149:L:SER:C	1:150:L:ILE:N	8	5.38
(1,979)	1:236:G:SER:N	1:236:G:SER:CA	1:236:G:SER:C	1:237:G:GLN:N	8	5.37
(1,447)	1:187:I:GLU:C	1:188:I:THR:N	1:188:I:THR:CA	1:188:I:THR:C	8	5.37
(1,37)	1:148:G:THR:C	1:149:G:SER:N	1:149:G:SER:CA	1:149:G:SER:C	5	5.37
(1,1031)	1:240:K:ASN:N	1:240:K:ASN:CA	1:240:K:ASN:C	1:241:K:THR:N	10	5.36
(1,1028)	1:240:H:ASN:N	1:240:H:ASN:CA	1:240:H:ASN:C	1:241:H:THR:N	7	5.36
(1,1014)	1:238:L:VAL:C	1:239:L:THR:N	1:239:L:THR:CA	1:239:L:THR:C	5	5.36
(1,62)	1:152:H:ASP:N	1:152:H:ASP:CA	1:152:H:ASP:C	1:153:H:ILE:N	3	5.36
(1,483)	1:190:I:LEU:C	1:191:I:VAL:N	1:191:I:VAL:CA	1:191:I:VAL:C	6	5.35
(1,63)	1:152:I:ASP:N	1:152:I:ASP:CA	1:152:I:ASP:C	1:153:I:ILE:N	6	5.35
(1,34)	1:147:J:PRO:C	1:148:J:THR:N	1:148:J:THR:CA	1:148:J:THR:C	2	5.35
(1,1116)	1:242:L:ALA:N	1:242:L:ALA:CA	1:242:L:ALA:C	1:243:L:THR:N	6	5.32
(1,1010)	1:238:H:VAL:C	1:239:H:THR:N	1:239:H:THR:CA	1:239:H:THR:C	7	5.32
(1,676)	1:209:J:ALA:C	1:210:J:THR:N	1:210:J:THR:CA	1:210:J:THR:C	6	5.32
(1,1025)	1:239:K:THR:C	1:240:K:ASN:N	1:240:K:ASN:CA	1:240:K:ASN:C	7	5.31
(1,1022)	1:239:H:THR:C	1:240:H:ASN:N	1:240:H:ASN:CA	1:240:H:ASN:C	8	5.31
(1,912)	1:230:L:VAL:N	1:230:L:VAL:CA	1:230:L:VAL:C	1:231:L:LEU:N	6	5.31
(1,441)	1:187:I:GLU:N	1:187:I:GLU:CA	1:187:I:GLU:C	1:188:I:THR:N	1	5.31
(1,59)	1:151:K:LEU:N	1:151:K:LEU:CA	1:151:K:LEU:C	1:152:K:ASP:N	4	5.31
(1,1018)	1:239:J:THR:N	1:239:J:THR:CA	1:239:J:THR:C	1:240:J:ASN:N	3	5.3
(1,231)	1:167:I:ARG:C	1:168:I:PHE:N	1:168:I:PHE:CA	1:168:I:PHE:C	2	5.29
(1,434)	1:186:H:THR:C	1:187:H:GLU:N	1:187:H:GLU:CA	1:187:H:GLU:C	9	5.28
(1,59)	1:151:K:LEU:N	1:151:K:LEU:CA	1:151:K:LEU:C	1:152:K:ASP:N	2	5.28
(1,1025)	1:239:K:THR:C	1:240:K:ASN:N	1:240:K:ASN:CA	1:240:K:ASN:C	4	5.27
(1,767)	1:217:K:ALA:N	1:217:K:ALA:CA	1:217:K:ALA:C	1:218:K:CYS:N	8	5.27
(1,912)	1:230:L:VAL:N	1:230:L:VAL:CA	1:230:L:VAL:C	1:231:L:LEU:N	2	5.26
(1,897)	1:229:I:ARG:N	1:229:I:ARG:CA	1:229:I:ARG:C	1:230:I:VAL:N	2	5.26
(1,1114)	1:242:J:ALA:N	1:242:J:ALA:CA	1:242:J:ALA:C	1:243:J:THR:N	1	5.25
(1,804)	1:220:L:GLY:N	1:220:L:GLY:CA	1:220:L:GLY:C	1:221:L:VAL:N	9	5.25
(1,538)	1:196:J:PRO:N	1:196:J:PRO:CA	1:196:J:PRO:C	1:197:J:ASP:N	8	5.25
(1,1028)	1:240:H:ASN:N	1:240:H:ASN:CA	1:240:H:ASN:C	1:241:H:THR:N	1	5.24
(1,307)	1:174:G:ALA:N	1:174:G:ALA:CA	1:174:G:ALA:C	1:175:G:GLU:N	7	5.24
(1,57)	1:151:I:LEU:N	1:151:I:LEU:CA	1:151:I:LEU:C	1:152:I:ASP:N	3	5.24
(1,1077)	1:175:I:GLU:N	1:175:I:GLU:CA	1:175:I:GLU:C	1:176:I:GLN:N	6	5.23
(1,1027)	1:240:G:ASN:N	1:240:G:ASN:CA	1:240:G:ASN:C	1:241:G:THR:N	5	5.23
(1,1021)	1:239:G:THR:C	1:240:G:ASN:N	1:240:G:ASN:CA	1:240:G:ASN:C	1	5.23
(1,1018)	1:239:J:THR:N	1:239:J:THR:CA	1:239:J:THR:C	1:240:J:ASN:N	1	5.23
(1,533)	1:195:K:ASN:C	1:196:K:PRO:N	1:196:K:PRO:CA	1:196:K:PRO:C	4	5.23
(1,117)	1:158:I:LYS:N	1:158:I:LYS:CA	1:158:I:LYS:C	1:159:I:GLU:N	10	5.23
(1,1114)	1:242:J:ALA:N	1:242:J:ALA:CA	1:242:J:ALA:C	1:243:J:THR:N	9	5.22
(1,797)	1:219:K:GLN:C	1:220:K:GLY:N	1:220:K:GLY:CA	1:220:K:GLY:C	9	5.22

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,90)	1:154:L:ARG:C	1:155:L:GLN:N	1:155:L:GLN:CA	1:155:L:GLN:C	10	5.22
(1,1116)	1:242:L:ALA:N	1:242:L:ALA:CA	1:242:L:ALA:C	1:243:L:THR:N	1	5.21
(1,796)	1:219:J:GLN:C	1:220:J:GLY:N	1:220:J:GLY:CA	1:220:J:GLY:C	1	5.21
(1,893)	1:228:K:ALA:C	1:229:K:ARG:N	1:229:K:ARG:CA	1:229:K:ARG:C	1	5.2
(1,499)	1:192:G:GLN:N	1:192:G:GLN:CA	1:192:G:GLN:C	1:193:G:ASN:N	3	5.2
(1,56)	1:151:H:LEU:N	1:151:H:LEU:CA	1:151:H:LEU:C	1:152:H:ASP:N	2	5.2
(1,531)	1:195:I:ASN:C	1:196:I:PRO:N	1:196:I:PRO:CA	1:196:I:PRO:C	5	5.19
(1,1022)	1:239:H:THR:C	1:240:H:ASN:N	1:240:H:ASN:CA	1:240:H:ASN:C	6	5.18
(1,320)	1:177:H:ALA:N	1:177:H:ALA:CA	1:177:H:ALA:C	1:178:H:SER:N	2	5.18
(1,669)	1:209:I:ALA:N	1:209:I:ALA:CA	1:209:I:ALA:C	1:210:I:THR:N	3	5.17
(1,1014)	1:238:L:VAL:C	1:239:L:THR:N	1:239:L:THR:CA	1:239:L:THR:C	7	5.15
(1,674)	1:209:H:ALA:C	1:210:H:THR:N	1:210:H:THR:CA	1:210:H:THR:C	3	5.15
(1,410)	1:184:H:TRP:C	1:185:H:MET:N	1:185:H:MET:CA	1:185:H:MET:C	9	5.15
(1,1029)	1:240:I:ASN:N	1:240:I:ASN:CA	1:240:I:ASN:C	1:241:I:THR:N	5	5.14
(1,1021)	1:239:G:THR:C	1:240:G:ASN:N	1:240:G:ASN:CA	1:240:G:ASN:C	3	5.14
(1,530)	1:195:H:ASN:C	1:196:H:PRO:N	1:196:H:PRO:CA	1:196:H:PRO:C	6	5.14
(1,33)	1:147:I:PRO:C	1:148:I:THR:N	1:148:I:THR:CA	1:148:I:THR:C	3	5.13
(1,981)	1:236:I:SER:N	1:236:I:SER:CA	1:236:I:SER:C	1:237:I:GLN:N	9	5.11
(1,947)	1:233:K:GLU:N	1:233:K:GLU:CA	1:233:K:GLU:C	1:234:K:ALA:N	4	5.11
(1,316)	1:176:J:GLN:C	1:177:J:ALA:N	1:177:J:ALA:CA	1:177:J:ALA:C	9	5.09
(1,269)	1:170:K:LYS:C	1:171:K:THR:N	1:171:K:THR:CA	1:171:K:THR:C	3	5.09
(1,70)	1:153:J:ILE:N	1:153:J:ILE:CA	1:153:J:ILE:C	1:154:J:ARG:N	2	5.09
(1,446)	1:187:H:GLU:C	1:188:H:THR:N	1:188:H:THR:CA	1:188:H:THR:C	3	5.08
(1,1111)	1:242:G:ALA:N	1:242:G:ALA:CA	1:242:G:ALA:C	1:243:G:THR:N	3	5.07
(1,531)	1:195:I:ASN:C	1:196:I:PRO:N	1:196:I:PRO:CA	1:196:I:PRO:C	10	5.07
(1,1111)	1:242:G:ALA:N	1:242:G:ALA:CA	1:242:G:ALA:C	1:243:G:THR:N	4	5.06
(1,677)	1:209:K:ALA:C	1:210:K:THR:N	1:210:K:THR:CA	1:210:K:THR:C	6	5.06
(1,441)	1:187:I:GLU:N	1:187:I:GLU:CA	1:187:I:GLU:C	1:188:I:THR:N	2	5.06
(1,674)	1:209:H:ALA:C	1:210:H:THR:N	1:210:H:THR:CA	1:210:H:THR:C	5	5.05
(1,326)	1:177:H:ALA:C	1:178:H:SER:N	1:178:H:SER:CA	1:178:H:SER:C	1	5.05
(1,59)	1:151:K:LEU:N	1:151:K:LEU:CA	1:151:K:LEU:C	1:152:K:ASP:N	6	5.05
(1,26)	1:147:H:PRO:N	1:147:H:PRO:CA	1:147:H:PRO:C	1:148:H:THR:N	4	5.05
(1,798)	1:219:L:GLN:C	1:220:L:GLY:N	1:220:L:GLY:CA	1:220:L:GLY:C	8	5.04
(1,65)	1:152:K:ASP:N	1:152:K:ASP:CA	1:152:K:ASP:C	1:153:K:ILE:N	1	5.04
(1,64)	1:152:J:ASP:N	1:152:J:ASP:CA	1:152:J:ASP:C	1:153:J:ILE:N	1	5.04
(1,500)	1:192:H:GLN:N	1:192:H:GLN:CA	1:192:H:GLN:C	1:193:H:ASN:N	8	5.02
(1,116)	1:158:H:LYS:N	1:158:H:LYS:CA	1:158:H:LYS:C	1:159:H:GLU:N	6	5.02
(1,1014)	1:238:L:VAL:C	1:239:L:THR:N	1:239:L:THR:CA	1:239:L:THR:C	4	5.01
(1,87)	1:154:I:ARG:C	1:155:I:GLN:N	1:155:I:GLN:CA	1:155:I:GLN:C	2	5.01
(1,59)	1:151:K:LEU:N	1:151:K:LEU:CA	1:151:K:LEU:C	1:152:K:ASP:N	5	5.01
(1,47)	1:149:K:SER:N	1:149:K:SER:CA	1:149:K:SER:C	1:150:K:ILE:N	7	5.01
(1,1116)	1:242:L:ALA:N	1:242:L:ALA:CA	1:242:L:ALA:C	1:243:L:THR:N	2	5.0
(1,980)	1:236:H:SER:N	1:236:H:SER:CA	1:236:H:SER:C	1:237:H:GLN:N	2	5.0
(1,1032)	1:240:L:ASN:N	1:240:L:ASN:CA	1:240:L:ASN:C	1:241:L:THR:N	2	4.98
(1,504)	1:192:L:GLN:N	1:192:L:GLN:CA	1:192:L:GLN:C	1:193:L:ASN:N	5	4.98
(1,88)	1:154:J:ARG:C	1:155:J:GLN:N	1:155:J:GLN:CA	1:155:J:GLN:C	3	4.98
(1,1115)	1:242:K:ALA:N	1:242:K:ALA:CA	1:242:K:ALA:C	1:243:K:THR:N	2	4.97
(1,1104)	1:207:L:PRO:N	1:207:L:PRO:CA	1:207:L:PRO:C	1:208:L:GLY:N	4	4.97
(1,1104)	1:207:L:PRO:N	1:207:L:PRO:CA	1:207:L:PRO:C	1:208:L:GLY:N	8	4.97
(1,1010)	1:238:H:VAL:C	1:239:H:THR:N	1:239:H:THR:CA	1:239:H:THR:C	5	4.96
(1,30)	1:147:L:PRO:N	1:147:L:PRO:CA	1:147:L:PRO:C	1:148:L:THR:N	3	4.96

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,1018)	1:239:J:THR:N	1:239:J:THR:CA	1:239:J:THR:C	1:240:J:ASN:N	5	4.95
(1,911)	1:230:K:VAL:N	1:230:K:VAL:CA	1:230:K:VAL:C	1:231:K:LEU:N	6	4.95
(1,800)	1:220:H:GLY:N	1:220:H:GLY:CA	1:220:H:GLY:C	1:221:H:VAL:N	10	4.95
(1,115)	1:158:G:LYS:N	1:158:G:LYS:CA	1:158:G:LYS:C	1:159:G:GLU:N	6	4.95
(1,1115)	1:242:K:ALA:N	1:242:K:ALA:CA	1:242:K:ALA:C	1:243:K:THR:N	9	4.94
(1,1032)	1:240:L:ASN:N	1:240:L:ASN:CA	1:240:L:ASN:C	1:241:L:THR:N	1	4.94
(1,115)	1:158:G:LYS:N	1:158:G:LYS:CA	1:158:G:LYS:C	1:159:G:GLU:N	9	4.94
(1,46)	1:149:J:SER:N	1:149:J:SER:CA	1:149:J:SER:C	1:150:J:ILE:N	9	4.94
(1,1077)	1:175:I:GLU:N	1:175:I:GLU:CA	1:175:I:GLU:C	1:176:I:GLN:N	9	4.93
(1,225)	1:167:I:ARG:N	1:167:I:ARG:CA	1:167:I:ARG:C	1:168:I:PHE:N	2	4.91
(1,1113)	1:242:I:ALA:N	1:242:I:ALA:CA	1:242:I:ALA:C	1:243:I:THR:N	2	4.9
(1,115)	1:158:G:LYS:N	1:158:G:LYS:CA	1:158:G:LYS:C	1:159:G:GLU:N	8	4.9
(1,675)	1:209:I:ALA:C	1:210:I:THR:N	1:210:I:THR:CA	1:210:I:THR:C	5	4.89
(1,974)	1:235:H:MET:C	1:236:H:SER:N	1:236:H:SER:CA	1:236:H:SER:C	8	4.88
(1,1114)	1:242:J:ALA:N	1:242:J:ALA:CA	1:242:J:ALA:C	1:243:J:THR:N	10	4.87
(1,1014)	1:238:L:VAL:C	1:239:L:THR:N	1:239:L:THR:CA	1:239:L:THR:C	3	4.87
(1,634)	1:204:J:ALA:N	1:204:J:ALA:CA	1:204:J:ALA:C	1:205:J:LEU:N	6	4.87
(1,107)	1:157:K:PRO:N	1:157:K:PRO:CA	1:157:K:PRO:C	1:158:K:LYS:N	1	4.87
(1,827)	1:223:K:GLY:N	1:223:K:GLY:CA	1:223:K:GLY:C	1:224:K:PRO:N	7	4.86
(1,675)	1:209:I:ALA:C	1:210:I:THR:N	1:210:I:THR:CA	1:210:I:THR:C	4	4.86
(1,1030)	1:240:J:ASN:N	1:240:J:ASN:CA	1:240:J:ASN:C	1:241:J:THR:N	2	4.85
(1,1029)	1:240:I:ASN:N	1:240:I:ASN:CA	1:240:I:ASN:C	1:241:I:THR:N	2	4.85
(1,1024)	1:239:J:THR:C	1:240:J:ASN:N	1:240:J:ASN:CA	1:240:J:ASN:C	6	4.85
(1,815)	1:221:K:VAL:N	1:221:K:VAL:CA	1:221:K:VAL:C	1:222:K:GLY:N	9	4.85
(1,532)	1:195:J:ASN:C	1:196:J:PRO:N	1:196:J:PRO:CA	1:196:J:PRO:C	5	4.85
(1,316)	1:176:J:GLN:C	1:177:J:ALA:N	1:177:J:ALA:CA	1:177:J:ALA:C	10	4.85
(1,1037)	1:240:K:ASN:C	1:241:K:THR:N	1:241:K:THR:CA	1:241:K:THR:C	5	4.84
(1,984)	1:236:L:SER:N	1:236:L:SER:CA	1:236:L:SER:C	1:237:L:GLN:N	4	4.84
(1,38)	1:148:H:THR:C	1:149:H:SER:N	1:149:H:SER:CA	1:149:H:SER:C	8	4.84
(1,27)	1:147:I:PRO:N	1:147:I:PRO:CA	1:147:I:PRO:C	1:148:I:THR:N	9	4.84
(1,981)	1:236:I:SER:N	1:236:I:SER:CA	1:236:I:SER:C	1:237:I:GLN:N	8	4.82
(1,794)	1:219:H:GLN:C	1:220:H:GLY:N	1:220:H:GLY:CA	1:220:H:GLY:C	10	4.82
(1,313)	1:176:G:GLN:C	1:177:G:ALA:N	1:177:G:ALA:CA	1:177:G:ALA:C	10	4.82
(1,608)	1:202:H:LEU:N	1:202:H:LEU:CA	1:202:H:LEU:C	1:203:H:LYS:N	2	4.81
(1,89)	1:154:K:ARG:C	1:155:K:GLN:N	1:155:K:GLN:CA	1:155:K:GLN:C	2	4.81
(1,1104)	1:207:L:PRO:N	1:207:L:PRO:CA	1:207:L:PRO:C	1:208:L:GLY:N	7	4.8
(1,483)	1:190:I:LEU:C	1:191:I:VAL:N	1:191:I:VAL:CA	1:191:I:VAL:C	2	4.8
(1,28)	1:147:J:PRO:N	1:147:J:PRO:CA	1:147:J:PRO:C	1:148:J:THR:N	7	4.8
(1,1104)	1:207:L:PRO:N	1:207:L:PRO:CA	1:207:L:PRO:C	1:208:L:GLY:N	1	4.79
(1,1021)	1:239:G:THR:C	1:240:G:ASN:N	1:240:G:ASN:CA	1:240:G:ASN:C	10	4.79
(1,980)	1:236:H:SER:N	1:236:H:SER:CA	1:236:H:SER:C	1:237:H:GLN:N	4	4.79
(1,53)	1:150:K:ILE:C	1:151:K:LEU:N	1:151:K:LEU:CA	1:151:K:LEU:C	2	4.79
(1,793)	1:219:G:GLN:C	1:220:G:GLY:N	1:220:G:GLY:CA	1:220:G:GLY:C	5	4.77
(1,451)	1:188:G:THR:N	1:188:G:THR:CA	1:188:G:THR:C	1:189:G:LEU:N	7	4.77
(1,632)	1:204:H:ALA:N	1:204:H:ALA:CA	1:204:H:ALA:C	1:205:H:LEU:N	8	4.76
(1,115)	1:158:G:LYS:N	1:158:G:LYS:CA	1:158:G:LYS:C	1:159:G:GLU:N	2	4.76
(1,1037)	1:240:K:ASN:C	1:241:K:THR:N	1:241:K:THR:CA	1:241:K:THR:C	9	4.75
(1,1011)	1:238:I:VAL:C	1:239:I:THR:N	1:239:I:THR:CA	1:239:I:THR:C	1	4.75
(1,983)	1:236:K:SER:N	1:236:K:SER:CA	1:236:K:SER:C	1:237:K:GLN:N	9	4.75
(1,396)	1:183:L:ASN:N	1:183:L:ASN:CA	1:183:L:ASN:C	1:184:L:TRP:N	7	4.75
(1,188)	1:164:H:TYR:N	1:164:H:TYR:CA	1:164:H:TYR:C	1:165:H:VAL:N	9	4.75

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,70)	1:153:J:ILE:N	1:153:J:ILE:CA	1:153:J:ILE:C	1:154:J:ARG:N	6	4.75
(1,1116)	1:242:L:ALA:N	1:242:L:ALA:CA	1:242:L:ALA:C	1:243:L:THR:N	7	4.74
(1,1032)	1:240:L:ASN:N	1:240:L:ASN:CA	1:240:L:ASN:C	1:241:L:THR:N	7	4.74
(1,921)	1:231:I:LEU:N	1:231:I:LEU:CA	1:231:I:LEU:C	1:232:I:ALA:N	9	4.73
(1,312)	1:174:L:ALA:N	1:174:L:ALA:CA	1:174:L:ALA:C	1:175:L:GLU:N	10	4.73
(1,1021)	1:239:G:THR:C	1:240:G:ASN:N	1:240:G:ASN:CA	1:240:G:ASN:C	4	4.72
(1,444)	1:187:L:GLU:N	1:187:L:GLU:CA	1:187:L:GLU:C	1:188:L:THR:N	1	4.71
(1,423)	1:185:I:MET:C	1:186:I:THR:N	1:186:I:THR:CA	1:186:I:THR:C	3	4.71
(1,120)	1:158:L:LYS:N	1:158:L:LYS:CA	1:158:L:LYS:C	1:159:L:GLU:N	9	4.71
(1,119)	1:158:K:LYS:N	1:158:K:LYS:CA	1:158:K:LYS:C	1:159:K:GLU:N	1	4.71
(1,42)	1:148:L:THR:C	1:149:L:SER:N	1:149:L:SER:CA	1:149:L:SER:C	6	4.71
(1,482)	1:190:H:LEU:C	1:191:H:VAL:N	1:191:H:VAL:CA	1:191:H:VAL:C	5	4.7
(1,1104)	1:207:L:PRO:N	1:207:L:PRO:CA	1:207:L:PRO:C	1:208:L:GLY:N	10	4.69
(1,984)	1:236:L:SER:N	1:236:L:SER:CA	1:236:L:SER:C	1:237:L:GLN:N	10	4.69
(1,849)	1:225:I:GLY:N	1:225:I:GLY:CA	1:225:I:GLY:C	1:226:I:HIS:N	4	4.69
(1,516)	1:193:L:ASN:N	1:193:L:ASN:CA	1:193:L:ASN:C	1:194:L:ALA:N	7	4.69
(1,59)	1:151:K:LEU:N	1:151:K:LEU:CA	1:151:K:LEU:C	1:152:K:ASP:N	10	4.69
(1,1023)	1:239:I:THR:C	1:240:I:ASN:N	1:240:I:ASN:CA	1:240:I:ASN:C	2	4.68
(1,1080)	1:175:L:GLU:N	1:175:L:GLU:CA	1:175:L:GLU:C	1:176:L:GLN:N	5	4.67
(1,155)	1:161:K:PHE:N	1:161:K:PHE:CA	1:161:K:PHE:C	1:162:K:ARG:N	2	4.67
(1,808)	1:220:J:GLY:C	1:221:J:VAL:N	1:221:J:VAL:CA	1:221:J:VAL:C	9	4.66
(1,316)	1:176:J:GLN:C	1:177:J:ALA:N	1:177:J:ALA:CA	1:177:J:ALA:C	1	4.66
(1,556)	1:197:J:ASP:C	1:198:J:CYS:N	1:198:J:CYS:CA	1:198:J:CYS:C	8	4.65
(1,305)	1:173:K:ARG:C	1:174:K:ALA:N	1:174:K:ALA:CA	1:174:K:ALA:C	1	4.65
(1,116)	1:158:H:LYS:N	1:158:H:LYS:CA	1:158:H:LYS:C	1:159:H:GLU:N	1	4.65
(1,32)	1:147:H:PRO:C	1:148:H:THR:N	1:148:H:THR:CA	1:148:H:THR:C	4	4.65
(1,1044)	1:241:L:THR:N	1:241:L:THR:CA	1:241:L:THR:C	1:242:L:ALA:N	2	4.64
(1,1002)	1:237:L:GLN:C	1:238:L:VAL:N	1:238:L:VAL:CA	1:238:L:VAL:C	1	4.63
(1,889)	1:228:G:ALA:C	1:229:G:ARG:N	1:229:G:ARG:CA	1:229:G:ARG:C	3	4.63
(1,815)	1:221:K:VAL:N	1:221:K:VAL:CA	1:221:K:VAL:C	1:222:K:GLY:N	4	4.63
(1,675)	1:209:I:ALA:C	1:210:I:THR:N	1:210:I:THR:CA	1:210:I:THR:C	3	4.63
(1,426)	1:185:L:MET:C	1:186:L:THR:N	1:186:L:THR:CA	1:186:L:THR:C	4	4.63
(1,894)	1:228:L:ALA:C	1:229:L:ARG:N	1:229:L:ARG:CA	1:229:L:ARG:C	6	4.62
(1,1029)	1:240:I:ASN:N	1:240:I:ASN:CA	1:240:I:ASN:C	1:241:I:THR:N	4	4.61
(1,426)	1:185:L:MET:C	1:186:L:THR:N	1:186:L:THR:CA	1:186:L:THR:C	9	4.61
(1,1104)	1:207:L:PRO:N	1:207:L:PRO:CA	1:207:L:PRO:C	1:208:L:GLY:N	2	4.6
(1,1044)	1:241:L:THR:N	1:241:L:THR:CA	1:241:L:THR:C	1:242:L:ALA:N	1	4.6
(1,476)	1:190:H:LEU:N	1:190:H:LEU:CA	1:190:H:LEU:C	1:191:H:VAL:N	2	4.6
(1,243)	1:168:I:PHE:C	1:169:I:TYR:N	1:169:I:TYR:CA	1:169:I:TYR:C	2	4.6
(1,1115)	1:242:K:ALA:N	1:242:K:ALA:CA	1:242:K:ALA:C	1:243:K:THR:N	5	4.59
(1,1073)	1:174:K:ALA:C	1:175:K:GLU:N	1:175:K:GLU:CA	1:175:K:GLU:C	8	4.59
(1,1023)	1:239:I:THR:C	1:240:I:ASN:N	1:240:I:ASN:CA	1:240:I:ASN:C	7	4.59
(1,737)	1:214:K:MET:C	1:215:K:MET:N	1:215:K:MET:CA	1:215:K:MET:C	1	4.59
(1,1040)	1:241:H:THR:N	1:241:H:THR:CA	1:241:H:THR:C	1:242:H:ALA:N	2	4.58
(1,32)	1:147:H:PRO:C	1:148:H:THR:N	1:148:H:THR:CA	1:148:H:THR:C	8	4.58
(1,677)	1:209:K:ALA:C	1:210:K:THR:N	1:210:K:THR:CA	1:210:K:THR:C	9	4.57
(1,1017)	1:239:I:THR:N	1:239:I:THR:CA	1:239:I:THR:C	1:240:I:ASN:N	8	4.56
(1,1111)	1:242:G:ALA:N	1:242:G:ALA:CA	1:242:G:ALA:C	1:243:G:THR:N	9	4.55
(1,1104)	1:207:L:PRO:N	1:207:L:PRO:CA	1:207:L:PRO:C	1:208:L:GLY:N	6	4.55
(1,793)	1:219:G:GLN:C	1:220:G:GLY:N	1:220:G:GLY:CA	1:220:G:GLY:C	10	4.55
(1,58)	1:151:J:LEU:N	1:151:J:LEU:CA	1:151:J:LEU:C	1:152:J:ASP:N	8	4.55

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,911)	1:230:K:VAL:N	1:230:K:VAL:CA	1:230:K:VAL:C	1:231:K:LEU:N	10	4.54
(1,903)	1:229:I:ARG:C	1:230:I:VAL:N	1:230:I:VAL:CA	1:230:I:VAL:C	8	4.54
(1,889)	1:228:G:ALA:C	1:229:G:ARG:N	1:229:G:ARG:CA	1:229:G:ARG:C	8	4.54
(1,793)	1:219:G:GLN:C	1:220:G:GLY:N	1:220:G:GLY:CA	1:220:G:GLY:C	2	4.54
(1,1029)	1:240:I:ASN:N	1:240:I:ASN:CA	1:240:I:ASN:C	1:241:I:THR:N	6	4.53
(1,1027)	1:240:G:ASN:N	1:240:G:ASN:CA	1:240:G:ASN:C	1:241:G:THR:N	4	4.53
(1,446)	1:187:H:GLU:C	1:188:H:THR:N	1:188:H:THR:CA	1:188:H:THR:C	6	4.53
(1,1036)	1:240:J:ASN:C	1:241:J:THR:N	1:241:J:THR:CA	1:241:J:THR:C	8	4.52
(1,800)	1:220:H:GLY:N	1:220:H:GLY:CA	1:220:H:GLY:C	1:221:H:VAL:N	9	4.52
(1,893)	1:228:K:ALA:C	1:229:K:ARG:N	1:229:K:ARG:CA	1:229:K:ARG:C	10	4.51
(1,798)	1:219:L:GLN:C	1:220:L:GLY:N	1:220:L:GLY:CA	1:220:L:GLY:C	1	4.51
(1,46)	1:149:J:SER:N	1:149:J:SER:CA	1:149:J:SER:C	1:150:J:ILE:N	4	4.51
(1,796)	1:219:J:GLN:C	1:220:J:GLY:N	1:220:J:GLY:CA	1:220:J:GLY:C	3	4.5
(1,483)	1:190:I:LEU:C	1:191:I:VAL:N	1:191:I:VAL:CA	1:191:I:VAL:C	3	4.5
(1,1111)	1:242:G:ALA:N	1:242:G:ALA:CA	1:242:G:ALA:C	1:243:G:THR:N	5	4.49
(1,1040)	1:241:H:THR:N	1:241:H:THR:CA	1:241:H:THR:C	1:242:H:ALA:N	7	4.49
(1,522)	1:194:L:ALA:C	1:195:L:ASN:N	1:195:L:ASN:CA	1:195:L:ASN:C	9	4.49
(1,117)	1:158:I:LYS:N	1:158:I:LYS:CA	1:158:I:LYS:C	1:159:I:GLU:N	5	4.49
(1,28)	1:147:J:PRO:N	1:147:J:PRO:CA	1:147:J:PRO:C	1:148:J:THR:N	9	4.49
(1,1031)	1:240:K:ASN:N	1:240:K:ASN:CA	1:240:K:ASN:C	1:241:K:THR:N	6	4.48
(1,1116)	1:242:L:ALA:N	1:242:L:ALA:CA	1:242:L:ALA:C	1:243:L:THR:N	3	4.47
(1,423)	1:185:I:MET:C	1:186:I:THR:N	1:186:I:THR:CA	1:186:I:THR:C	7	4.47
(1,380)	1:182:H:LYS:N	1:182:H:LYS:CA	1:182:H:LYS:C	1:183:H:ASN:N	3	4.47
(1,1002)	1:237:L:GLN:C	1:238:L:VAL:N	1:238:L:VAL:CA	1:238:L:VAL:C	7	4.45
(1,900)	1:229:L:ARG:N	1:229:L:ARG:CA	1:229:L:ARG:C	1:230:L:VAL:N	2	4.45
(1,832)	1:223:J:GLY:C	1:224:J:PRO:N	1:224:J:PRO:CA	1:224:J:PRO:C	3	4.45
(1,449)	1:187:K:GLU:C	1:188:K:THR:N	1:188:K:THR:CA	1:188:K:THR:C	4	4.45
(1,1114)	1:242:J:ALA:N	1:242:J:ALA:CA	1:242:J:ALA:C	1:243:J:THR:N	4	4.44
(1,326)	1:177:H:ALA:C	1:178:H:SER:N	1:178:H:SER:CA	1:178:H:SER:C	5	4.44
(1,615)	1:202:I:LEU:C	1:203:I:LYS:N	1:203:I:LYS:CA	1:203:I:LYS:C	7	4.42
(1,532)	1:195:J:ASN:C	1:196:J:PRO:N	1:196:J:PRO:CA	1:196:J:PRO:C	3	4.42
(1,116)	1:158:H:LYS:N	1:158:H:LYS:CA	1:158:H:LYS:C	1:159:H:GLU:N	4	4.42
(1,437)	1:186:K:THR:C	1:187:K:GLU:N	1:187:K:GLU:CA	1:187:K:GLU:C	3	4.41
(1,45)	1:149:I:SER:N	1:149:I:SER:CA	1:149:I:SER:C	1:150:I:ILE:N	6	4.41
(1,1024)	1:239:J:THR:C	1:240:J:ASN:N	1:240:J:ASN:CA	1:240:J:ASN:C	4	4.4
(1,897)	1:229:I:ARG:N	1:229:I:ARG:CA	1:229:I:ARG:C	1:230:I:VAL:N	3	4.4
(1,827)	1:223:K:GLY:N	1:223:K:GLY:CA	1:223:K:GLY:C	1:224:K:PRO:N	9	4.4
(1,320)	1:177:H:ALA:N	1:177:H:ALA:CA	1:177:H:ALA:C	1:178:H:SER:N	7	4.4
(1,895)	1:229:G:ARG:N	1:229:G:ARG:CA	1:229:G:ARG:C	1:230:G:VAL:N	3	4.39
(1,274)	1:171:J:THR:N	1:171:J:THR:CA	1:171:J:THR:C	1:172:J:LEU:N	6	4.39
(1,229)	1:167:G:ARG:C	1:168:G:PHE:N	1:168:G:PHE:CA	1:168:G:PHE:C	4	4.39
(1,1030)	1:240:J:ASN:N	1:240:J:ASN:CA	1:240:J:ASN:C	1:241:J:THR:N	6	4.38
(1,533)	1:195:K:ASN:C	1:196:K:PRO:N	1:196:K:PRO:CA	1:196:K:PRO:C	8	4.38
(1,1116)	1:242:L:ALA:N	1:242:L:ALA:CA	1:242:L:ALA:C	1:243:L:THR:N	5	4.37
(1,1043)	1:241:K:THR:N	1:241:K:THR:CA	1:241:K:THR:C	1:242:K:ALA:N	3	4.37
(1,591)	1:200:I:THR:C	1:201:I:ILE:N	1:201:I:ILE:CA	1:201:I:ILE:C	2	4.37
(1,518)	1:194:H:ALA:C	1:195:H:ASN:N	1:195:H:ASN:CA	1:195:H:ASN:C	5	4.37
(1,1002)	1:237:L:GLN:C	1:238:L:VAL:N	1:238:L:VAL:CA	1:238:L:VAL:C	9	4.36
(1,980)	1:236:H:SER:N	1:236:H:SER:CA	1:236:H:SER:C	1:237:H:GLN:N	5	4.36
(1,117)	1:158:I:LYS:N	1:158:I:LYS:CA	1:158:I:LYS:C	1:159:I:GLU:N	7	4.36
(1,89)	1:154:K:ARG:C	1:155:K:GLN:N	1:155:K:GLN:CA	1:155:K:GLN:C	3	4.35

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,33)	1:147:I:PRO:C	1:148:I:THR:N	1:148:I:THR:CA	1:148:I:THR:C	1	4.35
(1,1114)	1:242:J:ALA:N	1:242:J:ALA:CA	1:242:J:ALA:C	1:243:J:THR:N	8	4.34
(1,1038)	1:240:L:ASN:C	1:241:L:THR:N	1:241:L:THR:CA	1:241:L:THR:C	5	4.34
(1,998)	1:237:H:GLN:C	1:238:H:VAL:N	1:238:H:VAL:CA	1:238:H:VAL:C	2	4.34
(1,889)	1:228:G:ALA:C	1:229:G:ARG:N	1:229:G:ARG:CA	1:229:G:ARG:C	7	4.34
(1,895)	1:229:G:ARG:N	1:229:G:ARG:CA	1:229:G:ARG:C	1:230:G:VAL:N	6	4.33
(1,446)	1:187:H:GLU:C	1:188:H:THR:N	1:188:H:THR:CA	1:188:H:THR:C	1	4.33
(1,1044)	1:241:L:THR:N	1:241:L:THR:CA	1:241:L:THR:C	1:242:L:ALA:N	7	4.32
(1,1035)	1:240:I:ASN:C	1:241:I:THR:N	1:241:I:THR:CA	1:241:I:THR:C	9	4.32
(1,538)	1:196:J:PRO:N	1:196:J:PRO:CA	1:196:J:PRO:C	1:197:J:ASP:N	7	4.32
(1,305)	1:173:K:ARG:C	1:174:K:ALA:N	1:174:K:ALA:CA	1:174:K:ALA:C	3	4.3
(1,1044)	1:241:L:THR:N	1:241:L:THR:CA	1:241:L:THR:C	1:242:L:ALA:N	6	4.29
(1,1040)	1:241:H:THR:N	1:241:H:THR:CA	1:241:H:THR:C	1:242:H:ALA:N	6	4.29
(1,494)	1:191:H:VAL:C	1:192:H:GLN:N	1:192:H:GLN:CA	1:192:H:GLN:C	7	4.29
(1,903)	1:229:I:ARG:C	1:230:I:VAL:N	1:230:I:VAL:CA	1:230:I:VAL:C	1	4.28
(1,634)	1:204:J:ALA:N	1:204:J:ALA:CA	1:204:J:ALA:C	1:205:J:LEU:N	8	4.27
(1,229)	1:167:G:ARG:C	1:168:G:PHE:N	1:168:G:PHE:CA	1:168:G:PHE:C	9	4.27
(1,1115)	1:242:K:ALA:N	1:242:K:ALA:CA	1:242:K:ALA:C	1:243:K:THR:N	10	4.26
(1,819)	1:222:I:GLY:N	1:222:I:GLY:CA	1:222:I:GLY:C	1:223:I:GLY:N	10	4.26
(1,797)	1:219:K:GLN:C	1:220:K:GLY:N	1:220:K:GLY:CA	1:220:K:GLY:C	2	4.26
(1,1022)	1:239:H:THR:C	1:240:H:ASN:N	1:240:H:ASN:CA	1:240:H:ASN:C	10	4.25
(1,1111)	1:242:G:ALA:N	1:242:G:ALA:CA	1:242:G:ALA:C	1:243:G:THR:N	8	4.24
(1,1079)	1:175:K:GLU:N	1:175:K:GLU:CA	1:175:K:GLU:C	1:176:K:GLN:N	3	4.24
(1,1022)	1:239:H:THR:C	1:240:H:ASN:N	1:240:H:ASN:CA	1:240:H:ASN:C	5	4.24
(1,980)	1:236:H:SER:N	1:236:H:SER:CA	1:236:H:SER:C	1:237:H:GLN:N	3	4.24
(1,889)	1:228:G:ALA:C	1:229:G:ARG:N	1:229:G:ARG:CA	1:229:G:ARG:C	10	4.24
(1,797)	1:219:K:GLN:C	1:220:K:GLY:N	1:220:K:GLY:CA	1:220:K:GLY:C	5	4.24
(1,1020)	1:239:L:THR:N	1:239:L:THR:CA	1:239:L:THR:C	1:240:L:ASN:N	1	4.23
(1,1017)	1:239:I:THR:N	1:239:I:THR:CA	1:239:I:THR:C	1:240:I:ASN:N	5	4.23
(1,1027)	1:240:G:ASN:N	1:240:G:ASN:CA	1:240:G:ASN:C	1:241:G:THR:N	3	4.22
(1,800)	1:220:H:GLY:N	1:220:H:GLY:CA	1:220:H:GLY:C	1:221:H:VAL:N	2	4.22
(1,556)	1:197:J:ASP:C	1:198:J:CYS:N	1:198:J:CYS:CA	1:198:J:CYS:C	1	4.22
(1,1023)	1:239:I:THR:C	1:240:I:ASN:N	1:240:I:ASN:CA	1:240:I:ASN:C	4	4.21
(1,982)	1:236:J:SER:N	1:236:J:SER:CA	1:236:J:SER:C	1:237:J:GLN:N	5	4.21
(1,800)	1:220:H:GLY:N	1:220:H:GLY:CA	1:220:H:GLY:C	1:221:H:VAL:N	5	4.21
(1,793)	1:219:G:GLN:C	1:220:G:GLY:N	1:220:G:GLY:CA	1:220:G:GLY:C	9	4.2
(1,441)	1:187:I:GLU:N	1:187:I:GLU:CA	1:187:I:GLU:C	1:188:I:THR:N	3	4.2
(1,424)	1:185:J:MET:C	1:186:J:THR:N	1:186:J:THR:CA	1:186:J:THR:C	1	4.2
(1,531)	1:195:I:ASN:C	1:196:I:PRO:N	1:196:I:PRO:CA	1:196:I:PRO:C	4	4.19
(1,89)	1:154:K:ARG:C	1:155:K:GLN:N	1:155:K:GLN:CA	1:155:K:GLN:C	7	4.19
(1,1010)	1:238:H:VAL:C	1:239:H:THR:N	1:239:H:THR:CA	1:239:H:THR:C	6	4.18
(1,907)	1:230:G:VAL:N	1:230:G:VAL:CA	1:230:G:VAL:C	1:231:G:LEU:N	7	4.18
(1,446)	1:187:H:GLU:C	1:188:H:THR:N	1:188:H:THR:CA	1:188:H:THR:C	4	4.17
(1,33)	1:147:I:PRO:C	1:148:I:THR:N	1:148:I:THR:CA	1:148:I:THR:C	7	4.17
(1,274)	1:171:J:THR:N	1:171:J:THR:CA	1:171:J:THR:C	1:172:J:LEU:N	2	4.16
(1,1031)	1:240:K:ASN:N	1:240:K:ASN:CA	1:240:K:ASN:C	1:241:K:THR:N	3	4.15
(1,728)	1:214:H:MET:N	1:214:H:MET:CA	1:214:H:MET:C	1:215:H:MET:N	6	4.15
(1,1022)	1:239:H:THR:C	1:240:H:ASN:N	1:240:H:ASN:CA	1:240:H:ASN:C	2	4.14
(1,531)	1:195:I:ASN:C	1:196:I:PRO:N	1:196:I:PRO:CA	1:196:I:PRO:C	3	4.13
(1,1115)	1:242:K:ALA:N	1:242:K:ALA:CA	1:242:K:ALA:C	1:243:K:THR:N	8	4.12
(1,136)	1:159:J:GLU:C	1:160:J:PRO:N	1:160:J:PRO:CA	1:160:J:PRO:C	8	4.12

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,44)	1:149:H:SER:N	1:149:H:SER:CA	1:149:H:SER:C	1:150:H:ILE:N	2	4.12
(1,1038)	1:240:L:ASN:C	1:241:L:THR:N	1:241:L:THR:CA	1:241:L:THR:C	8	4.11
(1,1002)	1:237:L:GLN:C	1:238:L:VAL:N	1:238:L:VAL:CA	1:238:L:VAL:C	6	4.11
(1,30)	1:147:L:PRO:N	1:147:L:PRO:CA	1:147:L:PRO:C	1:148:L:THR:N	4	4.11
(1,1012)	1:238:J:VAL:C	1:239:J:THR:N	1:239:J:THR:CA	1:239:J:THR:C	5	4.1
(1,1002)	1:237:L:GLN:C	1:238:L:VAL:N	1:238:L:VAL:CA	1:238:L:VAL:C	2	4.1
(1,999)	1:237:I:GLN:C	1:238:I:VAL:N	1:238:I:VAL:CA	1:238:I:VAL:C	4	4.1
(1,534)	1:195:L:ASN:C	1:196:L:PRO:N	1:196:L:PRO:CA	1:196:L:PRO:C	1	4.09
(1,68)	1:153:H:ILE:N	1:153:H:ILE:CA	1:153:H:ILE:C	1:154:H:ARG:N	1	4.09
(1,1044)	1:241:L:THR:N	1:241:L:THR:CA	1:241:L:THR:C	1:242:L:ALA:N	3	4.08
(1,1030)	1:240:J:ASN:N	1:240:J:ASN:CA	1:240:J:ASN:C	1:241:J:THR:N	10	4.06
(1,1040)	1:241:H:THR:N	1:241:H:THR:CA	1:241:H:THR:C	1:242:H:ALA:N	1	4.04
(1,118)	1:158:J:LYS:N	1:158:J:LYS:CA	1:158:J:LYS:C	1:159:J:GLU:N	9	4.04
(1,1116)	1:242:L:ALA:N	1:242:L:ALA:CA	1:242:L:ALA:C	1:243:L:THR:N	8	4.03
(1,1010)	1:238:H:VAL:C	1:239:H:THR:N	1:239:H:THR:CA	1:239:H:THR:C	10	4.03
(1,980)	1:236:H:SER:N	1:236:H:SER:CA	1:236:H:SER:C	1:237:H:GLN:N	9	4.03
(1,232)	1:167:J:ARG:C	1:168:J:PHE:N	1:168:J:PHE:CA	1:168:J:PHE:C	1	4.03
(1,1028)	1:240:H:ASN:N	1:240:H:ASN:CA	1:240:H:ASN:C	1:241:H:THR:N	2	4.02
(1,449)	1:187:K:GLU:C	1:188:K:THR:N	1:188:K:THR:CA	1:188:K:THR:C	9	4.02
(1,309)	1:174:I:ALA:N	1:174:I:ALA:CA	1:174:I:ALA:C	1:175:I:GLU:N	9	4.02
(1,47)	1:149:K:SER:N	1:149:K:SER:CA	1:149:K:SER:C	1:150:K:ILE:N	1	4.02
(1,1029)	1:240:I:ASN:N	1:240:I:ASN:CA	1:240:I:ASN:C	1:241:I:THR:N	3	4.01
(1,1014)	1:238:L:VAL:C	1:239:L:THR:N	1:239:L:THR:CA	1:239:L:THR:C	8	4.01
(1,889)	1:228:G:ALA:C	1:229:G:ARG:N	1:229:G:ARG:CA	1:229:G:ARG:C	1	4.01
(1,585)	1:200:I:THR:N	1:200:I:THR:CA	1:200:I:THR:C	1:201:I:ILE:N	2	4.01
(1,1013)	1:238:K:VAL:C	1:239:K:THR:N	1:239:K:THR:CA	1:239:K:THR:C	5	4.0
(1,1116)	1:242:L:ALA:N	1:242:L:ALA:CA	1:242:L:ALA:C	1:243:L:THR:N	9	3.99
(1,1043)	1:241:K:THR:N	1:241:K:THR:CA	1:241:K:THR:C	1:242:K:ALA:N	6	3.99
(1,442)	1:187:J:GLU:N	1:187:J:GLU:CA	1:187:J:GLU:C	1:188:J:THR:N	6	3.99
(1,1019)	1:239:K:THR:N	1:239:K:THR:CA	1:239:K:THR:C	1:240:K:ASN:N	8	3.98
(1,531)	1:195:I:ASN:C	1:196:I:PRO:N	1:196:I:PRO:CA	1:196:I:PRO:C	6	3.98
(1,117)	1:158:I:LYS:N	1:158:I:LYS:CA	1:158:I:LYS:C	1:159:I:GLU:N	4	3.98
(1,1038)	1:240:L:ASN:C	1:241:L:THR:N	1:241:L:THR:CA	1:241:L:THR:C	9	3.97
(1,1013)	1:238:K:VAL:C	1:239:K:THR:N	1:239:K:THR:CA	1:239:K:THR:C	3	3.97
(1,492)	1:191:L:VAL:N	1:191:L:VAL:CA	1:191:L:VAL:C	1:192:L:GLN:N	9	3.97
(1,310)	1:174:J:ALA:N	1:174:J:ALA:CA	1:174:J:ALA:C	1:175:J:GLU:N	9	3.97
(1,72)	1:153:L:ILE:N	1:153:L:ILE:CA	1:153:L:ILE:C	1:154:L:ARG:N	3	3.97
(1,1104)	1:207:L:PRO:N	1:207:L:PRO:CA	1:207:L:PRO:C	1:208:L:GLY:N	5	3.96
(1,1043)	1:241:K:THR:N	1:241:K:THR:CA	1:241:K:THR:C	1:242:K:ALA:N	7	3.96
(1,998)	1:237:H:GLN:C	1:238:H:VAL:N	1:238:H:VAL:CA	1:238:H:VAL:C	6	3.96
(1,998)	1:237:H:GLN:C	1:238:H:VAL:N	1:238:H:VAL:CA	1:238:H:VAL:C	10	3.96
(1,675)	1:209:I:ALA:C	1:210:I:THR:N	1:210:I:THR:CA	1:210:I:THR:C	1	3.96
(1,533)	1:195:K:ASN:C	1:196:K:PRO:N	1:196:K:PRO:CA	1:196:K:PRO:C	7	3.96
(1,519)	1:194:I:ALA:C	1:195:I:ASN:N	1:195:I:ASN:CA	1:195:I:ASN:C	2	3.96
(1,474)	1:189:L:LEU:C	1:190:L:LEU:N	1:190:L:LEU:CA	1:190:L:LEU:C	5	3.96
(1,442)	1:187:J:GLU:N	1:187:J:GLU:CA	1:187:J:GLU:C	1:188:J:THR:N	10	3.96
(1,59)	1:151:K:LEU:N	1:151:K:LEU:CA	1:151:K:LEU:C	1:152:K:ASP:N	1	3.96
(1,33)	1:147:I:PRO:C	1:148:I:THR:N	1:148:I:THR:CA	1:148:I:THR:C	9	3.95
(1,231)	1:167:I:ARG:C	1:168:I:PHE:N	1:168:I:PHE:CA	1:168:I:PHE:C	3	3.94
(1,178)	1:163:J:ASP:N	1:163:J:ASP:CA	1:163:J:ASP:C	1:164:J:TYR:N	1	3.94
(1,60)	1:151:L:LEU:N	1:151:L:LEU:CA	1:151:L:LEU:C	1:152:L:ASP:N	7	3.94

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,540)	1:196:L:PRO:N	1:196:L:PRO:CA	1:196:L:PRO:C	1:197:L:ASP:N	1	3.93
(1,320)	1:177:H:ALA:N	1:177:H:ALA:CA	1:177:H:ALA:C	1:178:H:SER:N	10	3.93
(1,1022)	1:239:H:THR:C	1:240:H:ASN:N	1:240:H:ASN:CA	1:240:H:ASN:C	7	3.92
(1,640)	1:204:J:ALA:C	1:205:J:LEU:N	1:205:J:LEU:CA	1:205:J:LEU:C	2	3.92
(1,1012)	1:238:J:VAL:C	1:239:J:THR:N	1:239:J:THR:CA	1:239:J:THR:C	8	3.91
(1,895)	1:229:G:ARG:N	1:229:G:ARG:CA	1:229:G:ARG:C	1:230:G:VAL:N	9	3.91
(1,512)	1:193:H:ASN:N	1:193:H:ASN:CA	1:193:H:ASN:C	1:194:H:ALA:N	9	3.91
(1,42)	1:148:L:THR:C	1:149:L:SER:N	1:149:L:SER:CA	1:149:L:SER:C	9	3.91
(1,384)	1:182:L:LYS:N	1:182:L:LYS:CA	1:182:L:LYS:C	1:183:L:ASN:N	5	3.9
(1,89)	1:154:K:ARG:C	1:155:K:GLN:N	1:155:K:GLN:CA	1:155:K:GLN:C	4	3.9
(1,1019)	1:239:K:THR:N	1:239:K:THR:CA	1:239:K:THR:C	1:240:K:ASN:N	1	3.89
(1,120)	1:158:L:LYS:N	1:158:L:LYS:CA	1:158:L:LYS:C	1:159:L:GLU:N	3	3.89
(1,119)	1:158:K:LYS:N	1:158:K:LYS:CA	1:158:K:LYS:C	1:159:K:GLU:N	10	3.89
(1,64)	1:152:J:ASP:N	1:152:J:ASP:CA	1:152:J:ASP:C	1:153:J:ILE:N	8	3.89
(1,1039)	1:241:G:THR:N	1:241:G:THR:CA	1:241:G:THR:C	1:242:G:ALA:N	2	3.88
(1,1025)	1:239:K:THR:C	1:240:K:ASN:N	1:240:K:ASN:CA	1:240:K:ASN:C	3	3.88
(1,1020)	1:239:L:THR:N	1:239:L:THR:CA	1:239:L:THR:C	1:240:L:ASN:N	2	3.88
(1,814)	1:221:J:VAL:N	1:221:J:VAL:CA	1:221:J:VAL:C	1:222:J:GLY:N	8	3.88
(1,533)	1:195:K:ASN:C	1:196:K:PRO:N	1:196:K:PRO:CA	1:196:K:PRO:C	6	3.88
(1,175)	1:163:G:ASP:N	1:163:G:ASP:CA	1:163:G:ASP:C	1:164:G:TYR:N	1	3.88
(1,1027)	1:240:G:ASN:N	1:240:G:ASN:CA	1:240:G:ASN:C	1:241:G:THR:N	7	3.87
(1,998)	1:237:H:GLN:C	1:238:H:VAL:N	1:238:H:VAL:CA	1:238:H:VAL:C	4	3.86
(1,513)	1:193:I:ASN:N	1:193:I:ASN:CA	1:193:I:ASN:C	1:194:I:ALA:N	6	3.86
(1,1039)	1:241:G:THR:N	1:241:G:THR:CA	1:241:G:THR:C	1:242:G:ALA:N	1	3.85
(1,1010)	1:238:H:VAL:C	1:239:H:THR:N	1:239:H:THR:CA	1:239:H:THR:C	2	3.85
(1,64)	1:152:J:ASP:N	1:152:J:ASP:CA	1:152:J:ASP:C	1:153:J:ILE:N	3	3.85
(1,495)	1:191:I:VAL:C	1:192:I:GLN:N	1:192:I:GLN:CA	1:192:I:GLN:C	10	3.83
(1,57)	1:151:I:LEU:N	1:151:I:LEU:CA	1:151:I:LEU:C	1:152:I:ASP:N	2	3.83
(1,34)	1:147:J:PRO:C	1:148:J:THR:N	1:148:J:THR:CA	1:148:J:THR:C	10	3.83
(1,1043)	1:241:K:THR:N	1:241:K:THR:CA	1:241:K:THR:C	1:242:K:ALA:N	1	3.82
(1,1009)	1:238:G:VAL:C	1:239:G:THR:N	1:239:G:THR:CA	1:239:G:THR:C	10	3.82
(1,895)	1:229:G:ARG:N	1:229:G:ARG:CA	1:229:G:ARG:C	1:230:G:VAL:N	7	3.82
(1,117)	1:158:I:LYS:N	1:158:I:LYS:CA	1:158:I:LYS:C	1:159:I:GLU:N	2	3.82
(1,178)	1:163:J:ASP:N	1:163:J:ASP:CA	1:163:J:ASP:C	1:164:J:TYR:N	9	3.81
(1,1043)	1:241:K:THR:N	1:241:K:THR:CA	1:241:K:THR:C	1:242:K:ALA:N	2	3.79
(1,483)	1:190:I:LEU:C	1:191:I:VAL:N	1:191:I:VAL:CA	1:191:I:VAL:C	4	3.79
(1,669)	1:209:I:ALA:N	1:209:I:ALA:CA	1:209:I:ALA:C	1:210:I:THR:N	6	3.78
(1,314)	1:176:H:GLN:C	1:177:H:ALA:N	1:177:H:ALA:CA	1:177:H:ALA:C	6	3.78
(1,36)	1:147:L:PRO:C	1:148:L:THR:N	1:148:L:THR:CA	1:148:L:THR:C	3	3.78
(1,973)	1:235:G:MET:C	1:236:G:SER:N	1:236:G:SER:CA	1:236:G:SER:C	4	3.77
(1,448)	1:187:J:GLU:C	1:188:J:THR:N	1:188:J:THR:CA	1:188:J:THR:C	5	3.77
(1,225)	1:167:I:ARG:N	1:167:I:ARG:CA	1:167:I:ARG:C	1:168:I:PHE:N	4	3.77
(1,1116)	1:242:L:ALA:N	1:242:L:ALA:CA	1:242:L:ALA:C	1:243:L:THR:N	4	3.76
(1,986)	1:236:H:SER:C	1:237:H:GLN:N	1:237:H:GLN:CA	1:237:H:GLN:C	7	3.76
(1,894)	1:228:L:ALA:C	1:229:L:ARG:N	1:229:L:ARG:CA	1:229:L:ARG:C	7	3.76
(1,830)	1:223:H:GLY:C	1:224:H:PRO:N	1:224:H:PRO:CA	1:224:H:PRO:C	9	3.76
(1,1077)	1:175:I:GLU:N	1:175:I:GLU:CA	1:175:I:GLU:C	1:176:I:GLN:N	3	3.75
(1,1020)	1:239:L:THR:N	1:239:L:THR:CA	1:239:L:THR:C	1:240:L:ASN:N	7	3.74
(1,115)	1:158:G:LYS:N	1:158:G:LYS:CA	1:158:G:LYS:C	1:159:G:GLU:N	7	3.74
(1,57)	1:151:I:LEU:N	1:151:I:LEU:CA	1:151:I:LEU:C	1:152:I:ASP:N	8	3.74
(1,29)	1:147:K:PRO:N	1:147:K:PRO:CA	1:147:K:PRO:C	1:148:K:THR:N	5	3.74

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,1033)	1:240:G:ASN:C	1:241:G:THR:N	1:241:G:THR:CA	1:241:G:THR:C	8	3.73
(1,889)	1:228:G:ALA:C	1:229:G:ARG:N	1:229:G:ARG:CA	1:229:G:ARG:C	2	3.73
(1,178)	1:163:J:ASP:N	1:163:J:ASP:CA	1:163:J:ASP:C	1:164:J:TYR:N	10	3.73
(1,38)	1:148:H:THR:C	1:149:H:SER:N	1:149:H:SER:CA	1:149:H:SER:C	7	3.73
(1,1039)	1:241:G:THR:N	1:241:G:THR:CA	1:241:G:THR:C	1:242:G:ALA:N	6	3.72
(1,1027)	1:240:G:ASN:N	1:240:G:ASN:CA	1:240:G:ASN:C	1:241:G:THR:N	6	3.72
(1,532)	1:195:J:ASN:C	1:196:J:PRO:N	1:196:J:PRO:CA	1:196:J:PRO:C	1	3.72
(1,88)	1:154:J:ARG:C	1:155:J:GLN:N	1:155:J:GLN:CA	1:155:J:GLN:C	7	3.72
(1,1027)	1:240:G:ASN:N	1:240:G:ASN:CA	1:240:G:ASN:C	1:241:G:THR:N	2	3.71
(1,1077)	1:175:I:GLU:N	1:175:I:GLU:CA	1:175:I:GLU:C	1:176:I:GLN:N	2	3.7
(1,1040)	1:241:H:THR:N	1:241:H:THR:CA	1:241:H:THR:C	1:242:H:ALA:N	3	3.7
(1,1015)	1:239:G:THR:N	1:239:G:THR:CA	1:239:G:THR:C	1:240:G:ASN:N	9	3.7
(1,807)	1:220:I:GLY:C	1:221:I:VAL:N	1:221:I:VAL:CA	1:221:I:VAL:C	7	3.7
(1,434)	1:186:H:THR:C	1:187:H:GLU:N	1:187:H:GLU:CA	1:187:H:GLU:C	10	3.7
(1,48)	1:149:L:SER:N	1:149:L:SER:CA	1:149:L:SER:C	1:150:L:ILE:N	6	3.7
(1,795)	1:219:I:GLN:C	1:220:I:GLY:N	1:220:I:GLY:CA	1:220:I:GLY:C	1	3.69
(1,533)	1:195:K:ASN:C	1:196:K:PRO:N	1:196:K:PRO:CA	1:196:K:PRO:C	9	3.69
(1,1077)	1:175:I:GLU:N	1:175:I:GLU:CA	1:175:I:GLU:C	1:176:I:GLN:N	5	3.68
(1,1010)	1:238:H:VAL:C	1:239:H:THR:N	1:239:H:THR:CA	1:239:H:THR:C	9	3.68
(1,451)	1:188:G:THR:N	1:188:G:THR:CA	1:188:G:THR:C	1:189:G:LEU:N	5	3.68
(1,118)	1:158:J:LYS:N	1:158:J:LYS:CA	1:158:J:LYS:C	1:159:J:GLU:N	3	3.68
(1,973)	1:235:G:MET:C	1:236:G:SER:N	1:236:G:SER:CA	1:236:G:SER:C	10	3.67
(1,1041)	1:241:I:THR:N	1:241:I:THR:CA	1:241:I:THR:C	1:242:I:ALA:N	6	3.66
(1,444)	1:187:L:GLU:N	1:187:L:GLU:CA	1:187:L:GLU:C	1:188:L:THR:N	7	3.66
(1,980)	1:236:H:SER:N	1:236:H:SER:CA	1:236:H:SER:C	1:237:H:GLN:N	6	3.65
(1,518)	1:194:H:ALA:C	1:195:H:ASN:N	1:195:H:ASN:CA	1:195:H:ASN:C	8	3.65
(1,316)	1:176:J:GLN:C	1:177:J:ALA:N	1:177:J:ALA:CA	1:177:J:ALA:C	6	3.65
(1,178)	1:163:J:ASP:N	1:163:J:ASP:CA	1:163:J:ASP:C	1:164:J:TYR:N	5	3.65
(1,60)	1:151:L:LEU:N	1:151:L:LEU:CA	1:151:L:LEU:C	1:152:L:ASP:N	5	3.65
(1,47)	1:149:K:SER:N	1:149:K:SER:CA	1:149:K:SER:C	1:150:K:ILE:N	3	3.65
(1,540)	1:196:L:PRO:N	1:196:L:PRO:CA	1:196:L:PRO:C	1:197:L:ASP:N	10	3.63
(1,1103)	1:207:K:PRO:N	1:207:K:PRO:CA	1:207:K:PRO:C	1:208:K:GLY:N	3	3.62
(1,1039)	1:241:G:THR:N	1:241:G:THR:CA	1:241:G:THR:C	1:242:G:ALA:N	7	3.62
(1,1116)	1:242:L:ALA:N	1:242:L:ALA:CA	1:242:L:ALA:C	1:243:L:THR:N	10	3.61
(1,978)	1:235:L:MET:C	1:236:L:SER:N	1:236:L:SER:CA	1:236:L:SER:C	2	3.61
(1,823)	1:223:G:GLY:N	1:223:G:GLY:CA	1:223:G:GLY:C	1:224:G:PRO:N	9	3.61
(1,314)	1:176:H:GLN:C	1:177:H:ALA:N	1:177:H:ALA:CA	1:177:H:ALA:C	4	3.6
(1,1018)	1:239:J:THR:N	1:239:J:THR:CA	1:239:J:THR:C	1:240:J:ASN:N	10	3.59
(1,1017)	1:239:I:THR:N	1:239:I:THR:CA	1:239:I:THR:C	1:240:I:ASN:N	1	3.59
(1,673)	1:209:G:ALA:C	1:210:G:THR:N	1:210:G:THR:CA	1:210:G:THR:C	10	3.59
(1,1033)	1:240:G:ASN:C	1:241:G:THR:N	1:241:G:THR:CA	1:241:G:THR:C	9	3.58
(1,669)	1:209:I:ALA:N	1:209:I:ALA:CA	1:209:I:ALA:C	1:210:I:THR:N	9	3.58
(1,46)	1:149:J:SER:N	1:149:J:SER:CA	1:149:J:SER:C	1:150:J:ILE:N	6	3.58
(1,1042)	1:241:J:THR:N	1:241:J:THR:CA	1:241:J:THR:C	1:242:J:ALA:N	1	3.57
(1,831)	1:223:I:GLY:C	1:224:I:PRO:N	1:224:I:PRO:CA	1:224:I:PRO:C	1	3.57
(1,533)	1:195:K:ASN:C	1:196:K:PRO:N	1:196:K:PRO:CA	1:196:K:PRO:C	2	3.57
(1,117)	1:158:I:LYS:N	1:158:I:LYS:CA	1:158:I:LYS:C	1:159:I:GLU:N	3	3.56
(1,87)	1:154:I:ARG:C	1:155:I:GLN:N	1:155:I:GLN:CA	1:155:I:GLN:C	3	3.56
(1,1017)	1:239:I:THR:N	1:239:I:THR:CA	1:239:I:THR:C	1:240:I:ASN:N	9	3.55
(1,1042)	1:241:J:THR:N	1:241:J:THR:CA	1:241:J:THR:C	1:242:J:ALA:N	6	3.54
(1,849)	1:225:I:GLY:N	1:225:I:GLY:CA	1:225:I:GLY:C	1:226:I:HIS:N	6	3.54

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,793)	1:219:G:GLN:C	1:220:G:GLY:N	1:220:G:GLY:CA	1:220:G:GLY:C	4	3.54
(1,452)	1:188:H:THR:N	1:188:H:THR:CA	1:188:H:THR:C	1:189:H:LEU:N	8	3.54
(1,900)	1:229:L:ARG:N	1:229:L:ARG:CA	1:229:L:ARG:C	1:230:L:VAL:N	6	3.53
(1,636)	1:204:L:ALA:N	1:204:L:ALA:CA	1:204:L:ALA:C	1:205:L:LEU:N	9	3.53
(1,434)	1:186:H:THR:C	1:187:H:GLU:N	1:187:H:GLU:CA	1:187:H:GLU:C	7	3.53
(1,1029)	1:240:I:ASN:N	1:240:I:ASN:CA	1:240:I:ASN:C	1:241:I:THR:N	10	3.52
(1,1016)	1:239:H:THR:N	1:239:H:THR:CA	1:239:H:THR:C	1:240:H:ASN:N	3	3.52
(1,716)	1:213:H:GLU:N	1:213:H:GLU:CA	1:213:H:GLU:C	1:214:H:MET:N	4	3.52
(1,675)	1:209:I:ALA:C	1:210:I:THR:N	1:210:I:THR:CA	1:210:I:THR:C	9	3.52
(1,269)	1:170:K:LYS:C	1:171:K:THR:N	1:171:K:THR:CA	1:171:K:THR:C	7	3.52
(1,864)	1:226:L:HIS:N	1:226:L:HIS:CA	1:226:L:HIS:C	1:227:L:LYS:N	8	3.51
(1,540)	1:196:L:PRO:N	1:196:L:PRO:CA	1:196:L:PRO:C	1:197:L:ASP:N	9	3.51
(1,380)	1:182:H:LYS:N	1:182:H:LYS:CA	1:182:H:LYS:C	1:183:H:ASN:N	7	3.51
(1,65)	1:152:K:ASP:N	1:152:K:ASP:CA	1:152:K:ASP:C	1:153:K:ILE:N	7	3.51
(1,1022)	1:239:H:THR:C	1:240:H:ASN:N	1:240:H:ASN:CA	1:240:H:ASN:C	1	3.5
(1,814)	1:221:J:VAL:N	1:221:J:VAL:CA	1:221:J:VAL:C	1:222:J:GLY:N	4	3.5
(1,70)	1:153:J:ILE:N	1:153:J:ILE:CA	1:153:J:ILE:C	1:154:J:ARG:N	1	3.5
(1,1011)	1:238:I:VAL:C	1:239:I:THR:N	1:239:I:THR:CA	1:239:I:THR:C	4	3.49
(1,906)	1:229:L:ARG:C	1:230:L:VAL:N	1:230:L:VAL:CA	1:230:L:VAL:C	4	3.49
(1,307)	1:174:G:ALA:N	1:174:G:ALA:CA	1:174:G:ALA:C	1:175:G:GLU:N	5	3.49
(1,1023)	1:239:I:THR:C	1:240:I:ASN:N	1:240:I:ASN:CA	1:240:I:ASN:C	3	3.48
(1,692)	1:211:H:LEU:N	1:211:H:LEU:CA	1:211:H:LEU:C	1:212:H:GLU:N	8	3.48
(1,1039)	1:241:G:THR:N	1:241:G:THR:CA	1:241:G:THR:C	1:242:G:ALA:N	3	3.47
(1,446)	1:187:H:GLU:C	1:188:H:THR:N	1:188:H:THR:CA	1:188:H:THR:C	10	3.47
(1,416)	1:185:H:MET:N	1:185:H:MET:CA	1:185:H:MET:C	1:186:H:THR:N	9	3.47
(1,1010)	1:238:H:VAL:C	1:239:H:THR:N	1:239:H:THR:CA	1:239:H:THR:C	3	3.46
(1,820)	1:222:J:GLY:N	1:222:J:GLY:CA	1:222:J:GLY:C	1:223:J:GLY:N	4	3.46
(1,434)	1:186:H:THR:C	1:187:H:GLU:N	1:187:H:GLU:CA	1:187:H:GLU:C	1	3.46
(1,314)	1:176:H:GLN:C	1:177:H:ALA:N	1:177:H:ALA:CA	1:177:H:ALA:C	10	3.46
(1,229)	1:167:G:ARG:C	1:168:G:PHE:N	1:168:G:PHE:CA	1:168:G:PHE:C	6	3.46
(1,906)	1:229:L:ARG:C	1:230:L:VAL:N	1:230:L:VAL:CA	1:230:L:VAL:C	1	3.45
(1,741)	1:215:I:MET:N	1:215:I:MET:CA	1:215:I:MET:C	1:216:I:THR:N	2	3.45
(1,434)	1:186:H:THR:C	1:187:H:GLU:N	1:187:H:GLU:CA	1:187:H:GLU:C	6	3.45
(1,307)	1:174:G:ALA:N	1:174:G:ALA:CA	1:174:G:ALA:C	1:175:G:GLU:N	6	3.44
(1,62)	1:152:H:ASP:N	1:152:H:ASP:CA	1:152:H:ASP:C	1:153:H:ILE:N	4	3.44
(1,1103)	1:207:K:PRO:N	1:207:K:PRO:CA	1:207:K:PRO:C	1:208:K:GLY:N	4	3.43
(1,1041)	1:241:I:THR:N	1:241:I:THR:CA	1:241:I:THR:C	1:242:I:ALA:N	3	3.43
(1,974)	1:235:H:MET:C	1:236:H:SER:N	1:236:H:SER:CA	1:236:H:SER:C	3	3.43
(1,1010)	1:238:H:VAL:C	1:239:H:THR:N	1:239:H:THR:CA	1:239:H:THR:C	8	3.42
(1,677)	1:209:K:ALA:C	1:210:K:THR:N	1:210:K:THR:CA	1:210:K:THR:C	1	3.42
(1,1028)	1:240:H:ASN:N	1:240:H:ASN:CA	1:240:H:ASN:C	1:241:H:THR:N	6	3.41
(1,1010)	1:238:H:VAL:C	1:239:H:THR:N	1:239:H:THR:CA	1:239:H:THR:C	4	3.41
(1,1009)	1:238:G:VAL:C	1:239:G:THR:N	1:239:G:THR:CA	1:239:G:THR:C	1	3.41
(1,478)	1:190:J:LEU:N	1:190:J:LEU:CA	1:190:J:LEU:C	1:191:J:VAL:N	9	3.41
(1,37)	1:148:G:THR:C	1:149:G:SER:N	1:149:G:SER:CA	1:149:G:SER:C	4	3.39
(1,980)	1:236:H:SER:N	1:236:H:SER:CA	1:236:H:SER:C	1:237:H:GLN:N	1	3.38
(1,1079)	1:175:K:GLU:N	1:175:K:GLU:CA	1:175:K:GLU:C	1:176:K:GLN:N	1	3.37
(1,741)	1:215:I:MET:N	1:215:I:MET:CA	1:215:I:MET:C	1:216:I:THR:N	7	3.37
(1,28)	1:147:J:PRO:N	1:147:J:PRO:CA	1:147:J:PRO:C	1:148:J:THR:N	3	3.37
(1,921)	1:231:I:LEU:N	1:231:I:LEU:CA	1:231:I:LEU:C	1:232:I:ALA:N	10	3.36
(1,894)	1:228:L:ALA:C	1:229:L:ARG:N	1:229:L:ARG:CA	1:229:L:ARG:C	2	3.36

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,434)	1:186:H:THR:C	1:187:H:GLU:N	1:187:H:GLU:CA	1:187:H:GLU:C	3	3.36
(1,434)	1:186:H:THR:C	1:187:H:GLU:N	1:187:H:GLU:CA	1:187:H:GLU:C	5	3.36
(1,381)	1:182:I:LYS:N	1:182:I:LYS:CA	1:182:I:LYS:C	1:183:I:ASN:N	9	3.35
(1,381)	1:182:I:LYS:N	1:182:I:LYS:CA	1:182:I:LYS:C	1:183:I:ASN:N	2	3.34
(1,26)	1:147:H:PRO:N	1:147:H:PRO:CA	1:147:H:PRO:C	1:148:H:THR:N	8	3.34
(1,380)	1:182:H:LYS:N	1:182:H:LYS:CA	1:182:H:LYS:C	1:183:H:ASN:N	5	3.33
(1,889)	1:228:G:ALA:C	1:229:G:ARG:N	1:229:G:ARG:CA	1:229:G:ARG:C	4	3.32
(1,820)	1:222:J:GLY:N	1:222:J:GLY:CA	1:222:J:GLY:C	1:223:J:GLY:N	8	3.32
(1,153)	1:161:I:PHE:N	1:161:I:PHE:CA	1:161:I:PHE:C	1:162:I:ARG:N	4	3.32
(1,446)	1:187:H:GLU:C	1:188:H:THR:N	1:188:H:THR:CA	1:188:H:THR:C	2	3.31
(1,320)	1:177:H:ALA:N	1:177:H:ALA:CA	1:177:H:ALA:C	1:178:H:SER:N	5	3.31
(1,1034)	1:240:H:ASN:C	1:241:H:THR:N	1:241:H:THR:CA	1:241:H:THR:C	8	3.3
(1,802)	1:220:J:GLY:N	1:220:J:GLY:CA	1:220:J:GLY:C	1:221:J:VAL:N	10	3.3
(1,449)	1:187:K:GLU:C	1:188:K:THR:N	1:188:K:THR:CA	1:188:K:THR:C	6	3.3
(1,423)	1:185:I:MET:C	1:186:I:THR:N	1:186:I:THR:CA	1:186:I:THR:C	10	3.3
(1,125)	1:158:K:LYS:C	1:159:K:GLU:N	1:159:K:GLU:CA	1:159:K:GLU:C	7	3.3
(1,911)	1:230:K:VAL:N	1:230:K:VAL:CA	1:230:K:VAL:C	1:231:K:LEU:N	2	3.29
(1,903)	1:229:I:ARG:C	1:230:I:VAL:N	1:230:I:VAL:CA	1:230:I:VAL:C	7	3.29
(1,449)	1:187:K:GLU:C	1:188:K:THR:N	1:188:K:THR:CA	1:188:K:THR:C	10	3.29
(1,1041)	1:241:I:THR:N	1:241:I:THR:CA	1:241:I:THR:C	1:242:I:ALA:N	2	3.28
(1,115)	1:158:G:LYS:N	1:158:G:LYS:CA	1:158:G:LYS:C	1:159:G:GLU:N	5	3.28
(1,1013)	1:238:K:VAL:C	1:239:K:THR:N	1:239:K:THR:CA	1:239:K:THR:C	2	3.27
(1,426)	1:185:L:MET:C	1:186:L:THR:N	1:186:L:THR:CA	1:186:L:THR:C	6	3.27
(1,320)	1:177:H:ALA:N	1:177:H:ALA:CA	1:177:H:ALA:C	1:178:H:SER:N	4	3.27
(1,230)	1:167:H:ARG:C	1:168:H:PHE:N	1:168:H:PHE:CA	1:168:H:PHE:C	9	3.27
(1,65)	1:152:K:ASP:N	1:152:K:ASP:CA	1:152:K:ASP:C	1:153:K:ILE:N	4	3.27
(1,28)	1:147:J:PRO:N	1:147:J:PRO:CA	1:147:J:PRO:C	1:148:J:THR:N	1	3.27
(1,1042)	1:241:J:THR:N	1:241:J:THR:CA	1:241:J:THR:C	1:242:J:ALA:N	2	3.26
(1,436)	1:186:J:THR:C	1:187:J:GLU:N	1:187:J:GLU:CA	1:187:J:GLU:C	8	3.26
(1,1033)	1:240:G:ASN:C	1:241:G:THR:N	1:241:G:THR:CA	1:241:G:THR:C	5	3.25
(1,416)	1:185:H:MET:N	1:185:H:MET:CA	1:185:H:MET:C	1:186:H:THR:N	8	3.25
(1,312)	1:174:L:ALA:N	1:174:L:ALA:CA	1:174:L:ALA:C	1:175:L:GLU:N	3	3.25
(1,827)	1:223:K:GLY:N	1:223:K:GLY:CA	1:223:K:GLY:C	1:224:K:PRO:N	3	3.24
(1,424)	1:185:J:MET:C	1:186:J:THR:N	1:186:J:THR:CA	1:186:J:THR:C	3	3.24
(1,815)	1:221:K:VAL:N	1:221:K:VAL:CA	1:221:K:VAL:C	1:222:K:GLY:N	8	3.23
(1,534)	1:195:L:ASN:C	1:196:L:PRO:N	1:196:L:PRO:CA	1:196:L:PRO:C	9	3.23
(1,59)	1:151:K:LEU:N	1:151:K:LEU:CA	1:151:K:LEU:C	1:152:K:ASP:N	7	3.23
(1,243)	1:168:I:PHE:C	1:169:I:TYR:N	1:169:I:TYR:CA	1:169:I:TYR:C	4	3.22
(1,1073)	1:174:K:ALA:C	1:175:K:GLU:N	1:175:K:GLU:CA	1:175:K:GLU:C	4	3.21
(1,1072)	1:174:J:ALA:C	1:175:J:GLU:N	1:175:J:GLU:CA	1:175:J:GLU:C	5	3.21
(1,1011)	1:238:I:VAL:C	1:239:I:THR:N	1:239:I:THR:CA	1:239:I:THR:C	3	3.21
(1,897)	1:229:I:ARG:N	1:229:I:ARG:CA	1:229:I:ARG:C	1:230:I:VAL:N	10	3.21
(1,868)	1:226:J:HIS:C	1:227:J:LYS:N	1:227:J:LYS:CA	1:227:J:LYS:C	1	3.21
(1,314)	1:176:H:GLN:C	1:177:H:ALA:N	1:177:H:ALA:CA	1:177:H:ALA:C	5	3.21
(1,767)	1:217:K:ALA:N	1:217:K:ALA:CA	1:217:K:ALA:C	1:218:K:CYS:N	6	3.2
(1,728)	1:214:H:MET:N	1:214:H:MET:CA	1:214:H:MET:C	1:215:H:MET:N	9	3.2
(1,441)	1:187:I:GLU:N	1:187:I:GLU:CA	1:187:I:GLU:C	1:188:I:THR:N	6	3.2
(1,529)	1:195:G:ASN:C	1:196:G:PRO:N	1:196:G:PRO:CA	1:196:G:PRO:C	6	3.19
(1,107)	1:157:K:PRO:N	1:157:K:PRO:CA	1:157:K:PRO:C	1:158:K:LYS:N	4	3.19
(1,1113)	1:242:I:ALA:N	1:242:I:ALA:CA	1:242:I:ALA:C	1:243:I:THR:N	8	3.18
(1,1017)	1:239:I:THR:N	1:239:I:THR:CA	1:239:I:THR:C	1:240:I:ASN:N	7	3.18

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,1016)	1:239:H:THR:N	1:239:H:THR:CA	1:239:H:THR:C	1:240:H:ASN:N	6	3.18
(1,1012)	1:238:J:VAL:C	1:239:J:THR:N	1:239:J:THR:CA	1:239:J:THR:C	10	3.18
(1,1015)	1:239:G:THR:N	1:239:G:THR:CA	1:239:G:THR:C	1:240:G:ASN:N	5	3.17
(1,793)	1:219:G:GLN:C	1:220:G:GLY:N	1:220:G:GLY:CA	1:220:G:GLY:C	6	3.17
(1,764)	1:217:H:ALA:N	1:217:H:ALA:CA	1:217:H:ALA:C	1:218:H:CYS:N	1	3.17
(1,451)	1:188:G:THR:N	1:188:G:THR:CA	1:188:G:THR:C	1:189:G:LEU:N	9	3.17
(1,889)	1:228:G:ALA:C	1:229:G:ARG:N	1:229:G:ARG:CA	1:229:G:ARG:C	6	3.16
(1,592)	1:200:J:THR:C	1:201:J:ILE:N	1:201:J:ILE:CA	1:201:J:ILE:C	1	3.16
(1,117)	1:158:I:LYS:N	1:158:I:LYS:CA	1:158:I:LYS:C	1:159:I:GLU:N	9	3.16
(1,1010)	1:238:H:VAL:C	1:239:H:THR:N	1:239:H:THR:CA	1:239:H:THR:C	1	3.15
(1,1013)	1:238:K:VAL:C	1:239:K:THR:N	1:239:K:THR:CA	1:239:K:THR:C	8	3.14
(1,793)	1:219:G:GLN:C	1:220:G:GLY:N	1:220:G:GLY:CA	1:220:G:GLY:C	1	3.14
(1,60)	1:151:L:LEU:N	1:151:L:LEU:CA	1:151:L:LEU:C	1:152:L:ASP:N	9	3.14
(1,1079)	1:175:K:GLU:N	1:175:K:GLU:CA	1:175:K:GLU:C	1:176:K:GLN:N	7	3.13
(1,832)	1:223:J:GLY:C	1:224:J:PRO:N	1:224:J:PRO:CA	1:224:J:PRO:C	10	3.13
(1,675)	1:209:I:ALA:C	1:210:I:THR:N	1:210:I:THR:CA	1:210:I:THR:C	6	3.13
(1,436)	1:186:J:THR:C	1:187:J:GLU:N	1:187:J:GLU:CA	1:187:J:GLU:C	9	3.13
(1,381)	1:182:I:LYS:N	1:182:I:LYS:CA	1:182:I:LYS:C	1:183:I:ASN:N	3	3.13
(1,87)	1:154:I:ARG:C	1:155:I:GLN:N	1:155:I:GLN:CA	1:155:I:GLN:C	4	3.13
(1,1103)	1:207:K:PRO:N	1:207:K:PRO:CA	1:207:K:PRO:C	1:208:K:GLY:N	1	3.12
(1,1036)	1:240:J:ASN:C	1:241:J:THR:N	1:241:J:THR:CA	1:241:J:THR:C	4	3.12
(1,803)	1:220:K:GLY:N	1:220:K:GLY:CA	1:220:K:GLY:C	1:221:K:VAL:N	1	3.12
(1,798)	1:219:L:GLN:C	1:220:L:GLY:N	1:220:L:GLY:CA	1:220:L:GLY:C	3	3.12
(1,640)	1:204:J:ALA:C	1:205:J:LEU:N	1:205:J:LEU:CA	1:205:J:LEU:C	10	3.12
(1,1103)	1:207:K:PRO:N	1:207:K:PRO:CA	1:207:K:PRO:C	1:208:K:GLY:N	2	3.11
(1,1027)	1:240:G:ASN:N	1:240:G:ASN:CA	1:240:G:ASN:C	1:241:G:THR:N	10	3.11
(1,1023)	1:239:I:THR:C	1:240:I:ASN:N	1:240:I:ASN:CA	1:240:I:ASN:C	10	3.11
(1,1011)	1:238:I:VAL:C	1:239:I:THR:N	1:239:I:THR:CA	1:239:I:THR:C	2	3.11
(1,698)	1:211:H:LEU:C	1:212:H:GLU:N	1:212:H:GLU:CA	1:212:H:GLU:C	8	3.11
(1,380)	1:182:H:LYS:N	1:182:H:LYS:CA	1:182:H:LYS:C	1:183:H:ASN:N	4	3.11
(1,71)	1:153:K:ILE:N	1:153:K:ILE:CA	1:153:K:ILE:C	1:154:K:ARG:N	4	3.11
(1,895)	1:229:G:ARG:N	1:229:G:ARG:CA	1:229:G:ARG:C	1:230:G:VAL:N	2	3.1
(1,502)	1:192:J:GLN:N	1:192:J:GLN:CA	1:192:J:GLN:C	1:193:J:ASN:N	5	3.1
(1,64)	1:152:J:ASP:N	1:152:J:ASP:CA	1:152:J:ASP:C	1:153:J:ILE:N	4	3.1
(1,62)	1:152:H:ASP:N	1:152:H:ASP:CA	1:152:H:ASP:C	1:153:H:ILE:N	10	3.1
(1,815)	1:221:K:VAL:N	1:221:K:VAL:CA	1:221:K:VAL:C	1:222:K:GLY:N	1	3.09
(1,534)	1:195:L:ASN:C	1:196:L:PRO:N	1:196:L:PRO:CA	1:196:L:PRO:C	7	3.09
(1,269)	1:170:K:LYS:C	1:171:K:THR:N	1:171:K:THR:CA	1:171:K:THR:C	1	3.09
(1,60)	1:151:L:LEU:N	1:151:L:LEU:CA	1:151:L:LEU:C	1:152:L:ASP:N	1	3.09
(1,1012)	1:238:J:VAL:C	1:239:J:THR:N	1:239:J:THR:CA	1:239:J:THR:C	9	3.08
(1,85)	1:154:G:ARG:C	1:155:G:GLN:N	1:155:G:GLN:CA	1:155:G:GLN:C	5	3.08
(1,59)	1:151:K:LEU:N	1:151:K:LEU:CA	1:151:K:LEU:C	1:152:K:ASP:N	9	3.08
(1,857)	1:225:K:GLY:C	1:226:K:HIS:N	1:226:K:HIS:CA	1:226:K:HIS:C	1	3.07
(1,14)	1:146:H:SER:N	1:146:H:SER:CA	1:146:H:SER:C	1:147:H:PRO:N	1	3.07
(1,1114)	1:242:J:ALA:N	1:242:J:ALA:CA	1:242:J:ALA:C	1:243:J:THR:N	5	3.06
(1,1019)	1:239:K:THR:N	1:239:K:THR:CA	1:239:K:THR:C	1:240:K:ASN:N	9	3.06
(1,1011)	1:238:I:VAL:C	1:239:I:THR:N	1:239:I:THR:CA	1:239:I:THR:C	8	3.06
(1,896)	1:229:H:ARG:N	1:229:H:ARG:CA	1:229:H:ARG:C	1:230:H:VAL:N	5	3.06
(1,1036)	1:240:J:ASN:C	1:241:J:THR:N	1:241:J:THR:CA	1:241:J:THR:C	5	3.05
(1,889)	1:228:G:ALA:C	1:229:G:ARG:N	1:229:G:ARG:CA	1:229:G:ARG:C	9	3.05
(1,759)	1:216:I:THR:C	1:217:I:ALA:N	1:217:I:ALA:CA	1:217:I:ALA:C	3	3.05

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,669)	1:209:I:ALA:N	1:209:I:ALA:CA	1:209:I:ALA:C	1:210:I:THR:N	5	3.05
(1,451)	1:188:G:THR:N	1:188:G:THR:CA	1:188:G:THR:C	1:189:G:LEU:N	4	3.05
(1,1030)	1:240:J:ASN:N	1:240:J:ASN:CA	1:240:J:ASN:C	1:241:J:THR:N	9	3.04
(1,1013)	1:238:K:VAL:C	1:239:K:THR:N	1:239:K:THR:CA	1:239:K:THR:C	7	3.03
(1,974)	1:235:H:MET:C	1:236:H:SER:N	1:236:H:SER:CA	1:236:H:SER:C	9	3.03
(1,758)	1:216:H:THR:C	1:217:H:ALA:N	1:217:H:ALA:CA	1:217:H:ALA:C	3	3.03
(1,540)	1:196:L:PRO:N	1:196:L:PRO:CA	1:196:L:PRO:C	1:197:L:ASP:N	5	3.02
(1,168)	1:162:L:ARG:N	1:162:L:ARG:CA	1:162:L:ARG:C	1:163:L:ASP:N	6	3.02
(1,489)	1:191:I:VAL:N	1:191:I:VAL:CA	1:191:I:VAL:C	1:192:I:GLN:N	3	3.01
(1,60)	1:151:L:LEU:N	1:151:L:LEU:CA	1:151:L:LEU:C	1:152:L:ASP:N	4	3.01
(1,610)	1:202:J:LEU:N	1:202:J:LEU:CA	1:202:J:LEU:C	1:203:J:LYS:N	6	3.0
(1,531)	1:195:I:ASN:C	1:196:I:PRO:N	1:196:I:PRO:CA	1:196:I:PRO:C	9	3.0
(1,39)	1:148:I:THR:C	1:149:I:SER:N	1:149:I:SER:CA	1:149:I:SER:C	6	3.0
(1,1103)	1:207:K:PRO:N	1:207:K:PRO:CA	1:207:K:PRO:C	1:208:K:GLY:N	10	2.99
(1,1041)	1:241:I:THR:N	1:241:I:THR:CA	1:241:I:THR:C	1:242:I:ALA:N	1	2.99
(1,1028)	1:240:H:ASN:N	1:240:H:ASN:CA	1:240:H:ASN:C	1:241:H:THR:N	3	2.99
(1,947)	1:233:K:GLU:N	1:233:K:GLU:CA	1:233:K:GLU:C	1:234:K:ALA:N	6	2.98
(1,764)	1:217:H:ALA:N	1:217:H:ALA:CA	1:217:H:ALA:C	1:218:H:CYS:N	5	2.98
(1,1022)	1:239:H:THR:C	1:240:H:ASN:N	1:240:H:ASN:CA	1:240:H:ASN:C	4	2.97
(1,1013)	1:238:K:VAL:C	1:239:K:THR:N	1:239:K:THR:CA	1:239:K:THR:C	1	2.97
(1,896)	1:229:H:ARG:N	1:229:H:ARG:CA	1:229:H:ARG:C	1:230:H:VAL:N	2	2.97
(1,675)	1:209:I:ALA:C	1:210:I:THR:N	1:210:I:THR:CA	1:210:I:THR:C	7	2.97
(1,1103)	1:207:K:PRO:N	1:207:K:PRO:CA	1:207:K:PRO:C	1:208:K:GLY:N	7	2.96
(1,1037)	1:240:K:ASN:C	1:241:K:THR:N	1:241:K:THR:CA	1:241:K:THR:C	8	2.96
(1,823)	1:223:G:GLY:N	1:223:G:GLY:CA	1:223:G:GLY:C	1:224:G:PRO:N	10	2.96
(1,1101)	1:207:I:PRO:N	1:207:I:PRO:CA	1:207:I:PRO:C	1:208:I:GLY:N	2	2.95
(1,1020)	1:239:L:THR:N	1:239:L:THR:CA	1:239:L:THR:C	1:240:L:ASN:N	6	2.95
(1,1016)	1:239:H:THR:N	1:239:H:THR:CA	1:239:H:THR:C	1:240:H:ASN:N	9	2.95
(1,796)	1:219:J:GLN:C	1:220:J:GLY:N	1:220:J:GLY:CA	1:220:J:GLY:C	6	2.95
(1,658)	1:208:J:GLY:N	1:208:J:GLY:CA	1:208:J:GLY:C	1:209:J:ALA:N	5	2.95
(1,494)	1:191:H:VAL:C	1:192:H:GLN:N	1:192:H:GLN:CA	1:192:H:GLN:C	8	2.95
(1,1035)	1:240:I:ASN:C	1:241:I:THR:N	1:241:I:THR:CA	1:241:I:THR:C	8	2.94
(1,1002)	1:237:L:GLN:C	1:238:L:VAL:N	1:238:L:VAL:CA	1:238:L:VAL:C	5	2.94
(1,793)	1:219:G:GLN:C	1:220:G:GLY:N	1:220:G:GLY:CA	1:220:G:GLY:C	8	2.94
(1,454)	1:188:J:THR:N	1:188:J:THR:CA	1:188:J:THR:C	1:189:J:LEU:N	1	2.94
(1,1101)	1:207:I:PRO:N	1:207:I:PRO:CA	1:207:I:PRO:C	1:208:I:GLY:N	8	2.93
(1,1042)	1:241:J:THR:N	1:241:J:THR:CA	1:241:J:THR:C	1:242:J:ALA:N	7	2.93
(1,988)	1:236:J:SER:C	1:237:J:GLN:N	1:237:J:GLN:CA	1:237:J:GLN:C	10	2.92
(1,486)	1:190:L:LEU:C	1:191:L:VAL:N	1:191:L:VAL:CA	1:191:L:VAL:C	5	2.92
(1,580)	1:199:J:LYS:C	1:200:J:THR:N	1:200:J:THR:CA	1:200:J:THR:C	8	2.91
(1,62)	1:152:H:ASP:N	1:152:H:ASP:CA	1:152:H:ASP:C	1:153:H:ILE:N	6	2.91
(1,663)	1:208:I:GLY:C	1:209:I:ALA:N	1:209:I:ALA:CA	1:209:I:ALA:C	4	2.9
(1,530)	1:195:H:ASN:C	1:196:H:PRO:N	1:196:H:PRO:CA	1:196:H:PRO:C	7	2.9
(1,1073)	1:174:K:ALA:C	1:175:K:GLU:N	1:175:K:GLU:CA	1:175:K:GLU:C	2	2.89
(1,1038)	1:240:L:ASN:C	1:241:L:THR:N	1:241:L:THR:CA	1:241:L:THR:C	10	2.89
(1,1013)	1:238:K:VAL:C	1:239:K:THR:N	1:239:K:THR:CA	1:239:K:THR:C	10	2.89
(1,182)	1:163:H:ASP:C	1:164:H:TYR:N	1:164:H:TYR:CA	1:164:H:TYR:C	4	2.89
(1,803)	1:220:K:GLY:N	1:220:K:GLY:CA	1:220:K:GLY:C	1:221:K:VAL:N	9	2.88
(1,634)	1:204:J:ALA:N	1:204:J:ALA:CA	1:204:J:ALA:C	1:205:J:LEU:N	10	2.88
(1,316)	1:176:J:GLN:C	1:177:J:ALA:N	1:177:J:ALA:CA	1:177:J:ALA:C	4	2.87
(1,36)	1:147:L:PRO:C	1:148:L:THR:N	1:148:L:THR:CA	1:148:L:THR:C	4	2.87

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,1041)	1:241:I:THR:N	1:241:I:THR:CA	1:241:I:THR:C	1:242:I:ALA:N	7	2.86
(1,1032)	1:240:L:ASN:N	1:240:L:ASN:CA	1:240:L:ASN:C	1:241:L:THR:N	6	2.86
(1,813)	1:221:I:VAL:N	1:221:I:VAL:CA	1:221:I:VAL:C	1:222:I:GLY:N	3	2.86
(1,803)	1:220:K:GLY:N	1:220:K:GLY:CA	1:220:K:GLY:C	1:221:K:VAL:N	6	2.86
(1,634)	1:204:J:ALA:N	1:204:J:ALA:CA	1:204:J:ALA:C	1:205:J:LEU:N	1	2.86
(1,484)	1:190:J:LEU:C	1:191:J:VAL:N	1:191:J:VAL:CA	1:191:J:VAL:C	1	2.86
(1,175)	1:163:G:ASP:N	1:163:G:ASP:CA	1:163:G:ASP:C	1:164:G:TYR:N	2	2.86
(1,120)	1:158:L:LYS:N	1:158:L:LYS:CA	1:158:L:LYS:C	1:159:L:GLU:N	2	2.86
(1,119)	1:158:K:LYS:N	1:158:K:LYS:CA	1:158:K:LYS:C	1:159:K:GLU:N	7	2.86
(1,87)	1:154:I:ARG:C	1:155:I:GLN:N	1:155:I:GLN:CA	1:155:I:GLN:C	1	2.86
(1,581)	1:199:K:LYS:C	1:200:K:THR:N	1:200:K:THR:CA	1:200:K:THR:C	2	2.85
(1,444)	1:187:L:GLU:N	1:187:L:GLU:CA	1:187:L:GLU:C	1:188:L:THR:N	4	2.85
(1,305)	1:173:K:ARG:C	1:174:K:ALA:N	1:174:K:ALA:CA	1:174:K:ALA:C	9	2.85
(1,849)	1:225:I:GLY:N	1:225:I:GLY:CA	1:225:I:GLY:C	1:226:I:HIS:N	8	2.84
(1,814)	1:221:J:VAL:N	1:221:J:VAL:CA	1:221:J:VAL:C	1:222:J:GLY:N	9	2.84
(1,451)	1:188:G:THR:N	1:188:G:THR:CA	1:188:G:THR:C	1:189:G:LEU:N	1	2.84
(1,451)	1:188:G:THR:N	1:188:G:THR:CA	1:188:G:THR:C	1:189:G:LEU:N	3	2.84
(1,178)	1:163:J:ASP:N	1:163:J:ASP:CA	1:163:J:ASP:C	1:164:J:TYR:N	7	2.84
(1,1013)	1:238:K:VAL:C	1:239:K:THR:N	1:239:K:THR:CA	1:239:K:THR:C	9	2.83
(1,896)	1:229:H:ARG:N	1:229:H:ARG:CA	1:229:H:ARG:C	1:230:H:VAL:N	7	2.83
(1,534)	1:195:L:ASN:C	1:196:L:PRO:N	1:196:L:PRO:CA	1:196:L:PRO:C	5	2.83
(1,675)	1:209:I:ALA:C	1:210:I:THR:N	1:210:I:THR:CA	1:210:I:THR:C	10	2.82
(1,242)	1:168:H:PHE:C	1:169:H:TYR:N	1:169:H:TYR:CA	1:169:H:TYR:C	9	2.82
(1,327)	1:177:I:ALA:C	1:178:I:SER:N	1:178:I:SER:CA	1:178:I:SER:C	3	2.81
(1,315)	1:176:I:GLN:C	1:177:I:ALA:N	1:177:I:ALA:CA	1:177:I:ALA:C	2	2.81
(1,37)	1:148:G:THR:C	1:149:G:SER:N	1:149:G:SER:CA	1:149:G:SER:C	9	2.81
(1,1042)	1:241:J:THR:N	1:241:J:THR:CA	1:241:J:THR:C	1:242:J:ALA:N	8	2.8
(1,896)	1:229:H:ARG:N	1:229:H:ARG:CA	1:229:H:ARG:C	1:230:H:VAL:N	1	2.8
(1,314)	1:176:H:GLN:C	1:177:H:ALA:N	1:177:H:ALA:CA	1:177:H:ALA:C	3	2.8
(1,1031)	1:240:K:ASN:N	1:240:K:ASN:CA	1:240:K:ASN:C	1:241:K:THR:N	4	2.79
(1,1019)	1:239:K:THR:N	1:239:K:THR:CA	1:239:K:THR:C	1:240:K:ASN:N	4	2.79
(1,1009)	1:238:G:VAL:C	1:239:G:THR:N	1:239:G:THR:CA	1:239:G:THR:C	2	2.79
(1,973)	1:235:G:MET:C	1:236:G:SER:N	1:236:G:SER:CA	1:236:G:SER:C	5	2.79
(1,921)	1:231:I:LEU:N	1:231:I:LEU:CA	1:231:I:LEU:C	1:232:I:ALA:N	2	2.79
(1,693)	1:211:I:LEU:N	1:211:I:LEU:CA	1:211:I:LEU:C	1:212:I:GLU:N	4	2.79
(1,243)	1:168:I:PHE:C	1:169:I:TYR:N	1:169:I:TYR:CA	1:169:I:TYR:C	8	2.79
(1,1103)	1:207:K:PRO:N	1:207:K:PRO:CA	1:207:K:PRO:C	1:208:K:GLY:N	5	2.78
(1,540)	1:196:L:PRO:N	1:196:L:PRO:CA	1:196:L:PRO:C	1:197:L:ASP:N	7	2.78
(1,451)	1:188:G:THR:N	1:188:G:THR:CA	1:188:G:THR:C	1:189:G:LEU:N	8	2.78
(1,320)	1:177:H:ALA:N	1:177:H:ALA:CA	1:177:H:ALA:C	1:178:H:SER:N	3	2.78
(1,716)	1:213:H:GLU:N	1:213:H:GLU:CA	1:213:H:GLU:C	1:214:H:MET:N	8	2.76
(1,450)	1:187:L:GLU:C	1:188:L:THR:N	1:188:L:THR:CA	1:188:L:THR:C	3	2.76
(1,447)	1:187:I:GLU:C	1:188:I:THR:N	1:188:I:THR:CA	1:188:I:THR:C	4	2.76
(1,232)	1:167:J:ARG:C	1:168:J:PHE:N	1:168:J:PHE:CA	1:168:J:PHE:C	9	2.76
(1,229)	1:167:G:ARG:C	1:168:G:PHE:N	1:168:G:PHE:CA	1:168:G:PHE:C	2	2.76
(1,104)	1:157:H:PRO:N	1:157:H:PRO:CA	1:157:H:PRO:C	1:158:H:LYS:N	8	2.76
(1,88)	1:154:J:ARG:C	1:155:J:GLN:N	1:155:J:GLN:CA	1:155:J:GLN:C	2	2.76
(1,1016)	1:239:H:THR:N	1:239:H:THR:CA	1:239:H:THR:C	1:240:H:ASN:N	8	2.75
(1,434)	1:186:H:THR:C	1:187:H:GLU:N	1:187:H:GLU:CA	1:187:H:GLU:C	4	2.75
(1,175)	1:163:G:ASP:N	1:163:G:ASP:CA	1:163:G:ASP:C	1:164:G:TYR:N	3	2.75
(1,488)	1:191:H:VAL:N	1:191:H:VAL:CA	1:191:H:VAL:C	1:192:H:GLN:N	7	2.74

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,41)	1:148:K:THR:C	1:149:K:SER:N	1:149:K:SER:CA	1:149:K:SER:C	2	2.74
(1,1002)	1:237:L:GLN:C	1:238:L:VAL:N	1:238:L:VAL:CA	1:238:L:VAL:C	4	2.73
(1,416)	1:185:H:MET:N	1:185:H:MET:CA	1:185:H:MET:C	1:186:H:THR:N	7	2.73
(1,312)	1:174:L:ALA:N	1:174:L:ALA:CA	1:174:L:ALA:C	1:175:L:GLU:N	4	2.73
(1,1013)	1:238:K:VAL:C	1:239:K:THR:N	1:239:K:THR:CA	1:239:K:THR:C	4	2.72
(1,511)	1:193:G:ASN:N	1:193:G:ASN:CA	1:193:G:ASN:C	1:194:G:ALA:N	10	2.72
(1,495)	1:191:I:VAL:C	1:192:I:GLN:N	1:192:I:GLN:CA	1:192:I:GLN:C	3	2.72
(1,230)	1:167:H:ARG:C	1:168:H:PHE:N	1:168:H:PHE:CA	1:168:H:PHE:C	3	2.72
(1,894)	1:228:L:ALA:C	1:229:L:ARG:N	1:229:L:ARG:CA	1:229:L:ARG:C	9	2.71
(1,634)	1:204:J:ALA:N	1:204:J:ALA:CA	1:204:J:ALA:C	1:205:J:LEU:N	5	2.71
(1,1019)	1:239:K:THR:N	1:239:K:THR:CA	1:239:K:THR:C	1:240:K:ASN:N	2	2.7
(1,976)	1:235:J:MET:C	1:236:J:SER:N	1:236:J:SER:CA	1:236:J:SER:C	1	2.7
(1,973)	1:235:G:MET:C	1:236:G:SER:N	1:236:G:SER:CA	1:236:G:SER:C	6	2.7
(1,828)	1:223:L:GLY:N	1:223:L:GLY:CA	1:223:L:GLY:C	1:224:L:PRO:N	8	2.7
(1,802)	1:220:J:GLY:N	1:220:J:GLY:CA	1:220:J:GLY:C	1:221:J:VAL:N	2	2.7
(1,640)	1:204:J:ALA:C	1:205:J:LEU:N	1:205:J:LEU:CA	1:205:J:LEU:C	8	2.7
(1,107)	1:157:K:PRO:N	1:157:K:PRO:CA	1:157:K:PRO:C	1:158:K:LYS:N	8	2.7
(1,529)	1:195:G:ASN:C	1:196:G:PRO:N	1:196:G:PRO:CA	1:196:G:PRO:C	10	2.69
(1,418)	1:185:J:MET:N	1:185:J:MET:CA	1:185:J:MET:C	1:186:J:THR:N	6	2.69
(1,1029)	1:240:I:ASN:N	1:240:I:ASN:CA	1:240:I:ASN:C	1:241:I:THR:N	7	2.68
(1,501)	1:192:I:GLN:N	1:192:I:GLN:CA	1:192:I:GLN:C	1:193:I:ASN:N	3	2.68
(1,380)	1:182:H:LYS:N	1:182:H:LYS:CA	1:182:H:LYS:C	1:183:H:ASN:N	6	2.68
(1,229)	1:167:G:ARG:C	1:168:G:PHE:N	1:168:G:PHE:CA	1:168:G:PHE:C	1	2.68
(1,126)	1:158:L:LYS:C	1:159:L:GLU:N	1:159:L:GLU:CA	1:159:L:GLU:C	10	2.68
(1,70)	1:153:J:ILE:N	1:153:J:ILE:CA	1:153:J:ILE:C	1:154:J:ARG:N	8	2.67
(1,37)	1:148:G:THR:C	1:149:G:SER:N	1:149:G:SER:CA	1:149:G:SER:C	1	2.67
(1,1038)	1:240:L:ASN:C	1:241:L:THR:N	1:241:L:THR:CA	1:241:L:THR:C	3	2.66
(1,1028)	1:240:H:ASN:N	1:240:H:ASN:CA	1:240:H:ASN:C	1:241:H:THR:N	10	2.64
(1,1103)	1:207:K:PRO:N	1:207:K:PRO:CA	1:207:K:PRO:C	1:208:K:GLY:N	8	2.63
(1,396)	1:183:L:ASN:N	1:183:L:ASN:CA	1:183:L:ASN:C	1:184:L:TRP:N	8	2.63
(1,118)	1:158:J:LYS:N	1:158:J:LYS:CA	1:158:J:LYS:C	1:159:J:GLU:N	10	2.63
(1,1044)	1:241:L:THR:N	1:241:L:THR:CA	1:241:L:THR:C	1:242:L:ALA:N	10	2.62
(1,1018)	1:239:J:THR:N	1:239:J:THR:CA	1:239:J:THR:C	1:240:J:ASN:N	8	2.62
(1,664)	1:208:J:GLY:C	1:209:J:ALA:N	1:209:J:ALA:CA	1:209:J:ALA:C	5	2.61
(1,305)	1:173:K:ARG:C	1:174:K:ALA:N	1:174:K:ALA:CA	1:174:K:ALA:C	10	2.61
(1,236)	1:168:H:PHE:N	1:168:H:PHE:CA	1:168:H:PHE:C	1:169:H:TYR:N	8	2.61
(1,28)	1:147:J:PRO:N	1:147:J:PRO:CA	1:147:J:PRO:C	1:148:J:THR:N	5	2.61
(1,626)	1:203:H:LYS:C	1:204:H:ALA:N	1:204:H:ALA:CA	1:204:H:ALA:C	10	2.6
(1,484)	1:190:J:LEU:C	1:191:J:VAL:N	1:191:J:VAL:CA	1:191:J:VAL:C	6	2.59
(1,1103)	1:207:K:PRO:N	1:207:K:PRO:CA	1:207:K:PRO:C	1:208:K:GLY:N	9	2.58
(1,843)	1:224:I:PRO:C	1:225:I:GLY:N	1:225:I:GLY:CA	1:225:I:GLY:C	4	2.58
(1,533)	1:195:K:ASN:C	1:196:K:PRO:N	1:196:K:PRO:CA	1:196:K:PRO:C	10	2.58
(1,48)	1:149:L:SER:N	1:149:L:SER:CA	1:149:L:SER:C	1:150:L:ILE:N	10	2.58
(1,674)	1:209:H:ALA:C	1:210:H:THR:N	1:210:H:THR:CA	1:210:H:THR:C	9	2.57
(1,451)	1:188:G:THR:N	1:188:G:THR:CA	1:188:G:THR:C	1:189:G:LEU:N	6	2.57
(1,104)	1:157:H:PRO:N	1:157:H:PRO:CA	1:157:H:PRO:C	1:158:H:LYS:N	10	2.56
(1,37)	1:148:G:THR:C	1:149:G:SER:N	1:149:G:SER:CA	1:149:G:SER:C	7	2.56
(1,669)	1:209:I:ALA:N	1:209:I:ALA:CA	1:209:I:ALA:C	1:210:I:THR:N	4	2.55
(1,327)	1:177:I:ALA:C	1:178:I:SER:N	1:178:I:SER:CA	1:178:I:SER:C	2	2.55
(1,174)	1:162:L:ARG:C	1:163:L:ASP:N	1:163:L:ASP:CA	1:163:L:ASP:C	10	2.55
(1,802)	1:220:J:GLY:N	1:220:J:GLY:CA	1:220:J:GLY:C	1:221:J:VAL:N	1	2.54

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,632)	1:204:H:ALA:N	1:204:H:ALA:CA	1:204:H:ALA:C	1:205:H:LEU:N	7	2.54
(1,529)	1:195:G:ASN:C	1:196:G:PRO:N	1:196:G:PRO:CA	1:196:G:PRO:C	9	2.54
(1,1077)	1:175:I:GLU:N	1:175:I:GLU:CA	1:175:I:GLU:C	1:176:I:GLN:N	10	2.53
(1,976)	1:235:J:MET:C	1:236:J:SER:N	1:236:J:SER:CA	1:236:J:SER:C	6	2.53
(1,569)	1:198:K:CYS:C	1:199:K:LYS:N	1:199:K:LYS:CA	1:199:K:LYS:C	1	2.53
(1,42)	1:148:L:THR:C	1:149:L:SER:N	1:149:L:SER:CA	1:149:L:SER:C	1	2.52
(1,90)	1:154:L:ARG:C	1:155:L:GLN:N	1:155:L:GLN:CA	1:155:L:GLN:C	4	2.51
(1,26)	1:147:H:PRO:N	1:147:H:PRO:CA	1:147:H:PRO:C	1:148:H:THR:N	3	2.51
(1,976)	1:235:J:MET:C	1:236:J:SER:N	1:236:J:SER:CA	1:236:J:SER:C	2	2.5
(1,976)	1:235:J:MET:C	1:236:J:SER:N	1:236:J:SER:CA	1:236:J:SER:C	4	2.5
(1,759)	1:216:I:THR:C	1:217:I:ALA:N	1:217:I:ALA:CA	1:217:I:ALA:C	7	2.5
(1,274)	1:171:J:THR:N	1:171:J:THR:CA	1:171:J:THR:C	1:172:J:LEU:N	4	2.5
(1,68)	1:153:H:ILE:N	1:153:H:ILE:CA	1:153:H:ILE:C	1:154:H:ARG:N	10	2.5
(1,384)	1:182:L:LYS:N	1:182:L:LYS:CA	1:182:L:LYS:C	1:183:L:ASN:N	6	2.49
(1,85)	1:154:G:ARG:C	1:155:G:GLN:N	1:155:G:GLN:CA	1:155:G:GLN:C	4	2.49
(1,1073)	1:174:K:ALA:C	1:175:K:GLU:N	1:175:K:GLU:CA	1:175:K:GLU:C	6	2.47
(1,1017)	1:239:I:THR:N	1:239:I:THR:CA	1:239:I:THR:C	1:240:I:ASN:N	6	2.47
(1,906)	1:229:L:ARG:C	1:230:L:VAL:N	1:230:L:VAL:CA	1:230:L:VAL:C	10	2.47
(1,120)	1:158:L:LYS:N	1:158:L:LYS:CA	1:158:L:LYS:C	1:159:L:GLU:N	5	2.47
(1,1072)	1:174:J:ALA:C	1:175:J:GLU:N	1:175:J:GLU:CA	1:175:J:GLU:C	7	2.46
(1,976)	1:235:J:MET:C	1:236:J:SER:N	1:236:J:SER:CA	1:236:J:SER:C	10	2.46
(1,87)	1:154:I:ARG:C	1:155:I:GLN:N	1:155:I:GLN:CA	1:155:I:GLN:C	9	2.46
(1,1037)	1:240:K:ASN:C	1:241:K:THR:N	1:241:K:THR:CA	1:241:K:THR:C	6	2.45
(1,1019)	1:239:K:THR:N	1:239:K:THR:CA	1:239:K:THR:C	1:240:K:ASN:N	10	2.45
(1,941)	1:232:K:ALA:C	1:233:K:GLU:N	1:233:K:GLU:CA	1:233:K:GLU:C	4	2.45
(1,759)	1:216:I:THR:C	1:217:I:ALA:N	1:217:I:ALA:CA	1:217:I:ALA:C	9	2.45
(1,495)	1:191:I:VAL:C	1:192:I:GLN:N	1:192:I:GLN:CA	1:192:I:GLN:C	9	2.45
(1,308)	1:174:H:ALA:N	1:174:H:ALA:CA	1:174:H:ALA:C	1:175:H:GLU:N	4	2.45
(1,60)	1:151:L:LEU:N	1:151:L:LEU:CA	1:151:L:LEU:C	1:152:L:ASP:N	2	2.45
(1,1038)	1:240:L:ASN:C	1:241:L:THR:N	1:241:L:THR:CA	1:241:L:THR:C	4	2.44
(1,447)	1:187:I:GLU:C	1:188:I:THR:N	1:188:I:THR:CA	1:188:I:THR:C	5	2.44
(1,32)	1:147:H:PRO:C	1:148:H:THR:N	1:148:H:THR:CA	1:148:H:THR:C	7	2.44
(1,1015)	1:239:G:THR:N	1:239:G:THR:CA	1:239:G:THR:C	1:240:G:ASN:N	8	2.43
(1,450)	1:187:L:GLU:C	1:188:L:THR:N	1:188:L:THR:CA	1:188:L:THR:C	7	2.43
(1,134)	1:159:H:GLU:C	1:160:H:PRO:N	1:160:H:PRO:CA	1:160:H:PRO:C	7	2.43
(1,1039)	1:241:G:THR:N	1:241:G:THR:CA	1:241:G:THR:C	1:242:G:ALA:N	8	2.42
(1,1009)	1:238:G:VAL:C	1:239:G:THR:N	1:239:G:THR:CA	1:239:G:THR:C	7	2.42
(1,309)	1:174:I:ALA:N	1:174:I:ALA:CA	1:174:I:ALA:C	1:175:I:GLU:N	4	2.42
(1,1015)	1:239:G:THR:N	1:239:G:THR:CA	1:239:G:THR:C	1:240:G:ASN:N	7	2.41
(1,1002)	1:237:L:GLN:C	1:238:L:VAL:N	1:238:L:VAL:CA	1:238:L:VAL:C	10	2.41
(1,274)	1:171:J:THR:N	1:171:J:THR:CA	1:171:J:THR:C	1:172:J:LEU:N	1	2.41
(1,273)	1:171:I:THR:N	1:171:I:THR:CA	1:171:I:THR:C	1:172:I:LEU:N	6	2.41
(1,118)	1:158:J:LYS:N	1:158:J:LYS:CA	1:158:J:LYS:C	1:159:J:GLU:N	7	2.41
(1,982)	1:236:J:SER:N	1:236:J:SER:CA	1:236:J:SER:C	1:237:J:GLN:N	7	2.4
(1,42)	1:148:L:THR:C	1:149:L:SER:N	1:149:L:SER:CA	1:149:L:SER:C	10	2.4
(1,444)	1:187:L:GLU:N	1:187:L:GLU:CA	1:187:L:GLU:C	1:188:L:THR:N	8	2.39
(1,434)	1:186:H:THR:C	1:187:H:GLU:N	1:187:H:GLU:CA	1:187:H:GLU:C	2	2.39
(1,267)	1:170:I:LYS:C	1:171:I:THR:N	1:171:I:THR:CA	1:171:I:THR:C	6	2.39
(1,172)	1:162:J:ARG:C	1:163:J:ASP:N	1:163:J:ASP:CA	1:163:J:ASP:C	4	2.39
(1,830)	1:223:H:GLY:C	1:224:H:PRO:N	1:224:H:PRO:CA	1:224:H:PRO:C	2	2.38
(1,798)	1:219:L:GLN:C	1:220:L:GLY:N	1:220:L:GLY:CA	1:220:L:GLY:C	4	2.38

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,758)	1:216:H:THR:C	1:217:H:ALA:N	1:217:H:ALA:CA	1:217:H:ALA:C	8	2.38
(1,580)	1:199:J:LYS:C	1:200:J:THR:N	1:200:J:THR:CA	1:200:J:THR:C	5	2.38
(1,529)	1:195:G:ASN:C	1:196:G:PRO:N	1:196:G:PRO:CA	1:196:G:PRO:C	3	2.38
(1,433)	1:186:G:THR:C	1:187:G:GLU:N	1:187:G:GLU:CA	1:187:G:GLU:C	6	2.38
(1,404)	1:184:H:TRP:N	1:184:H:TRP:CA	1:184:H:TRP:C	1:185:H:MET:N	3	2.38
(1,242)	1:168:H:PHE:C	1:169:H:TYR:N	1:169:H:TYR:CA	1:169:H:TYR:C	5	2.38
(1,1078)	1:175:J:GLU:N	1:175:J:GLU:CA	1:175:J:GLU:C	1:176:J:GLN:N	5	2.37
(1,1039)	1:241:G:THR:N	1:241:G:THR:CA	1:241:G:THR:C	1:242:G:ALA:N	5	2.37
(1,1028)	1:240:H:ASN:N	1:240:H:ASN:CA	1:240:H:ASN:C	1:241:H:THR:N	4	2.37
(1,993)	1:237:I:GLN:N	1:237:I:GLN:CA	1:237:I:GLN:C	1:238:I:VAL:N	8	2.37
(1,410)	1:184:H:TRP:C	1:185:H:MET:N	1:185:H:MET:CA	1:185:H:MET:C	6	2.37
(1,284)	1:172:H:LEU:N	1:172:H:LEU:CA	1:172:H:LEU:C	1:173:H:ARG:N	6	2.37
(1,984)	1:236:L:SER:N	1:236:L:SER:CA	1:236:L:SER:C	1:237:L:GLN:N	5	2.36
(1,863)	1:226:K:HIS:N	1:226:K:HIS:CA	1:226:K:HIS:C	1:227:K:LYS:N	1	2.36
(1,674)	1:209:H:ALA:C	1:210:H:THR:N	1:210:H:THR:CA	1:210:H:THR:C	6	2.36
(1,451)	1:188:G:THR:N	1:188:G:THR:CA	1:188:G:THR:C	1:189:G:LEU:N	10	2.36
(1,155)	1:161:K:PHE:N	1:161:K:PHE:CA	1:161:K:PHE:C	1:162:K:ARG:N	1	2.36
(1,85)	1:154:G:ARG:C	1:155:G:GLN:N	1:155:G:GLN:CA	1:155:G:GLN:C	1	2.36
(1,1034)	1:240:H:ASN:C	1:241:H:THR:N	1:241:H:THR:CA	1:241:H:THR:C	5	2.35
(1,444)	1:187:L:GLU:N	1:187:L:GLU:CA	1:187:L:GLU:C	1:188:L:THR:N	3	2.35
(1,973)	1:235:G:MET:C	1:236:G:SER:N	1:236:G:SER:CA	1:236:G:SER:C	2	2.34
(1,773)	1:217:K:ALA:C	1:218:K:CYS:N	1:218:K:CYS:CA	1:218:K:CYS:C	6	2.34
(1,70)	1:153:J:ILE:N	1:153:J:ILE:CA	1:153:J:ILE:C	1:154:J:ARG:N	5	2.34
(1,728)	1:214:H:MET:N	1:214:H:MET:CA	1:214:H:MET:C	1:215:H:MET:N	3	2.33
(1,435)	1:186:I:THR:C	1:187:I:GLU:N	1:187:I:GLU:CA	1:187:I:GLU:C	2	2.33
(1,174)	1:162:L:ARG:C	1:163:L:ASP:N	1:163:L:ASP:CA	1:163:L:ASP:C	9	2.33
(1,41)	1:148:K:THR:C	1:149:K:SER:N	1:149:K:SER:CA	1:149:K:SER:C	4	2.33
(1,1094)	1:206:H:GLY:C	1:207:H:PRO:N	1:207:H:PRO:CA	1:207:H:PRO:C	7	2.32
(1,396)	1:183:L:ASN:N	1:183:L:ASN:CA	1:183:L:ASN:C	1:184:L:TRP:N	2	2.32
(1,227)	1:167:K:ARG:N	1:167:K:ARG:CA	1:167:K:ARG:C	1:168:K:PHE:N	3	2.32
(1,447)	1:187:I:GLU:C	1:188:I:THR:N	1:188:I:THR:CA	1:188:I:THR:C	7	2.31
(1,309)	1:174:I:ALA:N	1:174:I:ALA:CA	1:174:I:ALA:C	1:175:I:GLU:N	8	2.31
(1,896)	1:229:H:ARG:N	1:229:H:ARG:CA	1:229:H:ARG:C	1:230:H:VAL:N	4	2.3
(1,435)	1:186:I:THR:C	1:187:I:GLU:N	1:187:I:GLU:CA	1:187:I:GLU:C	7	2.3
(1,229)	1:167:G:ARG:C	1:168:G:PHE:N	1:168:G:PHE:CA	1:168:G:PHE:C	8	2.3
(1,37)	1:148:G:THR:C	1:149:G:SER:N	1:149:G:SER:CA	1:149:G:SER:C	2	2.27
(1,904)	1:229:J:ARG:C	1:230:J:VAL:N	1:230:J:VAL:CA	1:230:J:VAL:C	4	2.26
(1,431)	1:186:K:THR:N	1:186:K:THR:CA	1:186:K:THR:C	1:187:K:GLU:N	7	2.26
(1,312)	1:174:L:ALA:N	1:174:L:ALA:CA	1:174:L:ALA:C	1:175:L:GLU:N	8	2.26
(1,634)	1:204:J:ALA:N	1:204:J:ALA:CA	1:204:J:ALA:C	1:205:J:LEU:N	2	2.25
(1,437)	1:186:K:THR:C	1:187:K:GLU:N	1:187:K:GLU:CA	1:187:K:GLU:C	1	2.25
(1,274)	1:171:J:THR:N	1:171:J:THR:CA	1:171:J:THR:C	1:172:J:LEU:N	10	2.25
(1,26)	1:147:H:PRO:N	1:147:H:PRO:CA	1:147:H:PRO:C	1:148:H:THR:N	7	2.25
(1,1015)	1:239:G:THR:N	1:239:G:THR:CA	1:239:G:THR:C	1:240:G:ASN:N	4	2.24
(1,174)	1:162:L:ARG:C	1:163:L:ASP:N	1:163:L:ASP:CA	1:163:L:ASP:C	8	2.24
(1,828)	1:223:L:GLY:N	1:223:L:GLY:CA	1:223:L:GLY:C	1:224:L:PRO:N	2	2.23
(1,793)	1:219:G:GLN:C	1:220:G:GLY:N	1:220:G:GLY:CA	1:220:G:GLY:C	7	2.23
(1,529)	1:195:G:ASN:C	1:196:G:PRO:N	1:196:G:PRO:CA	1:196:G:PRO:C	2	2.23
(1,1017)	1:239:I:THR:N	1:239:I:THR:CA	1:239:I:THR:C	1:240:I:ASN:N	2	2.22
(1,492)	1:191:L:VAL:N	1:191:L:VAL:CA	1:191:L:VAL:C	1:192:L:GLN:N	4	2.22
(1,243)	1:168:I:PHE:C	1:169:I:TYR:N	1:169:I:TYR:CA	1:169:I:TYR:C	9	2.22

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,88)	1:154:J:ARG:C	1:155:J:GLN:N	1:155:J:GLN:CA	1:155:J:GLN:C	1	2.22
(1,1042)	1:241:J:THR:N	1:241:J:THR:CA	1:241:J:THR:C	1:242:J:ALA:N	3	2.21
(1,1039)	1:241:G:THR:N	1:241:G:THR:CA	1:241:G:THR:C	1:242:G:ALA:N	9	2.21
(1,1011)	1:238:I:VAL:C	1:239:I:THR:N	1:239:I:THR:CA	1:239:I:THR:C	9	2.21
(1,984)	1:236:L:SER:N	1:236:L:SER:CA	1:236:L:SER:C	1:237:L:GLN:N	6	2.21
(1,973)	1:235:G:MET:C	1:236:G:SER:N	1:236:G:SER:CA	1:236:G:SER:C	7	2.21
(1,825)	1:223:I:GLY:N	1:223:I:GLY:CA	1:223:I:GLY:C	1:224:I:PRO:N	5	2.21
(1,449)	1:187:K:GLU:C	1:188:K:THR:N	1:188:K:THR:CA	1:188:K:THR:C	8	2.21
(1,441)	1:187:I:GLU:N	1:187:I:GLU:CA	1:187:I:GLU:C	1:188:I:THR:N	10	2.21
(1,1016)	1:239:H:THR:N	1:239:H:THR:CA	1:239:H:THR:C	1:240:H:ASN:N	10	2.2
(1,820)	1:222:J:GLY:N	1:222:J:GLY:CA	1:222:J:GLY:C	1:223:J:GLY:N	1	2.2
(1,740)	1:215:H:MET:N	1:215:H:MET:CA	1:215:H:MET:C	1:216:H:THR:N	4	2.2
(1,669)	1:209:I:ALA:N	1:209:I:ALA:CA	1:209:I:ALA:C	1:210:I:THR:N	7	2.2
(1,534)	1:195:L:ASN:C	1:196:L:PRO:N	1:196:L:PRO:CA	1:196:L:PRO:C	10	2.2
(1,491)	1:191:K:VAL:N	1:191:K:VAL:CA	1:191:K:VAL:C	1:192:K:GLN:N	4	2.19
(1,305)	1:173:K:ARG:C	1:174:K:ALA:N	1:174:K:ALA:CA	1:174:K:ALA:C	2	2.19
(1,982)	1:236:J:SER:N	1:236:J:SER:CA	1:236:J:SER:C	1:237:J:GLN:N	1	2.18
(1,449)	1:187:K:GLU:C	1:188:K:THR:N	1:188:K:THR:CA	1:188:K:THR:C	7	2.18
(1,1015)	1:239:G:THR:N	1:239:G:THR:CA	1:239:G:THR:C	1:240:G:ASN:N	3	2.17
(1,998)	1:237:H:GLN:C	1:238:H:VAL:N	1:238:H:VAL:CA	1:238:H:VAL:C	9	2.17
(1,460)	1:188:J:THR:C	1:189:J:LEU:N	1:189:J:LEU:CA	1:189:J:LEU:C	4	2.17
(1,284)	1:172:H:LEU:N	1:172:H:LEU:CA	1:172:H:LEU:C	1:173:H:ARG:N	1	2.17
(1,175)	1:163:G:ASP:N	1:163:G:ASP:CA	1:163:G:ASP:C	1:164:G:TYR:N	4	2.17
(1,998)	1:237:H:GLN:C	1:238:H:VAL:N	1:238:H:VAL:CA	1:238:H:VAL:C	5	2.16
(1,311)	1:174:K:ALA:N	1:174:K:ALA:CA	1:174:K:ALA:C	1:175:K:GLU:N	3	2.16
(1,716)	1:213:H:GLU:N	1:213:H:GLU:CA	1:213:H:GLU:C	1:214:H:MET:N	2	2.15
(1,531)	1:195:I:ASN:C	1:196:I:PRO:N	1:196:I:PRO:CA	1:196:I:PRO:C	7	2.15
(1,529)	1:195:G:ASN:C	1:196:G:PRO:N	1:196:G:PRO:CA	1:196:G:PRO:C	7	2.15
(1,433)	1:186:G:THR:C	1:187:G:GLU:N	1:187:G:GLU:CA	1:187:G:GLU:C	5	2.15
(1,672)	1:209:L:ALA:N	1:209:L:ALA:CA	1:209:L:ALA:C	1:210:L:THR:N	9	2.14
(1,532)	1:195:J:ASN:C	1:196:J:PRO:N	1:196:J:PRO:CA	1:196:J:PRO:C	4	2.14
(1,37)	1:148:G:THR:C	1:149:G:SER:N	1:149:G:SER:CA	1:149:G:SER:C	6	2.14
(1,27)	1:147:I:PRO:N	1:147:I:PRO:CA	1:147:I:PRO:C	1:148:I:THR:N	8	2.14
(1,426)	1:185:L:MET:C	1:186:L:THR:N	1:186:L:THR:CA	1:186:L:THR:C	3	2.13
(1,381)	1:182:I:LYS:N	1:182:I:LYS:CA	1:182:I:LYS:C	1:183:I:ASN:N	1	2.13
(1,3)	1:144:I:GLY:C	1:145:I:GLY:N	1:145:I:GLY:CA	1:145:I:GLY:C	1	2.13
(1,1080)	1:175:L:GLU:N	1:175:L:GLU:CA	1:175:L:GLU:C	1:176:L:GLN:N	3	2.12
(1,753)	1:216:I:THR:N	1:216:I:THR:CA	1:216:I:THR:C	1:217:I:ALA:N	10	2.12
(1,155)	1:161:K:PHE:N	1:161:K:PHE:CA	1:161:K:PHE:C	1:162:K:ARG:N	8	2.12
(1,1016)	1:239:H:THR:N	1:239:H:THR:CA	1:239:H:THR:C	1:240:H:ASN:N	4	2.11
(1,609)	1:202:I:LEU:N	1:202:I:LEU:CA	1:202:I:LEU:C	1:203:I:LYS:N	10	2.11
(1,455)	1:188:K:THR:N	1:188:K:THR:CA	1:188:K:THR:C	1:189:K:LEU:N	8	2.11
(1,307)	1:174:G:ALA:N	1:174:G:ALA:CA	1:174:G:ALA:C	1:175:G:GLU:N	9	2.11
(1,250)	1:169:J:TYR:N	1:169:J:TYR:CA	1:169:J:TYR:C	1:170:J:LYS:N	4	2.11
(1,175)	1:163:G:ASP:N	1:163:G:ASP:CA	1:163:G:ASP:C	1:164:G:TYR:N	8	2.11
(1,66)	1:152:L:ASP:N	1:152:L:ASP:CA	1:152:L:ASP:C	1:153:L:ILE:N	5	2.11
(1,1011)	1:238:I:VAL:C	1:239:I:THR:N	1:239:I:THR:CA	1:239:I:THR:C	10	2.1
(1,645)	1:205:I:LEU:N	1:205:I:LEU:CA	1:205:I:LEU:C	1:206:I:GLY:N	5	2.1
(1,305)	1:173:K:ARG:C	1:174:K:ALA:N	1:174:K:ALA:CA	1:174:K:ALA:C	5	2.1
(1,1041)	1:241:I:THR:N	1:241:I:THR:CA	1:241:I:THR:C	1:242:I:ALA:N	9	2.08
(1,1016)	1:239:H:THR:N	1:239:H:THR:CA	1:239:H:THR:C	1:240:H:ASN:N	5	2.08

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,243)	1:168:I:PHE:C	1:169:I:TYR:N	1:169:I:TYR:CA	1:169:I:TYR:C	3	2.07
(1,34)	1:147:J:PRO:C	1:148:J:THR:N	1:148:J:THR:CA	1:148:J:THR:C	7	2.07
(1,1080)	1:175:L:GLU:N	1:175:L:GLU:CA	1:175:L:GLU:C	1:176:L:GLN:N	4	2.06
(1,509)	1:192:K:GLN:C	1:193:K:ASN:N	1:193:K:ASN:CA	1:193:K:ASN:C	2	2.06
(1,316)	1:176:J:GLN:C	1:177:J:ALA:N	1:177:J:ALA:CA	1:177:J:ALA:C	2	2.06
(1,1044)	1:241:L:THR:N	1:241:L:THR:CA	1:241:L:THR:C	1:242:L:ALA:N	4	2.05
(1,1035)	1:240:I:ASN:C	1:241:I:THR:N	1:241:I:THR:CA	1:241:I:THR:C	10	2.05
(1,1034)	1:240:H:ASN:C	1:241:H:THR:N	1:241:H:THR:CA	1:241:H:THR:C	9	2.05
(1,988)	1:236:J:SER:C	1:237:J:GLN:N	1:237:J:GLN:CA	1:237:J:GLN:C	6	2.05
(1,849)	1:225:I:GLY:N	1:225:I:GLY:CA	1:225:I:GLY:C	1:226:I:HIS:N	9	2.05
(1,85)	1:154:G:ARG:C	1:155:G:GLN:N	1:155:G:GLN:CA	1:155:G:GLN:C	2	2.05
(1,1012)	1:238:J:VAL:C	1:239:J:THR:N	1:239:J:THR:CA	1:239:J:THR:C	7	2.04
(1,63)	1:152:I:ASP:N	1:152:I:ASP:CA	1:152:I:ASP:C	1:153:I:ILE:N	9	2.04
(1,851)	1:225:K:GLY:N	1:225:K:GLY:CA	1:225:K:GLY:C	1:226:K:HIS:N	7	2.03
(1,107)	1:157:K:PRO:N	1:157:K:PRO:CA	1:157:K:PRO:C	1:158:K:LYS:N	9	2.03
(1,20)	1:146:H:SER:C	1:147:H:PRO:N	1:147:H:PRO:CA	1:147:H:PRO:C	3	2.03
(1,813)	1:221:I:VAL:N	1:221:I:VAL:CA	1:221:I:VAL:C	1:222:I:GLY:N	4	2.02
(1,692)	1:211:H:LEU:N	1:211:H:LEU:CA	1:211:H:LEU:C	1:212:H:GLU:N	5	2.02
(1,536)	1:196:H:PRO:N	1:196:H:PRO:CA	1:196:H:PRO:C	1:197:H:ASP:N	1	2.02
(1,172)	1:162:J:ARG:C	1:163:J:ASP:N	1:163:J:ASP:CA	1:163:J:ASP:C	8	2.02
(1,156)	1:161:L:PHE:N	1:161:L:PHE:CA	1:161:L:PHE:C	1:162:L:ARG:N	4	2.01
(1,1013)	1:238:K:VAL:C	1:239:K:THR:N	1:239:K:THR:CA	1:239:K:THR:C	6	2.0
(1,1011)	1:238:I:VAL:C	1:239:I:THR:N	1:239:I:THR:CA	1:239:I:THR:C	5	2.0
(1,175)	1:163:G:ASP:N	1:163:G:ASP:CA	1:163:G:ASP:C	1:164:G:TYR:N	6	2.0
(1,975)	1:235:I:MET:C	1:236:I:SER:N	1:236:I:SER:CA	1:236:I:SER:C	2	1.99
(1,764)	1:217:H:ALA:N	1:217:H:ALA:CA	1:217:H:ALA:C	1:218:H:CYS:N	7	1.99
(1,764)	1:217:H:ALA:N	1:217:H:ALA:CA	1:217:H:ALA:C	1:218:H:CYS:N	9	1.99
(1,441)	1:187:I:GLU:N	1:187:I:GLU:CA	1:187:I:GLU:C	1:188:I:THR:N	5	1.99
(1,1044)	1:241:L:THR:N	1:241:L:THR:CA	1:241:L:THR:C	1:242:L:ALA:N	9	1.98
(1,947)	1:233:K:GLU:N	1:233:K:GLU:CA	1:233:K:GLU:C	1:234:K:ALA:N	9	1.98
(1,20)	1:146:H:SER:C	1:147:H:PRO:N	1:147:H:PRO:CA	1:147:H:PRO:C	7	1.98
(1,1037)	1:240:K:ASN:C	1:241:K:THR:N	1:241:K:THR:CA	1:241:K:THR:C	3	1.97
(1,824)	1:223:H:GLY:N	1:223:H:GLY:CA	1:223:H:GLY:C	1:224:H:PRO:N	7	1.97
(1,1037)	1:240:K:ASN:C	1:241:K:THR:N	1:241:K:THR:CA	1:241:K:THR:C	10	1.96
(1,998)	1:237:H:GLN:C	1:238:H:VAL:N	1:238:H:VAL:CA	1:238:H:VAL:C	7	1.96
(1,803)	1:220:K:GLY:N	1:220:K:GLY:CA	1:220:K:GLY:C	1:221:K:VAL:N	3	1.96
(1,245)	1:168:K:PHE:C	1:169:K:TYR:N	1:169:K:TYR:CA	1:169:K:TYR:C	1	1.96
(1,191)	1:164:K:TYR:N	1:164:K:TYR:CA	1:164:K:TYR:C	1:165:K:VAL:N	8	1.96
(1,32)	1:147:H:PRO:C	1:148:H:THR:N	1:148:H:THR:CA	1:148:H:THR:C	10	1.96
(1,1015)	1:239:G:THR:N	1:239:G:THR:CA	1:239:G:THR:C	1:240:G:ASN:N	2	1.94
(1,534)	1:195:L:ASN:C	1:196:L:PRO:N	1:196:L:PRO:CA	1:196:L:PRO:C	6	1.94
(1,529)	1:195:G:ASN:C	1:196:G:PRO:N	1:196:G:PRO:CA	1:196:G:PRO:C	8	1.94
(1,380)	1:182:H:LYS:N	1:182:H:LYS:CA	1:182:H:LYS:C	1:183:H:ASN:N	8	1.94
(1,311)	1:174:K:ALA:N	1:174:K:ALA:CA	1:174:K:ALA:C	1:175:K:GLU:N	7	1.94
(1,1056)	1:243:L:THR:N	1:243:L:THR:CA	1:243:L:THR:C	1:244:L:ILE:N	1	1.93
(1,1017)	1:239:I:THR:N	1:239:I:THR:CA	1:239:I:THR:C	1:240:I:ASN:N	3	1.93
(1,521)	1:194:K:ALA:C	1:195:K:ASN:N	1:195:K:ASN:CA	1:195:K:ASN:C	7	1.93
(1,626)	1:203:H:LYS:C	1:204:H:ALA:N	1:204:H:ALA:CA	1:204:H:ALA:C	2	1.92
(1,442)	1:187:J:GLU:N	1:187:J:GLU:CA	1:187:J:GLU:C	1:188:J:THR:N	2	1.92
(1,182)	1:163:H:ASP:C	1:164:H:TYR:N	1:164:H:TYR:CA	1:164:H:TYR:C	1	1.92
(1,1053)	1:243:I:THR:N	1:243:I:THR:CA	1:243:I:THR:C	1:244:I:ILE:N	3	1.91

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,973)	1:235:G:MET:C	1:236:G:SER:N	1:236:G:SER:CA	1:236:G:SER:C	3	1.91
(1,728)	1:214:H:MET:N	1:214:H:MET:CA	1:214:H:MET:C	1:215:H:MET:N	10	1.91
(1,626)	1:203:H:LYS:C	1:204:H:ALA:N	1:204:H:ALA:CA	1:204:H:ALA:C	6	1.91
(1,522)	1:194:L:ALA:C	1:195:L:ASN:N	1:195:L:ASN:CA	1:195:L:ASN:C	10	1.91
(1,1040)	1:241:H:THR:N	1:241:H:THR:CA	1:241:H:THR:C	1:242:H:ALA:N	8	1.9
(1,315)	1:176:I:GLN:C	1:177:I:ALA:N	1:177:I:ALA:CA	1:177:I:ALA:C	3	1.9
(1,633)	1:204:I:ALA:N	1:204:I:ALA:CA	1:204:I:ALA:C	1:205:I:LEU:N	9	1.89
(1,626)	1:203:H:LYS:C	1:204:H:ALA:N	1:204:H:ALA:CA	1:204:H:ALA:C	4	1.89
(1,230)	1:167:H:ARG:C	1:168:H:PHE:N	1:168:H:PHE:CA	1:168:H:PHE:C	8	1.89
(1,1044)	1:241:L:THR:N	1:241:L:THR:CA	1:241:L:THR:C	1:242:L:ALA:N	8	1.88
(1,1016)	1:239:H:THR:N	1:239:H:THR:CA	1:239:H:THR:C	1:240:H:ASN:N	2	1.87
(1,730)	1:214:J:MET:N	1:214:J:MET:CA	1:214:J:MET:C	1:215:J:MET:N	4	1.87
(1,529)	1:195:G:ASN:C	1:196:G:PRO:N	1:196:G:PRO:CA	1:196:G:PRO:C	5	1.87
(1,118)	1:158:J:LYS:N	1:158:J:LYS:CA	1:158:J:LYS:C	1:159:J:GLU:N	4	1.87
(1,104)	1:157:H:PRO:N	1:157:H:PRO:CA	1:157:H:PRO:C	1:158:H:LYS:N	3	1.87
(1,1018)	1:239:J:THR:N	1:239:J:THR:CA	1:239:J:THR:C	1:240:J:ASN:N	2	1.86
(1,998)	1:237:H:GLN:C	1:238:H:VAL:N	1:238:H:VAL:CA	1:238:H:VAL:C	3	1.86
(1,673)	1:209:G:ALA:C	1:210:G:THR:N	1:210:G:THR:CA	1:210:G:THR:C	5	1.86
(1,304)	1:173:J:ARG:C	1:174:J:ALA:N	1:174:J:ALA:CA	1:174:J:ALA:C	1	1.86
(1,26)	1:147:H:PRO:N	1:147:H:PRO:CA	1:147:H:PRO:C	1:148:H:THR:N	1	1.86
(1,889)	1:228:G:ALA:C	1:229:G:ARG:N	1:229:G:ARG:CA	1:229:G:ARG:C	5	1.85
(1,825)	1:223:I:GLY:N	1:223:I:GLY:CA	1:223:I:GLY:C	1:224:I:PRO:N	1	1.85
(1,377)	1:181:K:VAL:C	1:182:K:LYS:N	1:182:K:LYS:CA	1:182:K:LYS:C	1	1.85
(1,174)	1:162:L:ARG:C	1:163:L:ASP:N	1:163:L:ASP:CA	1:163:L:ASP:C	5	1.85
(1,156)	1:161:L:PHE:N	1:161:L:PHE:CA	1:161:L:PHE:C	1:162:L:ARG:N	10	1.85
(1,1033)	1:240:G:ASN:C	1:241:G:THR:N	1:241:G:THR:CA	1:241:G:THR:C	4	1.84
(1,1009)	1:238:G:VAL:C	1:239:G:THR:N	1:239:G:THR:CA	1:239:G:THR:C	3	1.84
(1,975)	1:235:I:MET:C	1:236:I:SER:N	1:236:I:SER:CA	1:236:I:SER:C	3	1.84
(1,237)	1:168:I:PHE:N	1:168:I:PHE:CA	1:168:I:PHE:C	1:169:I:TYR:N	2	1.84
(1,1073)	1:174:K:ALA:C	1:175:K:GLU:N	1:175:K:GLU:CA	1:175:K:GLU:C	5	1.83
(1,921)	1:231:I:LEU:N	1:231:I:LEU:CA	1:231:I:LEU:C	1:232:I:ALA:N	3	1.82
(1,804)	1:220:L:GLY:N	1:220:L:GLY:CA	1:220:L:GLY:C	1:221:L:VAL:N	5	1.81
(1,803)	1:220:K:GLY:N	1:220:K:GLY:CA	1:220:K:GLY:C	1:221:K:VAL:N	5	1.81
(1,676)	1:209:J:ALA:C	1:210:J:THR:N	1:210:J:THR:CA	1:210:J:THR:C	5	1.81
(1,433)	1:186:G:THR:C	1:187:G:GLU:N	1:187:G:GLU:CA	1:187:G:GLU:C	3	1.81
(1,72)	1:153:L:ILE:N	1:153:L:ILE:CA	1:153:L:ILE:C	1:154:L:ARG:N	1	1.81
(1,670)	1:209:J:ALA:N	1:209:J:ALA:CA	1:209:J:ALA:C	1:210:J:THR:N	7	1.8
(1,529)	1:195:G:ASN:C	1:196:G:PRO:N	1:196:G:PRO:CA	1:196:G:PRO:C	4	1.8
(1,423)	1:185:I:MET:C	1:186:I:THR:N	1:186:I:THR:CA	1:186:I:THR:C	5	1.8
(1,326)	1:177:H:ALA:C	1:178:H:SER:N	1:178:H:SER:CA	1:178:H:SER:C	4	1.8
(1,68)	1:153:H:ILE:N	1:153:H:ILE:CA	1:153:H:ILE:C	1:154:H:ARG:N	3	1.8
(1,894)	1:228:L:ALA:C	1:229:L:ARG:N	1:229:L:ARG:CA	1:229:L:ARG:C	8	1.79
(1,515)	1:193:K:ASN:N	1:193:K:ASN:CA	1:193:K:ASN:C	1:194:K:ALA:N	8	1.79
(1,284)	1:172:H:LEU:N	1:172:H:LEU:CA	1:172:H:LEU:C	1:173:H:ARG:N	5	1.79
(1,64)	1:152:J:ASP:N	1:152:J:ASP:CA	1:152:J:ASP:C	1:153:J:ILE:N	5	1.79
(1,5)	1:144:K:GLY:C	1:145:K:GLY:N	1:145:K:GLY:CA	1:145:K:GLY:C	9	1.79
(1,1040)	1:241:H:THR:N	1:241:H:THR:CA	1:241:H:THR:C	1:242:H:ALA:N	10	1.78
(1,731)	1:214:K:MET:N	1:214:K:MET:CA	1:214:K:MET:C	1:215:K:MET:N	1	1.78
(1,442)	1:187:J:GLU:N	1:187:J:GLU:CA	1:187:J:GLU:C	1:188:J:THR:N	9	1.78
(1,231)	1:167:I:ARG:C	1:168:I:PHE:N	1:168:I:PHE:CA	1:168:I:PHE:C	4	1.78
(1,1068)	1:244:L:ILE:N	1:244:L:ILE:CA	1:244:L:ILE:C	1:245:L:MET:N	10	1.77

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,1015)	1:239:G:THR:N	1:239:G:THR:CA	1:239:G:THR:C	1:240:G:ASN:N	6	1.77
(1,872)	1:227:H:LYS:N	1:227:H:LYS:CA	1:227:H:LYS:C	1:228:H:ALA:N	5	1.77
(1,813)	1:221:I:VAL:N	1:221:I:VAL:CA	1:221:I:VAL:C	1:222:I:GLY:N	8	1.77
(1,472)	1:189:J:LEU:C	1:190:J:LEU:N	1:190:J:LEU:CA	1:190:J:LEU:C	7	1.77
(1,1035)	1:240:I:ASN:C	1:241:I:THR:N	1:241:I:THR:CA	1:241:I:THR:C	5	1.76
(1,1019)	1:239:K:THR:N	1:239:K:THR:CA	1:239:K:THR:C	1:240:K:ASN:N	7	1.76
(1,982)	1:236:J:SER:N	1:236:J:SER:CA	1:236:J:SER:C	1:237:J:GLN:N	4	1.76
(1,396)	1:183:L:ASN:N	1:183:L:ASN:CA	1:183:L:ASN:C	1:184:L:TRP:N	3	1.76
(1,330)	1:177:L:ALA:C	1:178:L:SER:N	1:178:L:SER:CA	1:178:L:SER:C	6	1.76
(1,230)	1:167:H:ARG:C	1:168:H:PHE:N	1:168:H:PHE:CA	1:168:H:PHE:C	4	1.76
(1,85)	1:154:G:ARG:C	1:155:G:GLN:N	1:155:G:GLN:CA	1:155:G:GLN:C	8	1.76
(1,1036)	1:240:J:ASN:C	1:241:J:THR:N	1:241:J:THR:CA	1:241:J:THR:C	6	1.75
(1,827)	1:223:K:GLY:N	1:223:K:GLY:CA	1:223:K:GLY:C	1:224:K:PRO:N	4	1.75
(1,826)	1:223:J:GLY:N	1:223:J:GLY:CA	1:223:J:GLY:C	1:224:J:PRO:N	1	1.75
(1,800)	1:220:H:GLY:N	1:220:H:GLY:CA	1:220:H:GLY:C	1:221:H:VAL:N	3	1.75
(1,125)	1:158:K:LYS:C	1:159:K:GLU:N	1:159:K:GLU:CA	1:159:K:GLU:C	1	1.75
(1,85)	1:154:G:ARG:C	1:155:G:GLN:N	1:155:G:GLN:CA	1:155:G:GLN:C	10	1.75
(1,57)	1:151:I:LEU:N	1:151:I:LEU:CA	1:151:I:LEU:C	1:152:I:ASP:N	5	1.75
(1,426)	1:185:L:MET:C	1:186:L:THR:N	1:186:L:THR:CA	1:186:L:THR:C	7	1.74
(1,988)	1:236:J:SER:C	1:237:J:GLN:N	1:237:J:GLN:CA	1:237:J:GLN:C	4	1.73
(1,652)	1:207:J:PRO:C	1:208:J:GLY:N	1:208:J:GLY:CA	1:208:J:GLY:C	8	1.73
(1,326)	1:177:H:ALA:C	1:178:H:SER:N	1:178:H:SER:CA	1:178:H:SER:C	6	1.73
(1,56)	1:151:H:LEU:N	1:151:H:LEU:CA	1:151:H:LEU:C	1:152:H:ASP:N	5	1.73
(1,831)	1:223:I:GLY:C	1:224:I:PRO:N	1:224:I:PRO:CA	1:224:I:PRO:C	8	1.72
(1,826)	1:223:J:GLY:N	1:223:J:GLY:CA	1:223:J:GLY:C	1:224:J:PRO:N	7	1.72
(1,693)	1:211:I:LEU:N	1:211:I:LEU:CA	1:211:I:LEU:C	1:212:I:GLU:N	1	1.72
(1,518)	1:194:H:ALA:C	1:195:H:ASN:N	1:195:H:ASN:CA	1:195:H:ASN:C	3	1.72
(1,71)	1:153:K:ILE:N	1:153:K:ILE:CA	1:153:K:ILE:C	1:154:K:ARG:N	6	1.72
(1,976)	1:235:J:MET:C	1:236:J:SER:N	1:236:J:SER:CA	1:236:J:SER:C	3	1.71
(1,410)	1:184:H:TRP:C	1:185:H:MET:N	1:185:H:MET:CA	1:185:H:MET:C	10	1.71
(1,117)	1:158:I:LYS:N	1:158:I:LYS:CA	1:158:I:LYS:C	1:159:I:GLU:N	6	1.71
(1,71)	1:153:K:ILE:N	1:153:K:ILE:CA	1:153:K:ILE:C	1:154:K:ARG:N	5	1.71
(1,20)	1:146:H:SER:C	1:147:H:PRO:N	1:147:H:PRO:CA	1:147:H:PRO:C	6	1.71
(1,1009)	1:238:G:VAL:C	1:239:G:THR:N	1:239:G:THR:CA	1:239:G:THR:C	6	1.7
(1,693)	1:211:I:LEU:N	1:211:I:LEU:CA	1:211:I:LEU:C	1:212:I:GLU:N	9	1.7
(1,454)	1:188:J:THR:N	1:188:J:THR:CA	1:188:J:THR:C	1:189:J:LEU:N	4	1.7
(1,982)	1:236:J:SER:N	1:236:J:SER:CA	1:236:J:SER:C	1:237:J:GLN:N	6	1.69
(1,813)	1:221:I:VAL:N	1:221:I:VAL:CA	1:221:I:VAL:C	1:222:I:GLY:N	2	1.69
(1,747)	1:215:I:MET:C	1:216:I:THR:N	1:216:I:THR:CA	1:216:I:THR:C	6	1.69
(1,1039)	1:241:G:THR:N	1:241:G:THR:CA	1:241:G:THR:C	1:242:G:ALA:N	4	1.68
(1,976)	1:235:J:MET:C	1:236:J:SER:N	1:236:J:SER:CA	1:236:J:SER:C	8	1.68
(1,677)	1:209:K:ALA:C	1:210:K:THR:N	1:210:K:THR:CA	1:210:K:THR:C	7	1.68
(1,478)	1:190:J:LEU:N	1:190:J:LEU:CA	1:190:J:LEU:C	1:191:J:VAL:N	6	1.68
(1,444)	1:187:L:GLU:N	1:187:L:GLU:CA	1:187:L:GLU:C	1:188:L:THR:N	2	1.68
(1,435)	1:186:I:THR:C	1:187:I:GLU:N	1:187:I:GLU:CA	1:187:I:GLU:C	1	1.68
(1,188)	1:164:H:TYR:N	1:164:H:TYR:CA	1:164:H:TYR:C	1:165:H:VAL:N	3	1.68
(1,143)	1:160:K:PRO:N	1:160:K:PRO:CA	1:160:K:PRO:C	1:161:K:PHE:N	10	1.68
(1,1040)	1:241:H:THR:N	1:241:H:THR:CA	1:241:H:THR:C	1:242:H:ALA:N	9	1.67
(1,1034)	1:240:H:ASN:C	1:241:H:THR:N	1:241:H:THR:CA	1:241:H:THR:C	1	1.67
(1,669)	1:209:I:ALA:N	1:209:I:ALA:CA	1:209:I:ALA:C	1:210:I:THR:N	10	1.67
(1,508)	1:192:J:GLN:C	1:193:J:ASN:N	1:193:J:ASN:CA	1:193:J:ASN:C	7	1.67

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,305)	1:173:K:ARG:C	1:174:K:ALA:N	1:174:K:ALA:CA	1:174:K:ALA:C	6	1.67
(1,1037)	1:240:K:ASN:C	1:241:K:THR:N	1:241:K:THR:CA	1:241:K:THR:C	2	1.66
(1,444)	1:187:L:GLU:N	1:187:L:GLU:CA	1:187:L:GLU:C	1:188:L:THR:N	6	1.66
(1,155)	1:161:K:PHE:N	1:161:K:PHE:CA	1:161:K:PHE:C	1:162:K:ARG:N	3	1.65
(1,42)	1:148:L:THR:C	1:149:L:SER:N	1:149:L:SER:CA	1:149:L:SER:C	2	1.65
(1,895)	1:229:G:ARG:N	1:229:G:ARG:CA	1:229:G:ARG:C	1:230:G:VAL:N	8	1.64
(1,323)	1:177:K:ALA:N	1:177:K:ALA:CA	1:177:K:ALA:C	1:178:K:SER:N	2	1.64
(1,143)	1:160:K:PRO:N	1:160:K:PRO:CA	1:160:K:PRO:C	1:161:K:PHE:N	2	1.64
(1,1056)	1:243:L:THR:N	1:243:L:THR:CA	1:243:L:THR:C	1:244:L:ILE:N	6	1.63
(1,1019)	1:239:K:THR:N	1:239:K:THR:CA	1:239:K:THR:C	1:240:K:ASN:N	5	1.63
(1,449)	1:187:K:GLU:C	1:188:K:THR:N	1:188:K:THR:CA	1:188:K:THR:C	2	1.63
(1,155)	1:161:K:PHE:N	1:161:K:PHE:CA	1:161:K:PHE:C	1:162:K:ARG:N	9	1.63
(1,1043)	1:241:K:THR:N	1:241:K:THR:CA	1:241:K:THR:C	1:242:K:ALA:N	5	1.62
(1,859)	1:226:G:HIS:N	1:226:G:HIS:CA	1:226:G:HIS:C	1:227:G:LYS:N	5	1.62
(1,596)	1:201:H:ILE:N	1:201:H:ILE:CA	1:201:H:ILE:C	1:202:H:LEU:N	9	1.62
(1,85)	1:154:G:ARG:C	1:155:G:GLN:N	1:155:G:GLN:CA	1:155:G:GLN:C	6	1.62
(1,37)	1:148:G:THR:C	1:149:G:SER:N	1:149:G:SER:CA	1:149:G:SER:C	8	1.62
(1,896)	1:229:H:ARG:N	1:229:H:ARG:CA	1:229:H:ARG:C	1:230:H:VAL:N	6	1.61
(1,894)	1:228:L:ALA:C	1:229:L:ARG:N	1:229:L:ARG:CA	1:229:L:ARG:C	10	1.61
(1,540)	1:196:L:PRO:N	1:196:L:PRO:CA	1:196:L:PRO:C	1:197:L:ASP:N	6	1.61
(1,41)	1:148:K:THR:C	1:149:K:SER:N	1:149:K:SER:CA	1:149:K:SER:C	1	1.61
(1,1035)	1:240:I:ASN:C	1:241:I:THR:N	1:241:I:THR:CA	1:241:I:THR:C	6	1.6
(1,980)	1:236:H:SER:N	1:236:H:SER:CA	1:236:H:SER:C	1:237:H:GLN:N	7	1.6
(1,496)	1:191:J:VAL:C	1:192:J:GLN:N	1:192:J:GLN:CA	1:192:J:GLN:C	5	1.6
(1,482)	1:190:H:LEU:C	1:191:H:VAL:N	1:191:H:VAL:CA	1:191:H:VAL:C	7	1.6
(1,455)	1:188:K:THR:N	1:188:K:THR:CA	1:188:K:THR:C	1:189:K:LEU:N	6	1.6
(1,230)	1:167:H:ARG:C	1:168:H:PHE:N	1:168:H:PHE:CA	1:168:H:PHE:C	2	1.6
(1,104)	1:157:H:PRO:N	1:157:H:PRO:CA	1:157:H:PRO:C	1:158:H:LYS:N	1	1.6
(1,26)	1:147:H:PRO:N	1:147:H:PRO:CA	1:147:H:PRO:C	1:148:H:THR:N	10	1.6
(1,1044)	1:241:L:THR:N	1:241:L:THR:CA	1:241:L:THR:C	1:242:L:ALA:N	5	1.59
(1,1035)	1:240:I:ASN:C	1:241:I:THR:N	1:241:I:THR:CA	1:241:I:THR:C	4	1.58
(1,1034)	1:240:H:ASN:C	1:241:H:THR:N	1:241:H:THR:CA	1:241:H:THR:C	10	1.58
(1,816)	1:221:L:VAL:N	1:221:L:VAL:CA	1:221:L:VAL:C	1:222:L:GLY:N	6	1.58
(1,813)	1:221:I:VAL:N	1:221:I:VAL:CA	1:221:I:VAL:C	1:222:I:GLY:N	10	1.58
(1,767)	1:217:K:ALA:N	1:217:K:ALA:CA	1:217:K:ALA:C	1:218:K:CYS:N	5	1.58
(1,652)	1:207:J:PRO:C	1:208:J:GLY:N	1:208:J:GLY:CA	1:208:J:GLY:C	9	1.58
(1,534)	1:195:L:ASN:C	1:196:L:PRO:N	1:196:L:PRO:CA	1:196:L:PRO:C	4	1.58
(1,533)	1:195:K:ASN:C	1:196:K:PRO:N	1:196:K:PRO:CA	1:196:K:PRO:C	1	1.58
(1,29)	1:147:K:PRO:N	1:147:K:PRO:CA	1:147:K:PRO:C	1:148:K:THR:N	9	1.58
(1,1037)	1:240:K:ASN:C	1:241:K:THR:N	1:241:K:THR:CA	1:241:K:THR:C	7	1.57
(1,1012)	1:238:J:VAL:C	1:239:J:THR:N	1:239:J:THR:CA	1:239:J:THR:C	4	1.57
(1,862)	1:226:J:HIS:N	1:226:J:HIS:CA	1:226:J:HIS:C	1:227:J:LYS:N	4	1.57
(1,308)	1:174:H:ALA:N	1:174:H:ALA:CA	1:174:H:ALA:C	1:175:H:GLU:N	3	1.57
(1,191)	1:164:K:TYR:N	1:164:K:TYR:CA	1:164:K:TYR:C	1:165:K:VAL:N	4	1.57
(1,988)	1:236:J:SER:C	1:237:J:GLN:N	1:237:J:GLN:CA	1:237:J:GLN:C	7	1.56
(1,973)	1:235:G:MET:C	1:236:G:SER:N	1:236:G:SER:CA	1:236:G:SER:C	8	1.56
(1,868)	1:226:J:HIS:C	1:227:J:LYS:N	1:227:J:LYS:CA	1:227:J:LYS:C	2	1.56
(1,1019)	1:239:K:THR:N	1:239:K:THR:CA	1:239:K:THR:C	1:240:K:ASN:N	6	1.55
(1,1016)	1:239:H:THR:N	1:239:H:THR:CA	1:239:H:THR:C	1:240:H:ASN:N	7	1.55
(1,658)	1:208:J:GLY:N	1:208:J:GLY:CA	1:208:J:GLY:C	1:209:J:ALA:N	2	1.55
(1,477)	1:190:I:LEU:N	1:190:I:LEU:CA	1:190:I:LEU:C	1:191:I:VAL:N	4	1.55

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,426)	1:185:L:MET:C	1:186:L:THR:N	1:186:L:THR:CA	1:186:L:THR:C	8	1.55
(1,302)	1:173:H:ARG:C	1:174:H:ALA:N	1:174:H:ALA:CA	1:174:H:ALA:C	7	1.55
(1,728)	1:214:H:MET:N	1:214:H:MET:CA	1:214:H:MET:C	1:215:H:MET:N	7	1.54
(1,608)	1:202:H:LEU:N	1:202:H:LEU:CA	1:202:H:LEU:C	1:203:H:LYS:N	6	1.54
(1,237)	1:168:I:PHE:N	1:168:I:PHE:CA	1:168:I:PHE:C	1:169:I:TYR:N	4	1.54
(1,973)	1:235:G:MET:C	1:236:G:SER:N	1:236:G:SER:CA	1:236:G:SER:C	9	1.53
(1,894)	1:228:L:ALA:C	1:229:L:ARG:N	1:229:L:ARG:CA	1:229:L:ARG:C	3	1.53
(1,849)	1:225:I:GLY:N	1:225:I:GLY:CA	1:225:I:GLY:C	1:226:I:HIS:N	3	1.53
(1,536)	1:196:H:PRO:N	1:196:H:PRO:CA	1:196:H:PRO:C	1:197:H:ASP:N	5	1.53
(1,239)	1:168:K:PHE:N	1:168:K:PHE:CA	1:168:K:PHE:C	1:169:K:TYR:N	7	1.53
(1,758)	1:216:H:THR:C	1:217:H:ALA:N	1:217:H:ALA:CA	1:217:H:ALA:C	1	1.52
(1,699)	1:211:I:LEU:C	1:212:I:GLU:N	1:212:I:GLU:CA	1:212:I:GLU:C	6	1.52
(1,634)	1:204:J:ALA:N	1:204:J:ALA:CA	1:204:J:ALA:C	1:205:J:LEU:N	4	1.52
(1,529)	1:195:G:ASN:C	1:196:G:PRO:N	1:196:G:PRO:CA	1:196:G:PRO:C	1	1.52
(1,318)	1:176:L:GLN:C	1:177:L:ALA:N	1:177:L:ALA:CA	1:177:L:ALA:C	4	1.52
(1,174)	1:162:L:ARG:C	1:163:L:ASP:N	1:163:L:ASP:CA	1:163:L:ASP:C	6	1.52
(1,796)	1:219:J:GLN:C	1:220:J:GLY:N	1:220:J:GLY:CA	1:220:J:GLY:C	2	1.51
(1,614)	1:202:H:LEU:C	1:203:H:LYS:N	1:203:H:LYS:CA	1:203:H:LYS:C	8	1.51
(1,476)	1:190:H:LEU:N	1:190:H:LEU:CA	1:190:H:LEU:C	1:191:H:VAL:N	3	1.51
(1,90)	1:154:L:ARG:C	1:155:L:GLN:N	1:155:L:GLN:CA	1:155:L:GLN:C	2	1.51
(1,447)	1:187:I:GLU:C	1:188:I:THR:N	1:188:I:THR:CA	1:188:I:THR:C	10	1.5
(1,37)	1:148:G:THR:C	1:149:G:SER:N	1:149:G:SER:CA	1:149:G:SER:C	10	1.5
(1,873)	1:227:I:LYS:N	1:227:I:LYS:CA	1:227:I:LYS:C	1:228:I:ALA:N	2	1.49
(1,802)	1:220:J:GLY:N	1:220:J:GLY:CA	1:220:J:GLY:C	1:221:J:VAL:N	5	1.49
(1,636)	1:204:L:ALA:N	1:204:L:ALA:CA	1:204:L:ALA:C	1:205:L:LEU:N	6	1.49
(1,563)	1:198:K:CYS:N	1:198:K:CYS:CA	1:198:K:CYS:C	1:199:K:LYS:N	1	1.49
(1,426)	1:185:L:MET:C	1:186:L:THR:N	1:186:L:THR:CA	1:186:L:THR:C	2	1.49
(1,107)	1:157:K:PRO:N	1:157:K:PRO:CA	1:157:K:PRO:C	1:158:K:LYS:N	2	1.49
(1,1033)	1:240:G:ASN:C	1:241:G:THR:N	1:241:G:THR:CA	1:241:G:THR:C	10	1.48
(1,651)	1:207:I:PRO:C	1:208:I:GLY:N	1:208:I:GLY:CA	1:208:I:GLY:C	4	1.48
(1,455)	1:188:K:THR:N	1:188:K:THR:CA	1:188:K:THR:C	1:189:K:LEU:N	10	1.48
(1,422)	1:185:H:MET:C	1:186:H:THR:N	1:186:H:THR:CA	1:186:H:THR:C	8	1.48
(1,85)	1:154:G:ARG:C	1:155:G:GLN:N	1:155:G:GLN:CA	1:155:G:GLN:C	9	1.48
(1,72)	1:153:L:ILE:N	1:153:L:ILE:CA	1:153:L:ILE:C	1:154:L:ARG:N	4	1.48
(1,1073)	1:174:K:ALA:C	1:175:K:GLU:N	1:175:K:GLU:CA	1:175:K:GLU:C	9	1.47
(1,978)	1:235:L:MET:C	1:236:L:SER:N	1:236:L:SER:CA	1:236:L:SER:C	1	1.47
(1,947)	1:233:K:GLU:N	1:233:K:GLU:CA	1:233:K:GLU:C	1:234:K:ALA:N	10	1.47
(1,435)	1:186:I:THR:C	1:187:I:GLU:N	1:187:I:GLU:CA	1:187:I:GLU:C	6	1.47
(1,416)	1:185:H:MET:N	1:185:H:MET:CA	1:185:H:MET:C	1:186:H:THR:N	2	1.47
(1,307)	1:174:G:ALA:N	1:174:G:ALA:CA	1:174:G:ALA:C	1:175:G:GLU:N	4	1.47
(1,242)	1:168:H:PHE:C	1:169:H:TYR:N	1:169:H:TYR:CA	1:169:H:TYR:C	8	1.47
(1,150)	1:160:L:PRO:C	1:161:L:PHE:N	1:161:L:PHE:CA	1:161:L:PHE:C	5	1.47
(1,658)	1:208:J:GLY:N	1:208:J:GLY:CA	1:208:J:GLY:C	1:209:J:ALA:N	10	1.46
(1,308)	1:174:H:ALA:N	1:174:H:ALA:CA	1:174:H:ALA:C	1:175:H:GLU:N	6	1.46
(1,156)	1:161:L:PHE:N	1:161:L:PHE:CA	1:161:L:PHE:C	1:162:L:ARG:N	9	1.46
(1,1080)	1:175:L:GLU:N	1:175:L:GLU:CA	1:175:L:GLU:C	1:176:L:GLN:N	1	1.45
(1,895)	1:229:G:ARG:N	1:229:G:ARG:CA	1:229:G:ARG:C	1:230:G:VAL:N	4	1.45
(1,318)	1:176:L:GLN:C	1:177:L:ALA:N	1:177:L:ALA:CA	1:177:L:ALA:C	3	1.45
(1,976)	1:235:J:MET:C	1:236:J:SER:N	1:236:J:SER:CA	1:236:J:SER:C	7	1.44
(1,671)	1:209:K:ALA:N	1:209:K:ALA:CA	1:209:K:ALA:C	1:210:K:THR:N	1	1.44
(1,273)	1:171:I:THR:N	1:171:I:THR:CA	1:171:I:THR:C	1:172:I:LEU:N	10	1.44

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,57)	1:151:I:LEU:N	1:151:I:LEU:CA	1:151:I:LEU:C	1:152:I:ASP:N	10	1.44
(1,894)	1:228:L:ALA:C	1:229:L:ARG:N	1:229:L:ARG:CA	1:229:L:ARG:C	1	1.43
(1,301)	1:173:G:ARG:C	1:174:G:ALA:N	1:174:G:ALA:CA	1:174:G:ALA:C	3	1.43
(1,35)	1:147:K:PRO:C	1:148:K:THR:N	1:148:K:THR:CA	1:148:K:THR:C	6	1.43
(1,1040)	1:241:H:THR:N	1:241:H:THR:CA	1:241:H:THR:C	1:242:H:ALA:N	5	1.42
(1,1015)	1:239:G:THR:N	1:239:G:THR:CA	1:239:G:THR:C	1:240:G:ASN:N	1	1.42
(1,894)	1:228:L:ALA:C	1:229:L:ARG:N	1:229:L:ARG:CA	1:229:L:ARG:C	5	1.42
(1,728)	1:214:H:MET:N	1:214:H:MET:CA	1:214:H:MET:C	1:215:H:MET:N	5	1.4
(1,58)	1:151:J:LEU:N	1:151:J:LEU:CA	1:151:J:LEU:C	1:152:J:ASP:N	5	1.4
(1,921)	1:231:I:LEU:N	1:231:I:LEU:CA	1:231:I:LEU:C	1:232:I:ALA:N	4	1.39
(1,598)	1:201:J:ILE:N	1:201:J:ILE:CA	1:201:J:ILE:C	1:202:J:LEU:N	2	1.39
(1,85)	1:154:G:ARG:C	1:155:G:GLN:N	1:155:G:GLN:CA	1:155:G:GLN:C	3	1.39
(1,25)	1:147:G:PRO:N	1:147:G:PRO:CA	1:147:G:PRO:C	1:148:G:THR:N	8	1.39
(1,990)	1:236:L:SER:C	1:237:L:GLN:N	1:237:L:GLN:CA	1:237:L:GLN:C	5	1.38
(1,910)	1:230:J:VAL:N	1:230:J:VAL:CA	1:230:J:VAL:C	1:231:J:LEU:N	6	1.38
(1,1054)	1:243:J:THR:N	1:243:J:THR:CA	1:243:J:THR:C	1:244:J:ILE:N	10	1.37
(1,1043)	1:241:K:THR:N	1:241:K:THR:CA	1:241:K:THR:C	1:242:K:ALA:N	9	1.37
(1,1034)	1:240:H:ASN:C	1:241:H:THR:N	1:241:H:THR:CA	1:241:H:THR:C	4	1.37
(1,1018)	1:239:J:THR:N	1:239:J:THR:CA	1:239:J:THR:C	1:240:J:ASN:N	6	1.37
(1,433)	1:186:G:THR:C	1:187:G:GLU:N	1:187:G:GLU:CA	1:187:G:GLU:C	2	1.37
(1,975)	1:235:I:MET:C	1:236:I:SER:N	1:236:I:SER:CA	1:236:I:SER:C	4	1.36
(1,307)	1:174:G:ALA:N	1:174:G:ALA:CA	1:174:G:ALA:C	1:175:G:GLU:N	2	1.36
(1,136)	1:159:J:GLU:C	1:160:J:PRO:N	1:160:J:PRO:CA	1:160:J:PRO:C	7	1.36
(1,68)	1:153:H:ILE:N	1:153:H:ILE:CA	1:153:H:ILE:C	1:154:H:ARG:N	4	1.36
(1,1040)	1:241:H:THR:N	1:241:H:THR:CA	1:241:H:THR:C	1:242:H:ALA:N	4	1.35
(1,1038)	1:240:L:ASN:C	1:241:L:THR:N	1:241:L:THR:CA	1:241:L:THR:C	2	1.35
(1,1034)	1:240:H:ASN:C	1:241:H:THR:N	1:241:H:THR:CA	1:241:H:THR:C	2	1.35
(1,1054)	1:243:J:THR:N	1:243:J:THR:CA	1:243:J:THR:C	1:244:J:ILE:N	5	1.34
(1,1038)	1:240:L:ASN:C	1:241:L:THR:N	1:241:L:THR:CA	1:241:L:THR:C	7	1.34
(1,492)	1:191:L:VAL:N	1:191:L:VAL:CA	1:191:L:VAL:C	1:192:L:GLN:N	6	1.34
(1,1043)	1:241:K:THR:N	1:241:K:THR:CA	1:241:K:THR:C	1:242:K:ALA:N	10	1.33
(1,519)	1:194:I:ALA:C	1:195:I:ASN:N	1:195:I:ASN:CA	1:195:I:ASN:C	9	1.33
(1,442)	1:187:J:GLU:N	1:187:J:GLU:CA	1:187:J:GLU:C	1:188:J:THR:N	7	1.33
(1,318)	1:176:L:GLN:C	1:177:L:ALA:N	1:177:L:ALA:CA	1:177:L:ALA:C	1	1.33
(1,868)	1:226:J:HIS:C	1:227:J:LYS:N	1:227:J:LYS:CA	1:227:J:LYS:C	6	1.32
(1,864)	1:226:L:HIS:N	1:226:L:HIS:CA	1:226:L:HIS:C	1:227:L:LYS:N	1	1.32
(1,671)	1:209:K:ALA:N	1:209:K:ALA:CA	1:209:K:ALA:C	1:210:K:THR:N	7	1.32
(1,404)	1:184:H:TRP:N	1:184:H:TRP:CA	1:184:H:TRP:C	1:185:H:MET:N	5	1.32
(1,326)	1:177:H:ALA:C	1:178:H:SER:N	1:178:H:SER:CA	1:178:H:SER:C	10	1.32
(1,305)	1:173:K:ARG:C	1:174:K:ALA:N	1:174:K:ALA:CA	1:174:K:ALA:C	4	1.32
(1,272)	1:171:H:THR:N	1:171:H:THR:CA	1:171:H:THR:C	1:172:H:LEU:N	2	1.32
(1,1042)	1:241:J:THR:N	1:241:J:THR:CA	1:241:J:THR:C	1:242:J:ALA:N	4	1.31
(1,274)	1:171:J:THR:N	1:171:J:THR:CA	1:171:J:THR:C	1:172:J:LEU:N	9	1.31
(1,1054)	1:243:J:THR:N	1:243:J:THR:CA	1:243:J:THR:C	1:244:J:ILE:N	8	1.3
(1,980)	1:236:H:SER:N	1:236:H:SER:CA	1:236:H:SER:C	1:237:H:GLN:N	8	1.3
(1,905)	1:229:K:ARG:C	1:230:K:VAL:N	1:230:K:VAL:CA	1:230:K:VAL:C	3	1.3
(1,692)	1:211:H:LEU:N	1:211:H:LEU:CA	1:211:H:LEU:C	1:212:H:GLU:N	10	1.3
(1,699)	1:211:I:LEU:C	1:212:I:GLU:N	1:212:I:GLU:CA	1:212:I:GLU:C	9	1.29
(1,982)	1:236:J:SER:N	1:236:J:SER:CA	1:236:J:SER:C	1:237:J:GLN:N	10	1.28
(1,758)	1:216:H:THR:C	1:217:H:ALA:N	1:217:H:ALA:CA	1:217:H:ALA:C	9	1.28
(1,638)	1:204:H:ALA:C	1:205:H:LEU:N	1:205:H:LEU:CA	1:205:H:LEU:C	10	1.28

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,507)	1:192:I:GLN:C	1:193:I:ASN:N	1:193:I:ASN:CA	1:193:I:ASN:C	2	1.28
(1,1054)	1:243:J:THR:N	1:243:J:THR:CA	1:243:J:THR:C	1:244:J:ILE:N	1	1.27
(1,476)	1:190:H:LEU:N	1:190:H:LEU:CA	1:190:H:LEU:C	1:191:H:VAL:N	10	1.27
(1,270)	1:170:L:LYS:C	1:171:L:THR:N	1:171:L:THR:CA	1:171:L:THR:C	4	1.27
(1,1102)	1:207:J:PRO:N	1:207:J:PRO:CA	1:207:J:PRO:C	1:208:J:GLY:N	2	1.26
(1,946)	1:233:J:GLU:N	1:233:J:GLU:CA	1:233:J:GLU:C	1:234:J:ALA:N	5	1.26
(1,431)	1:186:K:THR:N	1:186:K:THR:CA	1:186:K:THR:C	1:187:K:GLU:N	8	1.26
(1,88)	1:154:J:ARG:C	1:155:J:GLN:N	1:155:J:GLN:CA	1:155:J:GLN:C	8	1.26
(1,1043)	1:241:K:THR:N	1:241:K:THR:CA	1:241:K:THR:C	1:242:K:ALA:N	8	1.25
(1,1037)	1:240:K:ASN:C	1:241:K:THR:N	1:241:K:THR:CA	1:241:K:THR:C	4	1.25
(1,840)	1:224:L:PRO:N	1:224:L:PRO:CA	1:224:L:PRO:C	1:225:L:GLY:N	2	1.25
(1,663)	1:208:I:GLY:C	1:209:I:ALA:N	1:209:I:ALA:CA	1:209:I:ALA:C	1	1.24
(1,536)	1:196:H:PRO:N	1:196:H:PRO:CA	1:196:H:PRO:C	1:197:H:ASP:N	10	1.24
(1,301)	1:173:G:ARG:C	1:174:G:ALA:N	1:174:G:ALA:CA	1:174:G:ALA:C	7	1.24
(1,907)	1:230:G:VAL:N	1:230:G:VAL:CA	1:230:G:VAL:C	1:231:G:LEU:N	2	1.23
(1,828)	1:223:L:GLY:N	1:223:L:GLY:CA	1:223:L:GLY:C	1:224:L:PRO:N	1	1.23
(1,823)	1:223:G:GLY:N	1:223:G:GLY:CA	1:223:G:GLY:C	1:224:G:PRO:N	3	1.23
(1,32)	1:147:H:PRO:C	1:148:H:THR:N	1:148:H:THR:CA	1:148:H:THR:C	3	1.23
(1,1042)	1:241:J:THR:N	1:241:J:THR:CA	1:241:J:THR:C	1:242:J:ALA:N	5	1.22
(1,905)	1:229:K:ARG:C	1:230:K:VAL:N	1:230:K:VAL:CA	1:230:K:VAL:C	10	1.22
(1,444)	1:187:L:GLU:N	1:187:L:GLU:CA	1:187:L:GLU:C	1:188:L:THR:N	9	1.22
(1,307)	1:174:G:ALA:N	1:174:G:ALA:CA	1:174:G:ALA:C	1:175:G:GLU:N	8	1.22
(1,90)	1:154:L:ARG:C	1:155:L:GLN:N	1:155:L:GLN:CA	1:155:L:GLN:C	5	1.22
(1,994)	1:237:J:GLN:N	1:237:J:GLN:CA	1:237:J:GLN:C	1:238:J:VAL:N	8	1.21
(1,845)	1:224:K:PRO:C	1:225:K:GLY:N	1:225:K:GLY:CA	1:225:K:GLY:C	7	1.21
(1,512)	1:193:H:ASN:N	1:193:H:ASN:CA	1:193:H:ASN:C	1:194:H:ALA:N	6	1.21
(1,52)	1:150:J:ILE:C	1:151:J:LEU:N	1:151:J:LEU:CA	1:151:J:LEU:C	7	1.21
(1,988)	1:236:J:SER:C	1:237:J:GLN:N	1:237:J:GLN:CA	1:237:J:GLN:C	1	1.2
(1,839)	1:224:K:PRO:N	1:224:K:PRO:CA	1:224:K:PRO:C	1:225:K:GLY:N	4	1.2
(1,534)	1:195:L:ASN:C	1:196:L:PRO:N	1:196:L:PRO:CA	1:196:L:PRO:C	2	1.2
(1,384)	1:182:L:LYS:N	1:182:L:LYS:CA	1:182:L:LYS:C	1:183:L:ASN:N	10	1.2
(1,248)	1:169:H:TYR:N	1:169:H:TYR:CA	1:169:H:TYR:C	1:170:H:LYS:N	2	1.2
(1,1012)	1:238:J:VAL:C	1:239:J:THR:N	1:239:J:THR:CA	1:239:J:THR:C	1	1.19
(1,716)	1:213:H:GLU:N	1:213:H:GLU:CA	1:213:H:GLU:C	1:214:H:MET:N	3	1.19
(1,433)	1:186:G:THR:C	1:187:G:GLU:N	1:187:G:GLU:CA	1:187:G:GLU:C	9	1.19
(1,179)	1:163:K:ASP:N	1:163:K:ASP:CA	1:163:K:ASP:C	1:164:K:TYR:N	7	1.19
(1,1043)	1:241:K:THR:N	1:241:K:THR:CA	1:241:K:THR:C	1:242:K:ALA:N	4	1.18
(1,499)	1:192:G:GLN:N	1:192:G:GLN:CA	1:192:G:GLN:C	1:193:G:ASN:N	8	1.18
(1,828)	1:223:L:GLY:N	1:223:L:GLY:CA	1:223:L:GLY:C	1:224:L:PRO:N	4	1.17
(1,182)	1:163:H:ASP:C	1:164:H:TYR:N	1:164:H:TYR:CA	1:164:H:TYR:C	9	1.17
(1,1012)	1:238:J:VAL:C	1:239:J:THR:N	1:239:J:THR:CA	1:239:J:THR:C	2	1.16
(1,636)	1:204:L:ALA:N	1:204:L:ALA:CA	1:204:L:ALA:C	1:205:L:LEU:N	1	1.16
(1,60)	1:151:L:LEU:N	1:151:L:LEU:CA	1:151:L:LEU:C	1:152:L:ASP:N	10	1.16
(1,1034)	1:240:H:ASN:C	1:241:H:THR:N	1:241:H:THR:CA	1:241:H:THR:C	7	1.15
(1,1012)	1:238:J:VAL:C	1:239:J:THR:N	1:239:J:THR:CA	1:239:J:THR:C	6	1.15
(1,172)	1:162:J:ARG:C	1:163:J:ASP:N	1:163:J:ASP:CA	1:163:J:ASP:C	7	1.15
(1,1042)	1:241:J:THR:N	1:241:J:THR:CA	1:241:J:THR:C	1:242:J:ALA:N	10	1.14
(1,895)	1:229:G:ARG:N	1:229:G:ARG:CA	1:229:G:ARG:C	1:230:G:VAL:N	1	1.14
(1,104)	1:157:H:PRO:N	1:157:H:PRO:CA	1:157:H:PRO:C	1:158:H:LYS:N	6	1.14
(1,1016)	1:239:H:THR:N	1:239:H:THR:CA	1:239:H:THR:C	1:240:H:ASN:N	1	1.13
(1,902)	1:229:H:ARG:C	1:230:H:VAL:N	1:230:H:VAL:CA	1:230:H:VAL:C	5	1.13

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,692)	1:211:H:LEU:N	1:211:H:LEU:CA	1:211:H:LEU:C	1:212:H:GLU:N	4	1.13
(1,326)	1:177:H:ALA:C	1:178:H:SER:N	1:178:H:SER:CA	1:178:H:SER:C	7	1.13
(1,1054)	1:243:J:THR:N	1:243:J:THR:CA	1:243:J:THR:C	1:244:J:ILE:N	6	1.12
(1,758)	1:216:H:THR:C	1:217:H:ALA:N	1:217:H:ALA:CA	1:217:H:ALA:C	10	1.12
(1,716)	1:213:H:GLU:N	1:213:H:GLU:CA	1:213:H:GLU:C	1:214:H:MET:N	1	1.12
(1,66)	1:152:L:ASP:N	1:152:L:ASP:CA	1:152:L:ASP:C	1:153:L:ILE:N	4	1.12
(1,555)	1:197:I:ASP:C	1:198:I:CYS:N	1:198:I:CYS:CA	1:198:I:CYS:C	7	1.11
(1,237)	1:168:I:PHE:N	1:168:I:PHE:CA	1:168:I:PHE:C	1:169:I:TYR:N	3	1.11
(1,60)	1:151:L:LEU:N	1:151:L:LEU:CA	1:151:L:LEU:C	1:152:L:ASP:N	3	1.11
(1,6)	1:144:L:GLY:C	1:145:L:GLY:N	1:145:L:GLY:CA	1:145:L:GLY:C	2	1.11
(1,988)	1:236:J:SER:C	1:237:J:GLN:N	1:237:J:GLN:CA	1:237:J:GLN:C	2	1.1
(1,907)	1:230:G:VAL:N	1:230:G:VAL:CA	1:230:G:VAL:C	1:231:G:LEU:N	6	1.1
(1,694)	1:211:J:LEU:N	1:211:J:LEU:CA	1:211:J:LEU:C	1:212:J:GLU:N	9	1.1
(1,672)	1:209:L:ALA:N	1:209:L:ALA:CA	1:209:L:ALA:C	1:210:L:THR:N	5	1.1
(1,1094)	1:206:H:GLY:C	1:207:H:PRO:N	1:207:H:PRO:CA	1:207:H:PRO:C	1	1.09
(1,1075)	1:175:G:GLU:N	1:175:G:GLU:CA	1:175:G:GLU:C	1:176:G:GLN:N	5	1.09
(1,1015)	1:239:G:THR:N	1:239:G:THR:CA	1:239:G:THR:C	1:240:G:ASN:N	10	1.09
(1,449)	1:187:K:GLU:C	1:188:K:THR:N	1:188:K:THR:CA	1:188:K:THR:C	3	1.09
(1,60)	1:151:L:LEU:N	1:151:L:LEU:CA	1:151:L:LEU:C	1:152:L:ASP:N	6	1.09
(1,37)	1:148:G:THR:C	1:149:G:SER:N	1:149:G:SER:CA	1:149:G:SER:C	3	1.09
(1,892)	1:228:J:ALA:C	1:229:J:ARG:N	1:229:J:ARG:CA	1:229:J:ARG:C	4	1.08
(1,560)	1:198:H:CYS:N	1:198:H:CYS:CA	1:198:H:CYS:C	1:199:H:LYS:N	2	1.08
(1,519)	1:194:I:ALA:C	1:195:I:ASN:N	1:195:I:ASN:CA	1:195:I:ASN:C	10	1.08
(1,308)	1:174:H:ALA:N	1:174:H:ALA:CA	1:174:H:ALA:C	1:175:H:GLU:N	10	1.08
(1,237)	1:168:I:PHE:N	1:168:I:PHE:CA	1:168:I:PHE:C	1:169:I:TYR:N	8	1.08
(1,1042)	1:241:J:THR:N	1:241:J:THR:CA	1:241:J:THR:C	1:242:J:ALA:N	9	1.07
(1,799)	1:220:G:GLY:N	1:220:G:GLY:CA	1:220:G:GLY:C	1:221:G:VAL:N	3	1.07
(1,451)	1:188:G:THR:N	1:188:G:THR:CA	1:188:G:THR:C	1:189:G:LEU:N	2	1.07
(1,179)	1:163:K:ASP:N	1:163:K:ASP:CA	1:163:K:ASP:C	1:164:K:TYR:N	1	1.07
(1,1054)	1:243:J:THR:N	1:243:J:THR:CA	1:243:J:THR:C	1:244:J:ILE:N	9	1.06
(1,52)	1:150:J:ILE:C	1:151:J:LEU:N	1:151:J:LEU:CA	1:151:J:LEU:C	6	1.06
(1,1039)	1:241:G:THR:N	1:241:G:THR:CA	1:241:G:THR:C	1:242:G:ALA:N	10	1.05
(1,946)	1:233:J:GLU:N	1:233:J:GLU:CA	1:233:J:GLU:C	1:234:J:ALA:N	10	1.05
(1,410)	1:184:H:TRP:C	1:185:H:MET:N	1:185:H:MET:CA	1:185:H:MET:C	3	1.05
(1,396)	1:183:L:ASN:N	1:183:L:ASN:CA	1:183:L:ASN:C	1:184:L:TRP:N	9	1.05
(1,175)	1:163:G:ASP:N	1:163:G:ASP:CA	1:163:G:ASP:C	1:164:G:TYR:N	5	1.05
(1,156)	1:161:L:PHE:N	1:161:L:PHE:CA	1:161:L:PHE:C	1:162:L:ARG:N	8	1.05
(1,1084)	1:175:J:GLU:C	1:176:J:GLN:N	1:176:J:GLN:CA	1:176:J:GLN:C	7	1.04
(1,973)	1:235:G:MET:C	1:236:G:SER:N	1:236:G:SER:CA	1:236:G:SER:C	1	1.04
(1,911)	1:230:K:VAL:N	1:230:K:VAL:CA	1:230:K:VAL:C	1:231:K:LEU:N	3	1.04
(1,838)	1:224:J:PRO:N	1:224:J:PRO:CA	1:224:J:PRO:C	1:225:J:GLY:N	6	1.04
(1,652)	1:207:J:PRO:C	1:208:J:GLY:N	1:208:J:GLY:CA	1:208:J:GLY:C	1	1.04
(1,626)	1:203:H:LYS:C	1:204:H:ALA:N	1:204:H:ALA:CA	1:204:H:ALA:C	5	1.04
(1,562)	1:198:J:CYS:N	1:198:J:CYS:CA	1:198:J:CYS:C	1:199:J:LYS:N	3	1.04
(1,438)	1:186:L:THR:C	1:187:L:GLU:N	1:187:L:GLU:CA	1:187:L:GLU:C	5	1.04
(1,175)	1:163:G:ASP:N	1:163:G:ASP:CA	1:163:G:ASP:C	1:164:G:TYR:N	9	1.04
(1,275)	1:171:K:THR:N	1:171:K:THR:CA	1:171:K:THR:C	1:172:K:LEU:N	8	1.03
(1,38)	1:148:H:THR:C	1:149:H:SER:N	1:149:H:SER:CA	1:149:H:SER:C	6	1.03
(1,1094)	1:206:H:GLY:C	1:207:H:PRO:N	1:207:H:PRO:CA	1:207:H:PRO:C	3	1.02
(1,1053)	1:243:I:THR:N	1:243:I:THR:CA	1:243:I:THR:C	1:244:I:ILE:N	7	1.02
(1,1036)	1:240:J:ASN:C	1:241:J:THR:N	1:241:J:THR:CA	1:241:J:THR:C	2	1.02

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,939)	1:232:I:ALA:C	1:233:I:GLU:N	1:233:I:GLU:CA	1:233:I:GLU:C	5	1.02
(1,534)	1:195:L:ASN:C	1:196:L:PRO:N	1:196:L:PRO:CA	1:196:L:PRO:C	8	1.02
(1,1018)	1:239:J:THR:N	1:239:J:THR:CA	1:239:J:THR:C	1:240:J:ASN:N	4	1.01
(1,982)	1:236:J:SER:N	1:236:J:SER:CA	1:236:J:SER:C	1:237:J:GLN:N	2	1.01
(1,974)	1:235:H:MET:C	1:236:H:SER:N	1:236:H:SER:CA	1:236:H:SER:C	4	1.01
(1,518)	1:194:H:ALA:C	1:195:H:ASN:N	1:195:H:ASN:CA	1:195:H:ASN:C	7	1.01
(1,515)	1:193:K:ASN:N	1:193:K:ASN:CA	1:193:K:ASN:C	1:194:K:ALA:N	4	1.01
(1,52)	1:150:J:ILE:C	1:151:J:LEU:N	1:151:J:LEU:CA	1:151:J:LEU:C	2	1.01