



Full wwPDB NMR Structure Validation Report ⓘ

Sep 28, 2026 – 02:21 pm BST

PDB ID : 9T0O / pdb_00009t0o
BMRB ID : 53317
Title : Solution structure of Nanofitin C10 in complex with a 12unit aromatic oligoamide foldamer
Authors : Largy, E.; Morozov, V.; Huc, I.; Mackereth, C.D.
Deposited on : 2025-10-17

This is a Full wwPDB NMR Structure Validation Report for a publicly released PDB entry.

We welcome your comments at validation@mail.wwpdb.org

A user guide is available at

<https://www.wwpdb.org/validation/2017/NMRValidationReportHelp>

with specific help available everywhere you see the ⓘ symbol.

The types of validation reports are described at

<http://www.wwpdb.org/validation/2017/FAQs#types>.

The following versions of software and data (see [references ⓘ](#)) were used in the production of this report:

Cyrange	:	Kirchner and Güntert (2011)
NmrClust	:	Kelley et al. (1996)
MolProbity	:	4-5-2 with Phenix2.2
Mogul	:	1.8.4, CSD as541be (2020)
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	:	v1.3.2
Ideal geometry (proteins)	:	Engh & Huber (2001)
Ideal geometry (DNA, RNA)	:	Parkinson et al. (1996)
Validation Pipeline (wwPDB-VP)	:	2.51

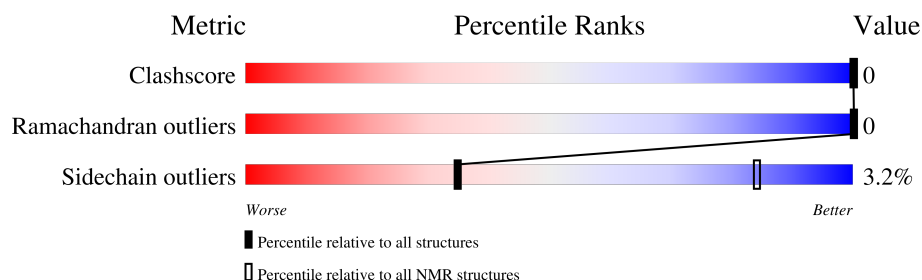
1 Overall quality at a glance

The following experimental techniques were used to determine the structure:

SOLUTION NMR

The overall completeness of chemical shifts assignment is 83%.

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



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

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

Mol	Chain	Length	Quality of chain
1	A	66	 95%

2 Ensemble composition and analysis

This entry contains 20 models. Model 1 is the overall representative, medoid model (most similar to other models).

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

Well-defined (core) protein residues			
Well-defined core	Residue range (total)	Backbone RMSD (Å)	Medoid model
1	A:2-A:66 (65)	0.89	1

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. No single-model clusters were found.

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

3 Entry composition [i](#)

There are 2 unique types of molecules in this entry. The entry contains 1432 atoms, of which 672 are hydrogens and 0 are deuteriums.

- Molecule 1 is a protein called Foldamer-binding Nanofitin C10.

Mol	Chain	Residues	Atoms						Trace
1	A	66	Total	C	H	N	O	S	0
			1080	342	545	93	99	1	

- Molecule 2 is a protein (with D amino acids) called Aromatic oligoamide foldamer.

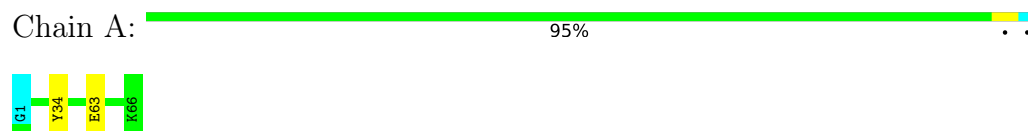
Mol	Chain	Residues	Atoms						Trace
2	C	13	Total	C	H	N	O	S	0
			352	158	127	27	37	3	

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: Foldamer-binding Nanofitin C10

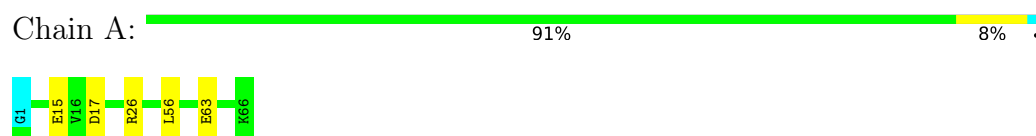


4.2 Scores per residue for each member of the ensemble

Colouring as in section [4.1](#) above.

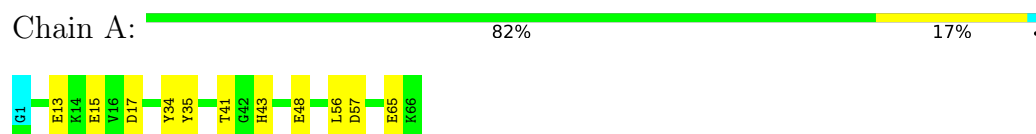
4.2.1 Score per residue for model 1 (medoid)

- Molecule 1: Foldamer-binding Nanofitin C10



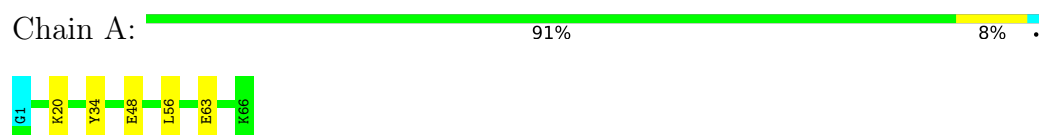
4.2.2 Score per residue for model 2

- Molecule 1: Foldamer-binding Nanofitin C10



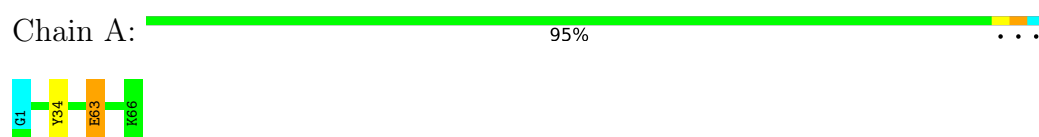
4.2.3 Score per residue for model 3

- Molecule 1: Foldamer-binding Nanofitin C10



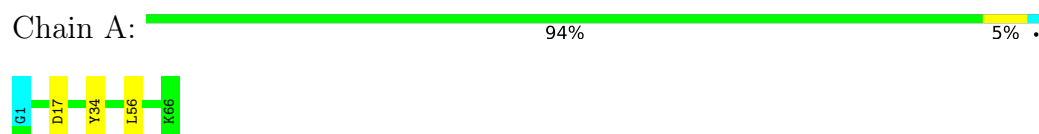
4.2.4 Score per residue for model 4

- Molecule 1: Foldamer-binding Nanofitin C10



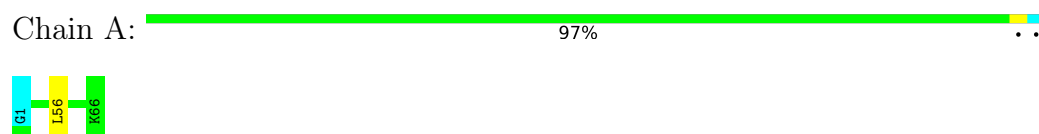
4.2.5 Score per residue for model 5

- Molecule 1: Foldamer-binding Nanofitin C10



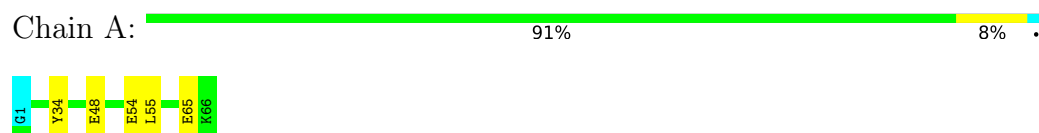
4.2.6 Score per residue for model 6

- Molecule 1: Foldamer-binding Nanofitin C10



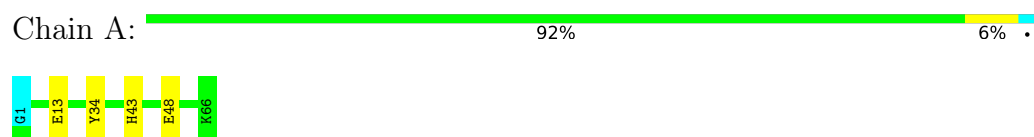
4.2.7 Score per residue for model 7

- Molecule 1: Foldamer-binding Nanofitin C10



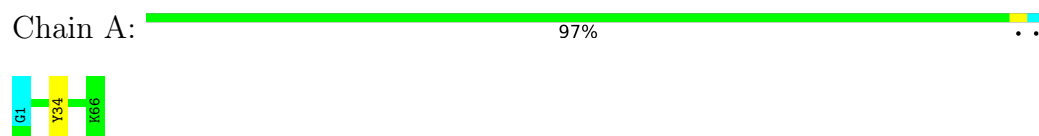
4.2.8 Score per residue for model 8

- Molecule 1: Foldamer-binding Nanofitin C10



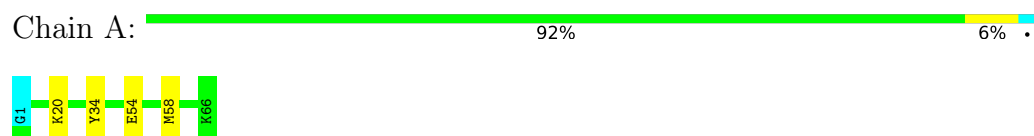
4.2.9 Score per residue for model 9

- Molecule 1: Foldamer-binding Nanofitin C10



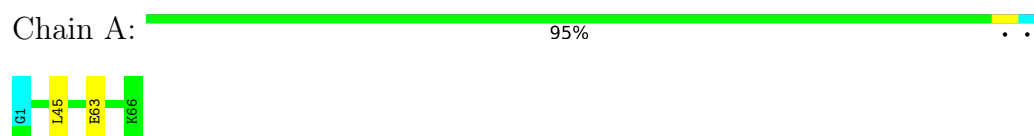
4.2.10 Score per residue for model 10

- Molecule 1: Foldamer-binding Nanofitin C10



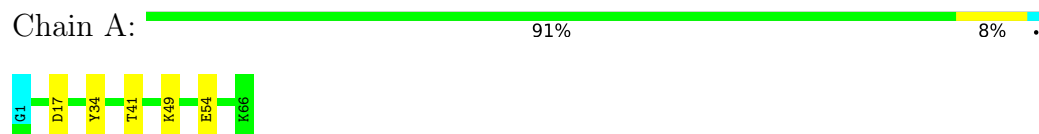
4.2.11 Score per residue for model 11

- Molecule 1: Foldamer-binding Nanofitin C10



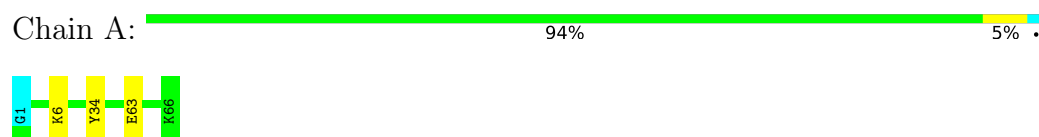
4.2.12 Score per residue for model 12

- Molecule 1: Foldamer-binding Nanofitin C10



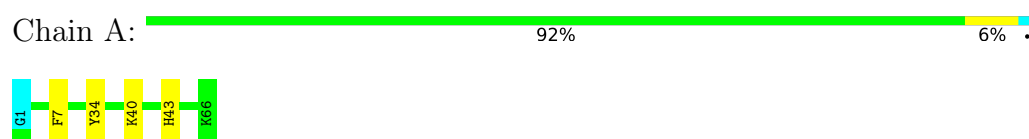
4.2.13 Score per residue for model 13

- Molecule 1: Foldamer-binding Nanofitin C10



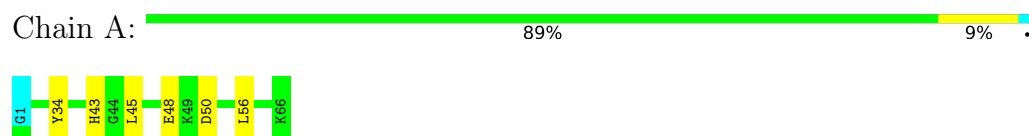
4.2.14 Score per residue for model 14

- Molecule 1: Foldamer-binding Nanofitin C10



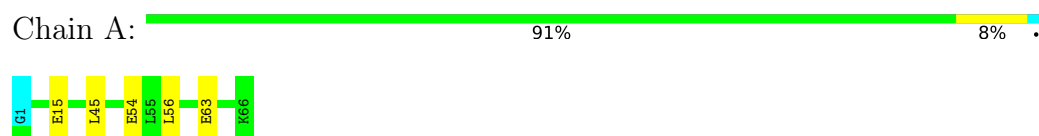
4.2.15 Score per residue for model 15

- Molecule 1: Foldamer-binding Nanofitin C10



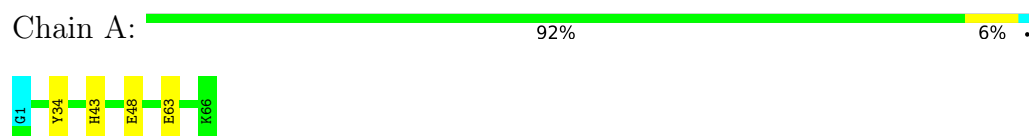
4.2.16 Score per residue for model 16

- Molecule 1: Foldamer-binding Nanofitin C10



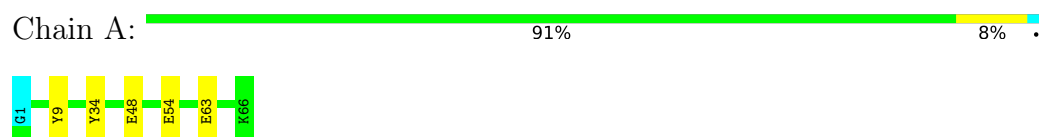
4.2.17 Score per residue for model 17

- Molecule 1: Foldamer-binding Nanofitin C10



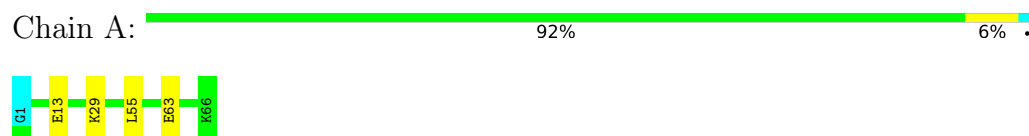
4.2.18 Score per residue for model 18

- Molecule 1: Foldamer-binding Nanofitin C10



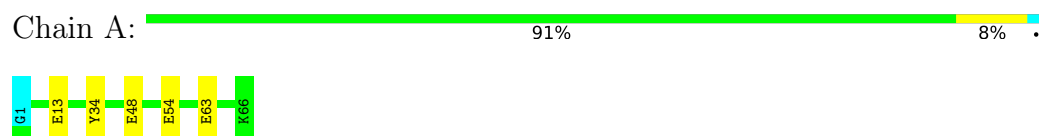
4.2.19 Score per residue for model 19

- Molecule 1: Foldamer-binding Nanofitin C10



4.2.20 Score per residue for model 20

- Molecule 1: Foldamer-binding Nanofitin C10



5 Refinement protocol and experimental data overview

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

Of the 20 calculated structures, 20 were deposited, based on the following criterion: *all calculated structures submitted*.

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

Software name	Classification	Version
Amber	structure calculation	
ARIA	refinement	2.3.2

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

Chemical shift file(s)	working_cs.cif
Number of chemical shift lists	1
Total number of shifts	764
Number of shifts mapped to atoms	764
Number of unparsed shifts	0
Number of shifts with mapping errors	0
Number of shifts with mapping warnings	0
Assignment completeness (well-defined parts)	83%

6 Model quality

6.1 Standard geometry

Bond lengths and bond angles in the following residue types are not validated in this section: 9JC, QOL, QUJ, QUK, A1KPW, QVE, A1JSS, A1KN1, QVS

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

Mol	Chain	Bond lengths		Bond angles	
		RMSZ	#Z>5	RMSZ	#Z>5
1	A	0.89±0.02	0±0/542 (0.0± 0.0%)	1.53±0.04	2±2/722 (0.3± 0.2%)
2	C	0.00±0.00	-	0.00±0.00	-
All	All	0.89	0/10840 (0.0%)	1.53	46/14440 (0.3%)

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

Mol	Chain	Chirality	Planarity
1	A	0.0±0.0	1.1±0.6
2	C	0.0±0.0	1.1±0.8
All	All	0	45

There are no bond-length outliers.

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

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)	Models	
								Worst	Total
1	A	13	GLU	CA-C-N	6.73	132.81	122.11	20	3
1	A	13	GLU	C-N-CA	6.73	132.81	122.11	20	3
1	A	20	LYS	CA-C-N	5.95	129.18	120.91	10	2
1	A	20	LYS	C-N-CA	5.95	129.18	120.91	10	2
1	A	63	GLU	CA-C-N	5.82	128.66	120.28	3	9
1	A	63	GLU	C-N-CA	5.82	128.66	120.28	3	9
1	A	50	ASP	CA-CB-CG	5.79	118.39	112.60	15	1
1	A	65	GLU	N-CA-C	5.59	117.91	110.53	2	2
1	A	17	ASP	CA-CB-CG	5.54	118.14	112.60	12	1
1	A	57	ASP	CA-C-N	5.49	127.64	120.28	2	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)	Models	
								Worst	Total
1	A	57	ASP	C-N-CA	5.49	127.64	120.28	2	1
1	A	58	MET	CA-C-N	5.49	127.58	120.44	10	1
1	A	58	MET	C-N-CA	5.49	127.58	120.44	10	1
1	A	56	LEU	CA-C-N	5.15	127.14	120.44	16	2
1	A	56	LEU	C-N-CA	5.15	127.14	120.44	16	2
1	A	41	THR	CA-C-N	5.12	126.91	121.48	12	1
1	A	41	THR	C-N-CA	5.12	126.91	121.48	12	1
1	A	55	LEU	CA-C-N	5.05	127.99	120.31	7	2
1	A	55	LEU	C-N-CA	5.05	127.99	120.31	7	2

There are no chirality outliers.

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

Mol	Chain	Res	Type	Group	Models (Total)
1	A	34	TYR	Sidechain	15
2	C	8	9JC	Peptide	8
2	C	10	QUK	Peptide	8
2	C	12	QOL	Peptide	5
1	A	26	ARG	Sidechain	1
1	A	35	TYR	Sidechain	1
2	C	7	9JC	Peptide	1
2	C	6	QUJ	Peptide	1
1	A	49	LYS	Peptide	1
1	A	6	LYS	Peptide	1
1	A	40	LYS	Peptide	1
1	A	9	TYR	Sidechain	1
1	A	29	LYS	Peptide	1

6.2 Too-close contacts

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

Mol	Chain	Non-H	H(model)	H(added)	Clashes
1	A	531	540	540	0±0
2	C	225	127	0	0±0
All	All	15120	13340	10800	1

The all-atom clashscore is defined as the number of clashes found per 1000 atoms (including hydrogen atoms). The all-atom clashscore for this structure is 0.

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

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:43:HIS:CD2	2:C:12:QOL:C7	0.41	3.04	15	1

6.3 Torsion angles [i](#)

6.3.1 Protein backbone [i](#)

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

Mol	Chain	Analysed	Favoured	Allowed	Outliers	Percentiles	
1	A	64/66 (97%)	59±2 (93±2%)	5±2 (7±2%)	0±0 (0±0%)	100	100
2	C	0	-	-	-	-	-
All	All	1280/1580 (81%)	1186 (93%)	94 (7%)	0 (0%)	100	100

There are no Ramachandran outliers.

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	A	57/57 (100%)	55±1 (97±2%)	2±1 (3±2%)	35	84
2	C	0	-	-	-	-
All	All	1140/1140 (100%)	1103 (97%)	37 (3%)	35	84

All 11 unique residues with a non-rotameric sidechain are listed below. They are sorted by the frequency of occurrence in the ensemble.

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	48	GLU	8

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	54	GLU	6
1	A	56	LEU	5
1	A	43	HIS	4
1	A	15	GLU	3
1	A	17	ASP	3
1	A	45	LEU	3
1	A	63	GLU	2
1	A	41	THR	1
1	A	7	PHE	1
1	A	13	GLU	1

6.3.3 RNA ⓘ

There are no RNA molecules in this entry.

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

13 non-standard protein/DNA/RNA residues 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
2	9JC	C	8	2	16,16,17	1.61±0.03	2±0 (13±2%)
2	9JC	C	7	2	16,16,17	1.70±0.02	3±0 (18±1%)
2	QVE	C	13	2	20,20,20	1.31±0.03	1±0 (5±0%)
2	A1JSS	C	2	2	17,18,19	1.53±0.02	2±0 (12±2%)
2	A1KN1	C	5	2	23,23,24	1.46±0.02	2±0 (8±0%)
2	A1KPW	C	1	2	13,14,15	1.21±0.02	0±0 (0±0%)
2	QUK	C	10	2	19,19,20	1.54±0.03	2±0 (10±0%)
2	QUJ	C	6	2	19,19,20	1.51±0.02	2±0 (10±0%)
2	QOL	C	12	2	21,21,22	1.38±0.01	2±0 (9±1%)
2	QOL	C	4	2	21,21,22	1.49±0.02	2±0 (9±0%)
2	QVE	C	9	2	19,19,20	1.63±0.03	2±0 (10±0%)

Mol	Type	Chain	Res	Link	Counts	Bond lengths	
						RMSZ	#Z>2
2	A1JSS	C	3	2	17,18,19	1.56±0.02	2±0 (12±2%)
2	QVS	C	11	2	15,15,16	1.58±0.03	2±0 (13±0%)

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	Counts	Bond angles	
						RMSZ	#Z>2
2	9JC	C	8	2	19,22,24	3.67±0.12	4±1 (21±2%)
2	9JC	C	7	2	19,22,24	3.35±0.11	3±0 (16±1%)
2	QVE	C	13	2	27,28,28	2.29±0.07	6±0 (23±1%)
2	A1JSS	C	2	2	21,27,29	3.18±0.11	3±0 (14±0%)
2	A1KN1	C	5	2	27,31,33	2.96±0.13	5±0 (19±1%)
2	A1KPW	C	1	2	18,25,27	2.02±0.08	5±0 (27±2%)
2	QUK	C	10	2	22,25,27	3.54±0.20	4±1 (18±2%)
2	QUJ	C	6	2	23,26,28	3.30±0.15	4±0 (15±2%)
2	QOL	C	12	2	23,28,30	3.00±0.10	3±0 (13±1%)
2	QOL	C	4	2	23,28,30	3.31±0.13	3±1 (15±2%)
2	QVE	C	9	2	23,26,28	3.57±0.13	5±1 (21±3%)
2	A1JSS	C	3	2	21,27,29	3.13±0.14	3±0 (14±0%)
2	QVS	C	11	2	19,21,23	3.84±0.18	5±1 (28±3%)

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	A1JSS	C	2	2	-	0±0,8,8,10	0±0,2,2,2
2	QUJ	C	6	2	-	0±0,7,7,9	0±0,2,2,2
2	QUK	C	10	2	-	0±0,7,7,9	0±0,2,2,2
2	QOL	C	12	2	-	0±0,11,11,13	0±0,2,2,2
2	A1KN1	C	5	2	-	0±0,7,7,9	0±0,3,3,3
2	A1KPW	C	1	2	-	0±0,1,39,42	0±0,3,2,2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Type	Chain	Res	Link	Chirals	Torsions	Rings
2	A1JSS	C	3	2	-	0±0,8,8,10	0±0,2,2,2
2	QOL	C	4	2	-	0±0,11,11,13	0±0,2,2,2
2	9JC	C	7	2	-	0±0,4,4,6	0±0,2,2,2
2	QVE	C	9	2	-	0±0,7,7,9	0±0,2,2,2
2	9JC	C	8	2	-	0±0,4,4,6	0±0,2,2,2
2	QVS	C	11	2	-	0±0,2,2,4	0±0,2,2,2
2	QVE	C	13	2	-	0±0,9,9,9	0±0,2,2,2

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	C	4	QOL	C10-C	5.48	1.42	1.48	13	20
2	C	10	QOL	C10-C	5.45	1.42	1.48	13	20
2	C	7	9JC	CA-C	5.45	1.42	1.48	18	20
2	C	9	QVE	CA-C	5.39	1.43	1.48	1	20
2	C	6	QUJ	CA-C	5.39	1.43	1.48	5	20
2	C	3	A1JSS	CA-C	4.97	1.43	1.48	2	20
2	C	8	9JC	CA-C	4.89	1.43	1.48	2	20
2	C	2	A1JSS	CA-C	4.85	1.43	1.48	15	20
2	C	5	A1KN1	CA-C	4.73	1.43	1.48	16	20
2	C	12	QOL	C10-C	4.69	1.43	1.48	18	20
2	C	13	QVE	CA-C	4.62	1.44	1.50	3	20
2	C	11	QVS	CA-N11	4.27	1.37	1.33	1	20
2	C	11	QVS	CA-C	3.91	1.44	1.48	20	20
2	C	5	A1KN1	CA-N	3.79	1.37	1.33	1	20
2	C	10	QOL	C10-N11	3.64	1.37	1.33	20	20
2	C	8	9JC	CA-N4	3.36	1.36	1.33	3	20
2	C	6	QUJ	CA-N11	3.34	1.36	1.33	13	20
2	C	9	QVE	CA-N11	3.25	1.36	1.33	11	20
2	C	4	QOL	C10-N11	2.90	1.36	1.33	17	20
2	C	12	QOL	C10-N11	2.87	1.36	1.33	9	19
2	C	2	A1JSS	CA-N	2.85	1.36	1.33	8	19
2	C	7	9JC	CA-N4	2.83	1.36	1.33	13	19
2	C	3	A1JSS	CA-N	2.75	1.36	1.33	17	18
2	C	8	9JC	C95-C94	2.43	1.41	1.37	4	4
2	C	7	9JC	C95-C94	2.37	1.41	1.37	19	19
2	C	3	A1JSS	CB-CXV	2.18	1.42	1.38	19	4
2	C	2	A1JSS	CB-CXV	2.09	1.42	1.38	4	2

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
2	C	10	QUK	C-C10-N11	14.30	128.67	114.66	20	20
2	C	9	QVE	C-CA-N11	13.46	127.85	114.66	19	20
2	C	11	QVS	C-CA-N11	13.41	127.80	114.66	17	20
2	C	4	QOL	C-C10-N11	13.33	127.72	114.66	8	20
2	C	8	9JC	C-CA-N4	13.17	127.56	114.66	17	20
2	C	6	QUJ	C-CA-N11	13.05	127.45	114.66	8	20
2	C	5	A1KN1	C-CA-N	12.78	127.18	114.66	1	20
2	C	3	A1JSS	C-CA-N	12.06	126.48	114.66	17	20
2	C	7	9JC	C-CA-N4	11.84	126.26	114.66	1	20
2	C	2	A1JSS	C-CA-N	11.69	126.12	114.66	11	20
2	C	12	QOL	C-C10-N11	11.61	126.04	114.66	7	20
2	C	10	QUK	C9-C10-C	9.06	113.40	121.23	20	20
2	C	12	QOL	C10-N11-C7	8.91	124.87	118.11	18	20
2	C	3	A1JSS	CA-N-CXP	8.69	124.70	118.11	13	20
2	C	2	A1JSS	CA-N-CXP	8.55	124.59	118.11	4	20
2	C	11	QVS	CA-N11-C7	8.46	124.53	118.11	11	20
2	C	8	9JC	CA-N4-C99	8.45	124.52	118.11	12	20
2	C	9	QVE	CG-OB-C8	8.30	126.40	116.95	9	18
2	C	9	QVE	C9-CA-C	8.00	114.31	121.23	19	20
2	C	4	QOL	C9-C10-C	7.99	114.31	121.23	8	20
2	C	7	9JC	CA-N4-C99	7.96	124.14	118.11	10	20
2	C	4	QOL	C10-N11-C7	7.51	123.81	118.11	5	20
2	C	11	QVS	OB-C8-C6	7.49	125.67	116.31	15	20
2	C	9	QVE	CA-N11-C7	7.48	123.78	118.11	12	20
2	C	13	QVE	CG-OB-C8	7.48	125.47	116.95	7	20
2	C	6	QUJ	CA-N11-C7	7.34	123.67	118.11	3	20
2	C	5	A1KN1	CA-N-CAG	7.32	123.66	118.11	4	20
2	C	6	QUJ	C9-CA-C	7.29	114.92	121.23	8	20
2	C	10	QUK	C10-N11-C7	7.25	123.61	118.11	16	20
2	C	13	QVE	C-CA-N11	6.91	127.30	116.28	6	20
2	C	8	9JC	C95-CA-C	6.76	115.38	121.23	17	20
2	C	5	A1KN1	CB-CA-C	6.67	115.46	121.23	1	20
2	C	11	QVS	C9-CA-C	6.59	115.53	121.23	17	20
2	C	3	A1JSS	CB-CA-C	6.34	115.74	121.23	17	20
2	C	7	9JC	C95-CA-C	6.09	115.97	121.23	16	20
2	C	1	A1KPW	O12-C13-O14	5.44	128.62	121.55	13	20
2	C	2	A1JSS	CB-CA-C	5.37	116.58	121.23	19	20
2	C	12	QOL	C9-C10-C	4.87	117.02	121.23	7	20
2	C	1	A1KPW	O14-C13-C04	4.31	124.56	130.85	13	20
2	C	1	A1KPW	C03-C02-C04	4.30	118.51	113.82	12	20
2	C	13	QVE	OXT-C-O	4.10	114.25	123.35	4	20
2	C	13	QVE	OXT-C-CA	3.95	123.68	114.69	7	20

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)	Models	
								Worst	Total
2	C	10	QUK	CA-C7-N11	3.64	122.24	118.64	20	17
2	C	5	A1KN1	CAF-CAG-N	3.57	122.17	118.64	1	20
2	C	13	QVE	CA-N11-C7	3.48	124.59	117.24	18	20
2	C	5	A1KN1	CAL-CAM-SAN	3.46	123.59	116.50	1	20
2	C	13	QVE	C9-CA-N11	3.46	116.08	124.50	6	20
2	C	5	A1KN1	C12-SAN-CAM	3.20	108.43	102.72	17	4
2	C	8	9JC	C100-C99-N4	3.08	121.68	118.64	3	14
2	C	6	QUJ	C2-C7-N11	2.97	121.57	118.64	4	13
2	C	11	QVS	C2-C7-N11	2.93	121.54	118.64	18	12
2	C	9	QVE	C2-C7-N11	2.85	121.46	118.64	19	16
2	C	1	A1KPW	C06-C04-C13	2.83	106.09	102.98	17	15
2	C	11	QVS	O-C-CA	2.62	126.71	124.22	4	1
2	C	9	QVE	OB-C8-C6	2.62	122.33	115.01	13	4
2	C	1	A1KPW	C03-C02-C01	2.61	103.66	108.88	20	20
2	C	8	9JC	C94-C98-C99	2.47	117.73	119.75	2	4
2	C	11	QVS	C8-C9-CA	2.45	121.44	119.05	17	13
2	C	11	QVS	OB-C8-C9	2.40	114.13	121.17	15	1
2	C	4	QOL	CG-OB-C8	2.35	125.93	118.25	19	3
2	C	10	QUK	CG-OB-C8	2.34	124.74	117.74	14	3
2	C	13	QVE	C2-C7-N11	2.31	120.93	118.64	5	3
2	C	4	QOL	CA-C7-N11	2.22	120.84	118.64	8	4
2	C	9	QVE	O-C-CA	2.21	122.13	124.22	20	2
2	C	11	QVS	C3-C2-N	2.21	124.78	120.36	20	2
2	C	13	QVE	OB-C8-C6	2.20	121.15	115.01	6	3
2	C	4	QOL	OB-CG-CD	2.18	113.90	108.21	14	1
2	C	1	A1KPW	C07-C06-C04	2.18	101.12	103.87	4	3
2	C	12	QOL	CG-OB-C8	2.11	125.16	118.25	4	2
2	C	12	QOL	C3-CA-N	2.09	124.54	120.36	18	1
2	C	8	9JC	C93-C94-C98	2.07	123.55	119.93	2	2
2	C	7	9JC	C100-C99-N4	2.05	120.67	118.64	20	2
2	C	9	QVE	OB-C8-C9	2.02	118.09	124.69	13	1
2	C	4	QOL	OB-C8-C6	2.01	120.64	115.01	8	1
2	C	10	QUK	C3-CA-N	2.01	124.38	120.36	19	1
2	C	7	9JC	C94-C98-C99	2.01	118.11	119.75	10	1
2	C	10	QUK	OB-C8-C6	2.00	120.60	115.01	20	1

There are no chirality outliers.

There are no torsion outliers.

There are no ring outliers.

6.5 Carbohydrates [i](#)

There are no oligosaccharides in this entry.

6.6 Ligand geometry [i](#)

There are no ligands in this entry.

6.7 Other polymers [i](#)

There are no such molecules in this entry.

6.8 Polymer linkage issues [i](#)

There are no chain breaks in this entry.

7 Chemical shift validation [i](#)

The completeness of assignment taking into account all chemical shift lists is 83% for the well-defined parts and 83% for the entire structure.

7.1 Chemical shift list 1

File name: working_cs.cif

Chemical shift list name: 53317

7.1.1 Bookkeeping [i](#)

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

Total number of shifts	764
Number of shifts mapped to atoms	764
Number of unparsed shifts	0
Number of shifts with mapping errors	0
Number of shifts with mapping warnings	0
Number of shift outliers (ShiftChecker)	6

7.1.2 Chemical shift referencing [i](#)

The following table shows the suggested chemical shift referencing corrections.

Nucleus	# values	Correction $\pm$ precision, ppm	Suggested action
$^{13}\text{C}_\alpha$	64	0.29 ± 0.24	None needed (< 0.5 ppm)
$^{13}\text{C}_\beta$	59	0.22 ± 0.28	None needed (< 0.5 ppm)
$^{13}\text{C}'$	57	0.35 ± 0.24	None needed (< 0.5 ppm)
^{15}N	60	0.47 ± 0.40	None needed (< 0.5 ppm)

7.1.3 Completeness of resonance assignments [i](#)

The following table shows the completeness of the chemical shift assignments for the well-defined regions of the structure. The overall completeness is 83%, i.e. 761 atoms were assigned a chemical shift out of a possible 920. 0 out of 12 assigned methyl groups (LEU and VAL) were assigned stereospecifically.

	Total	^1H	^{13}C	^{15}N
Backbone	304/324 (94%)	124/132 (94%)	120/130 (92%)	60/62 (97%)
Sidechain	400/518 (77%)	260/332 (78%)	139/165 (84%)	1/21 (5%)

Continued on next page...

Continued from previous page...

	Total	¹ H	¹³ C	¹⁵ N
Aromatic	57/78 (73%)	30/39 (77%)	27/36 (75%)	0/3 (0%)
Overall	761/920 (83%)	414/503 (82%)	286/331 (86%)	61/86 (71%)

The following table shows the completeness of the chemical shift assignments for the full structure. The overall completeness is 83%, i.e. 764 atoms were assigned a chemical shift out of a possible 926. 0 out of 12 assigned methyl groups (LEU and VAL) were assigned stereospecifically.

	Total	¹ H	¹³ C	¹⁵ N
Backbone	307/330 (93%)	126/135 (93%)	121/132 (92%)	60/63 (95%)
Sidechain	400/518 (77%)	260/332 (78%)	139/165 (84%)	1/21 (5%)
Aromatic	57/78 (73%)	30/39 (77%)	27/36 (75%)	0/3 (0%)
Overall	764/926 (83%)	416/506 (82%)	287/333 (86%)	61/87 (70%)

7.1.4 Statistically unusual chemical shifts ⓘ

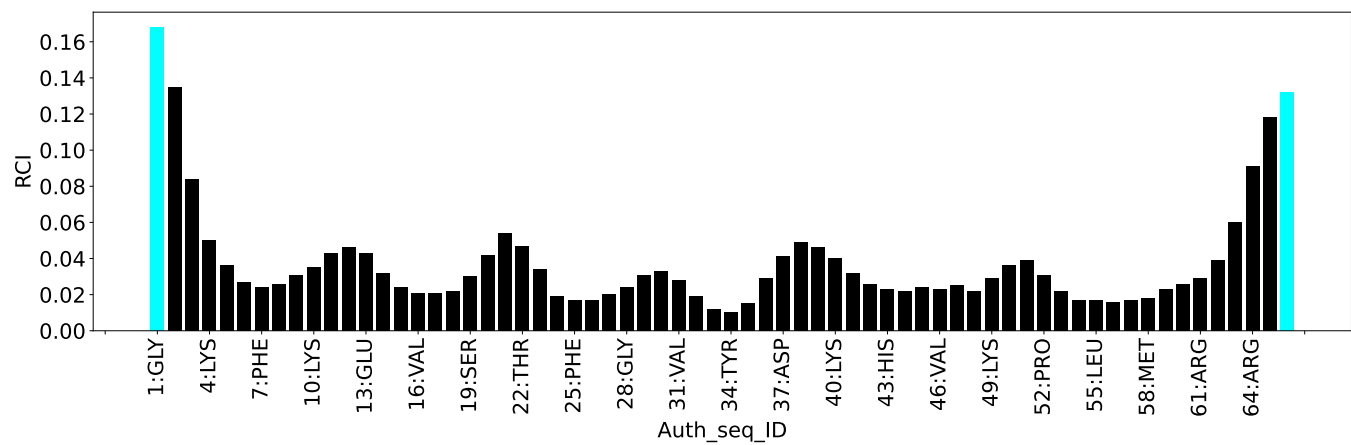
The following table lists the statistically unusual chemical shifts. These are statistical measures, and large deviations from the mean do not necessarily imply incorrect assignments. Molecules containing paramagnetic centres or hemes are expected to give rise to anomalous chemical shifts.

List Id	Chain	Res	Type	Atom	Shift, ppm	Expected range, ppm	Z-score
1	A	14	LYS	HB2	-0.06	0.58 – 2.97	-7.7
1	A	32	VAL	HB	-0.35	0.43 – 3.54	-7.5
1	A	44	GLY	HA3	1.84	2.08 – 5.71	-5.7
1	A	45	LEU	HD21	-0.71	-0.65 – 2.13	-5.2
1	A	45	LEU	HD22	-0.71	-0.65 – 2.13	-5.2
1	A	45	LEU	HD23	-0.71	-0.65 – 2.13	-5.2

7.1.5 Random Coil Index (RCI) plots ⓘ

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

Random coil index (RCI) for chain A:



8 NMR restraints analysis

8.1 Conformationally restricting restraints

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

Description	Value
Total distance restraints	569
Intra-residue ($ i-j =0$)	190
Sequential ($ i-j =1$)	186
Medium range ($ i-j >1$ and $ i-j <5$)	78
Long range ($ i-j \geq 5$)	115
Inter-chain	0
Hydrogen bond restraints	0
Disulfide bond restraints	0
Total dihedral-angle restraints	114
Number of unmapped restraints	0
Number of restraints per residue	8.6
Number of long range restraints per residue ¹	1.5

¹Long range hydrogen bonds and disulfide bonds are counted as long range restraints while calculating the number of long range restraints per residue

8.2 Residual restraint violations

This section provides the overview of the restraint violations analysis. The violations are binned as small, medium and large violations based on its absolute value. Average number of violations per model is calculated by dividing the total number of violations in each bin by the size of the ensemble.

8.2.1 Average number of distance violations per model

Distance violations less than 0.1 Å are not included in the calculation.

Bins (Å)	Average number of violations per model	Max (Å)
0.1-0.2 (Small)	15.3	0.2
0.2-0.5 (Medium)	8.2	0.45
>0.5 (Large)	None	None

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)	35.9	9.96
10.0-20.0 (Medium)	17.8	20.0
>20.0 (Large)	11.3	76.48

9 Distance violation analysis ⓘ

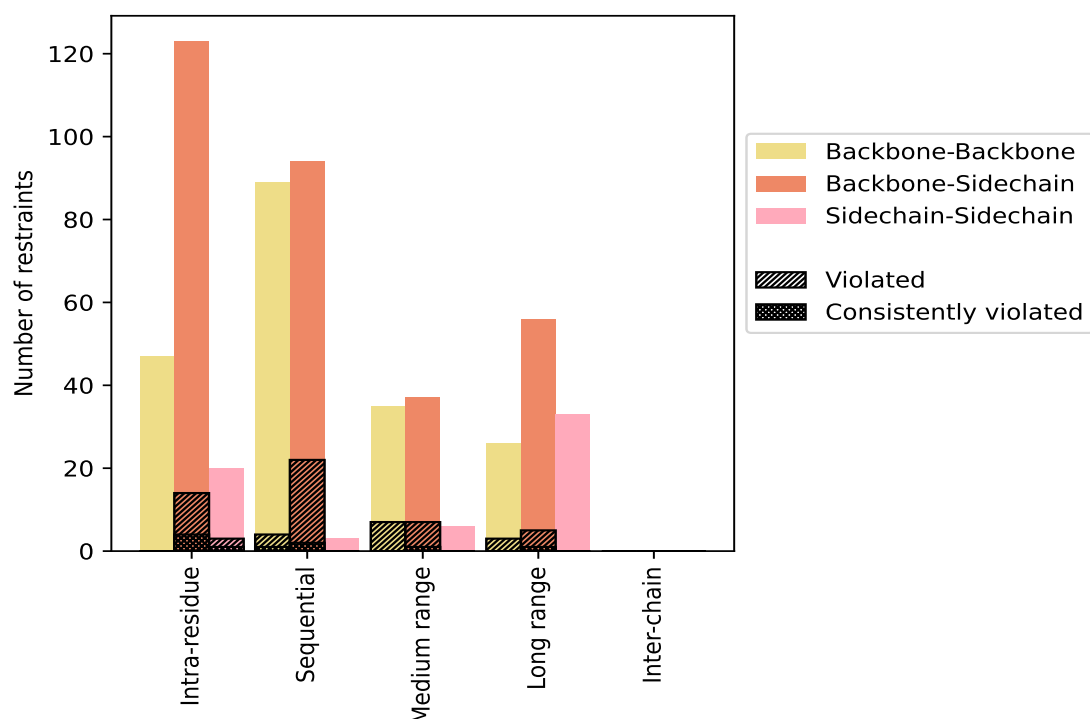
9.1 Summary of distance violations ⓘ

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 ($i-j =0$)	190	33.4	17	8.9	3.0	5	2.6	0.9
Backbone-Backbone	47	8.3	0	0.0	0.0	0	0.0	0.0
Backbone-Sidechain	123	21.6	14	11.4	2.5	4	3.3	0.7
Sidechain-Sidechain	20	3.5	3	15.0	0.5	1	5.0	0.2
Sequential ($i-j =1$)	186	32.7	26	14.0	4.6	3	1.6	0.5
Backbone-Backbone	89	15.6	4	4.5	0.7	1	1.1	0.2
Backbone-Sidechain	94	16.5	22	23.4	3.9	2	2.1	0.4
Sidechain-Sidechain	3	0.5	0	0.0	0.0	0	0.0	0.0
Medium range ($i-j >1$ & $i-j <5$)	78	13.7	14	17.9	2.5	1	1.3	0.2
Backbone-Backbone	35	6.2	7	20.0	1.2	0	0.0	0.0
Backbone-Sidechain	37	6.5	7	18.9	1.2	1	2.7	0.2
Sidechain-Sidechain	6	1.1	0	0.0	0.0	0	0.0	0.0
Long range ($i-j \geq 5$)	115	20.2	8	7.0	1.4	1	0.9	0.2
Backbone-Backbone	26	4.6	3	11.5	0.5	0	0.0	0.0
Backbone-Sidechain	56	9.8	5	8.9	0.9	1	1.8	0.2
Sidechain-Sidechain	33	5.8	0	0.0	0.0	0	0.0	0.0
Inter-chain	0	0.0	0	0.0	0.0	0	0.0	0.0
Backbone-Backbone	0	0.0	0	0.0	0.0	0	0.0	0.0
Backbone-Sidechain	0	0.0	0	0.0	0.0	0	0.0	0.0
Sidechain-Sidechain	0	0.0	0	0.0	0.0	0	0.0	0.0
Hydrogen bond	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	569	100.0	65	11.4	11.4	10	1.8	1.8
Backbone-Backbone	197	34.6	14	7.1	2.5	1	0.5	0.2
Backbone-Sidechain	310	54.5	48	15.5	8.4	8	2.6	1.4
Sidechain-Sidechain	62	10.9	3	4.8	0.5	1	1.6	0.2

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	7	7	5	2	0	21	0.22	0.45	0.11	0.18
2	8	5	7	2	0	22	0.2	0.39	0.09	0.16
3	10	7	5	2	0	24	0.2	0.45	0.11	0.16
4	10	6	4	3	0	23	0.22	0.42	0.1	0.17
5	7	7	6	1	0	21	0.21	0.42	0.1	0.17
6	7	7	8	2	0	24	0.22	0.44	0.11	0.16
7	9	11	6	2	0	28	0.19	0.4	0.08	0.17
8	11	7	4	3	0	25	0.2	0.44	0.1	0.14
9	9	8	6	2	0	25	0.21	0.43	0.09	0.17
10	10	11	3	4	0	28	0.19	0.44	0.1	0.14

Continued on next page...

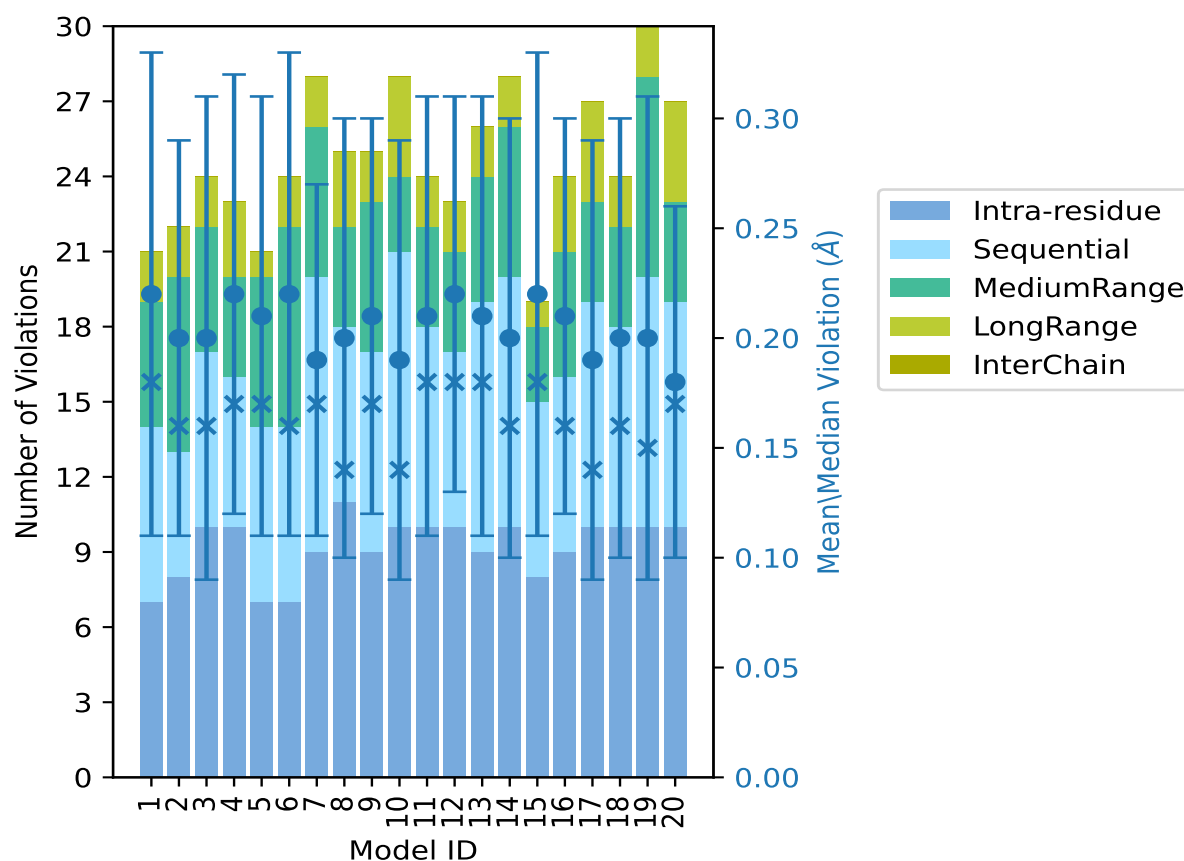
Continued from previous page...

Model ID	Number of violations						Mean (Å)	Max (Å)	SD ⁶ (Å)	Median (Å)
	IR ¹	SQ ²	MR ³	LR ⁴	IC ⁵	Total				
11	10	8	4	2	0	24	0.21	0.45	0.1	0.18
12	10	7	4	2	0	23	0.22	0.43	0.09	0.18
13	9	10	5	2	0	26	0.21	0.44	0.1	0.18
14	10	10	6	2	0	28	0.2	0.41	0.1	0.16
15	8	7	3	1	0	19	0.22	0.45	0.11	0.18
16	9	7	5	3	0	24	0.21	0.4	0.09	0.16
17	10	9	4	4	0	27	0.19	0.41	0.1	0.14
18	10	8	4	2	0	24	0.2	0.4	0.1	0.16
19	10	10	8	2	0	30	0.2	0.44	0.11	0.15
20	10	9	4	4	0	27	0.18	0.4	0.08	0.17

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

⁵Inter-chain restraints, ⁶Standard deviation

9.2.1 Bar graph : Distance Violation statistics for each model ⓘ



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

9.3 Distance violation statistics for the ensemble

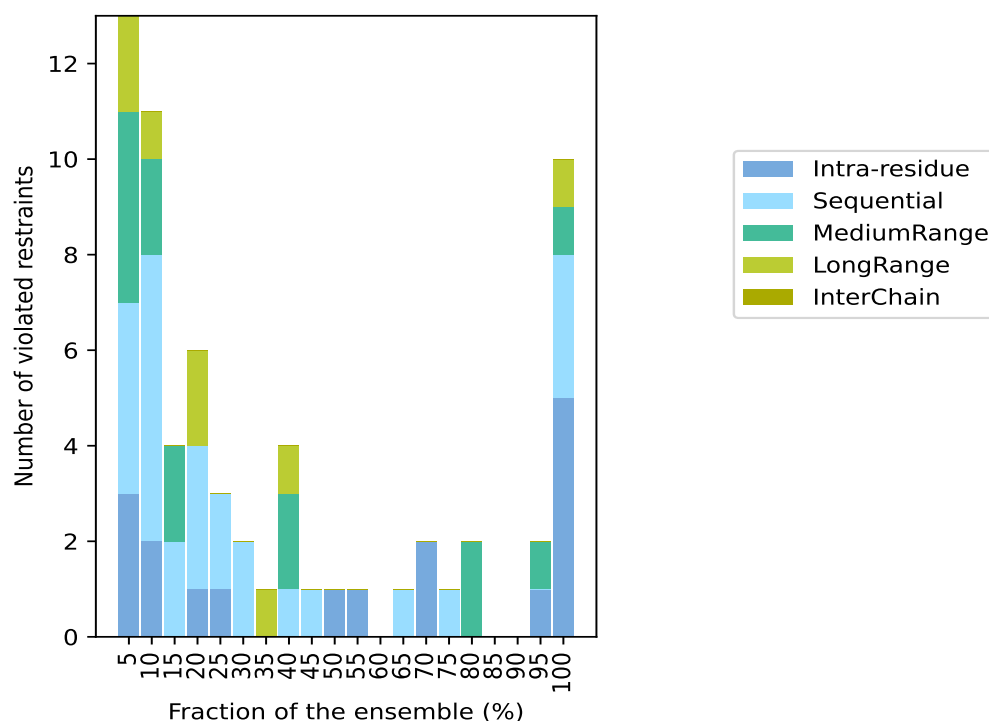
Violation analysis may find that some restraints are violated in few models and some are violated in most of models. The following table provides this information as number of violated restraints for a given fraction of the ensemble. In total, 504(IR:173, SQ:160, MR:64, LR:107, IC:0) restraints are not violated in the ensemble.

Number of violated restraints						Fraction of the ensemble	
IR ¹	SQ ²	MR ³	LR ⁴	IC ⁵	Total	Count ⁶	%
3	4	4	2	0	13	1	5.0
2	6	2	1	0	11	2	10.0
0	2	2	0	0	4	3	15.0
1	3	0	2	0	6	4	20.0
1	2	0	0	0	3	5	25.0
0	2	0	0	0	2	6	30.0
0	0	0	1	0	1	7	35.0
0	1	2	1	0	4	8	40.0
0	1	0	0	0	1	9	45.0
1	0	0	0	0	1	10	50.0
1	0	0	0	0	1	11	55.0
0	0	0	0	0	0	12	60.0
0	1	0	0	0	1	13	65.0
2	0	0	0	0	2	14	70.0
0	1	0	0	0	1	15	75.0
0	0	2	0	0	2	16	80.0
0	0	0	0	0	0	17	85.0
0	0	0	0	0	0	18	90.0
1	0	1	0	0	2	19	95.0
5	3	1	1	0	10	20	100.0

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

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

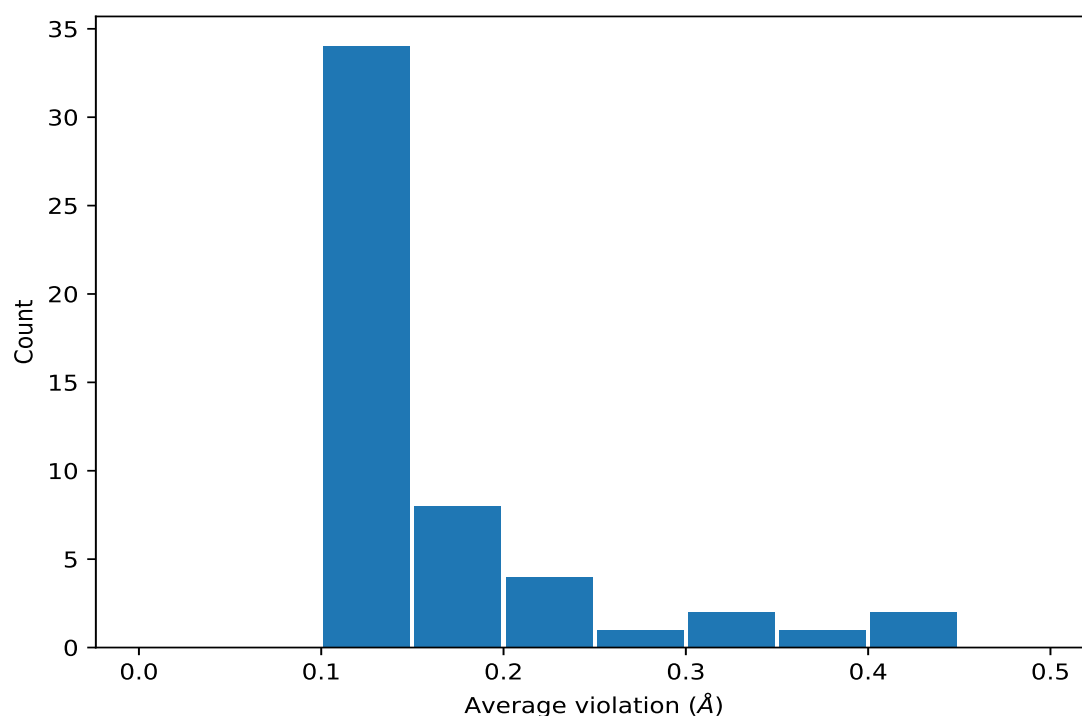
9.3.1 Bar graph : Distance violation statistics for the ensemble [i](#)



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

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

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



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

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

Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)	Median (Å)
(1,87)	1:34:A:TYR:HB2	1:34:A:TYR:HE1	20	0.41	0.02	0.4
(1,561)	1:65:A:GLU:H	1:65:A:GLU:HB3	20	0.4	0.02	0.4
(1,315)	1:56:A:LEU:H	1:54:A:GLU:HG3	20	0.36	0.06	0.35
(1,396)	1:12:A:GLU:H	1:12:A:GLU:HB3	20	0.35	0.04	0.35
(1,18)	1:21:A:ILE:HB	1:35:A:TYR:HA	20	0.34	0.08	0.35
(1,544)	1:60:A:ALA:H	1:59:A:LEU:HB2	20	0.26	0.06	0.24
(1,88)	1:35:A:TYR:HD1	1:35:A:TYR:HA	20	0.24	0.03	0.24
(1,313)	1:58:A:MET:H	1:58:A:MET:HB3	20	0.23	0.04	0.23
(1,296)	1:54:A:GLU:H	1:55:A:LEU:HA	20	0.16	0.03	0.16
(1,297)	1:54:A:GLU:H	1:55:A:LEU:HB2	20	0.15	0.01	0.15
(1,311)	1:56:A:LEU:H	1:56:A:LEU:HB3	19	0.2	0.06	0.2
(1,254)	1:55:A:LEU:H	1:52:A:PRO:HD3	19	0.16	0.02	0.16
(1,189)	1:19:A:SER:H	1:21:A:ILE:HB	16	0.15	0.02	0.15
(1,332)	1:57:A:ASP:H	1:60:A:ALA:H	16	0.15	0.02	0.15
(1,316)	1:58:A:MET:H	1:57:A:ASP:HB2	15	0.15	0.04	0.14
(1,410)	1:14:A:LYS:H	1:14:A:LYS:HG3	14	0.16	0.04	0.15

Continued on next page...

Continued from previous page...

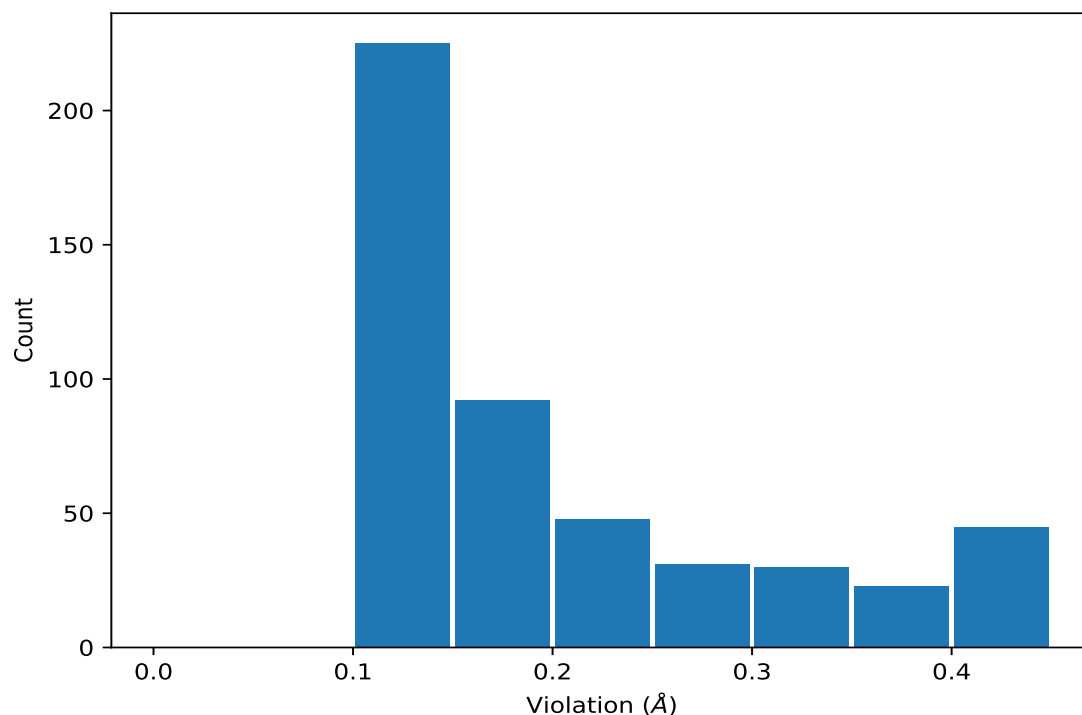
Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)	Median (Å)
(1,567)	1:66:A:LYS:H	1:66:A:LYS:HB2	14	0.14	0.03	0.14
(1,404)	1:14:A:LYS:H	1:13:A:GLU:HG2	13	0.16	0.04	0.15
(1,159)	1:13:A:GLU:H	1:13:A:GLU:HG3	11	0.14	0.03	0.13
(1,492)	1:38:A:ASN:HD21	1:38:A:ASN:HB3	10	0.13	0.02	0.14
(1,195)	1:20:A:LYS:H	1:21:A:ILE:HG12	9	0.14	0.02	0.13
(1,236)	1:40:A:LYS:H	1:37:A:ASP:HB2	8	0.16	0.02	0.16
(1,280)	1:51:A:ALA:H	1:49:A:LYS:HA	8	0.14	0.02	0.14
(1,29)	1:5:A:VAL:H	1:15:A:GLU:HA	8	0.13	0.01	0.13
(1,393)	1:13:A:GLU:H	1:12:A:GLU:H	8	0.12	0.02	0.11
(1,148)	1:7:A:PHE:H	1:13:A:GLU:HB2	7	0.13	0.03	0.12
(1,211)	1:57:A:ASP:H	1:56:A:LEU:HB3	6	0.14	0.02	0.14
(1,309)	1:58:A:MET:H	1:59:A:LEU:HB3	6	0.12	0.02	0.12
(1,409)	1:15:A:GLU:H	1:14:A:LYS:HD2	5	0.17	0.05	0.15
(1,551)	1:61:A:ARG:H	1:61:A:ARG:HG2	5	0.13	0.02	0.13
(1,426)	1:18:A:THR:H	1:17:A:ASP:HB2	5	0.13	0.02	0.12
(1,134)	1:49:A:LYS:H	1:48:A:GLU:HG2	4	0.12	0.01	0.12
(1,162)	1:14:A:LYS:H	1:14:A:LYS:HE2	4	0.12	0.03	0.11
(1,560)	1:66:A:LYS:H	1:65:A:GLU:HB2	4	0.12	0.01	0.12
(1,196)	1:20:A:LYS:H	1:2:A:PRO:HB3	4	0.12	0.01	0.12
(1,209)	1:30:A:LEU:H	1:48:A:GLU:HG3	4	0.12	0.02	0.11
(1,546)	1:61:A:ARG:H	1:60:A:ALA:HA	4	0.12	0.01	0.12
(1,353)	1:64:A:ARG:H	1:61:A:ARG:HA	3	0.15	0.04	0.14
(1,167)	1:15:A:GLU:H	1:14:A:LYS:HB3	3	0.15	0.01	0.14
(1,272)	1:50:A:ASP:H	1:48:A:GLU:HG3	3	0.14	0.02	0.14
(1,504)	1:41:A:THR:H	1:40:A:LYS:HG2	3	0.13	0.01	0.14
(1,158)	1:13:A:GLU:H	1:12:A:GLU:HG2	2	0.2	0.04	0.2
(1,397)	1:12:A:GLU:H	1:12:A:GLU:HG2	2	0.19	0.08	0.19
(1,216)	1:57:A:ASP:H	1:53:A:LYS:HA	2	0.17	0.01	0.17
(1,412)	1:6:A:LYS:H	1:15:A:GLU:HA	2	0.14	0.02	0.14
(1,495)	1:38:A:ASN:HD21	1:38:A:ASN:HB2	2	0.14	0.01	0.14
(1,274)	1:50:A:ASP:H	1:51:A:ALA:HA	2	0.12	0.02	0.12
(1,385)	1:11:A:GLY:H	1:10:A:LYS:HB3	2	0.12	0.02	0.12
(1,150)	1:8:A:LYS:H	1:7:A:PHE:HE2	2	0.11	0.0	0.11
(1,321)	1:58:A:MET:H	1:61:A:ARG:H	2	0.11	0.01	0.11
(1,375)	1:6:A:LYS:H	1:7:A:PHE:HD1	2	0.11	0.0	0.11
(1,111)	1:54:A:GLU:H	1:53:A:LYS:HB2	2	0.1	0.0	0.1

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)
(1,315)	1:56:A:LEU:H	1:54:A:GLU:HG3	3	0.45
(1,87)	1:34:A:TYR:HB2	1:34:A:TYR:HE1	1	0.45
(1,87)	1:34:A:TYR:HB2	1:34:A:TYR:HE1	11	0.45
(1,18)	1:21:A:ILE:HB	1:35:A:TYR:HA	15	0.45
(1,315)	1:56:A:LEU:H	1:54:A:GLU:HG3	6	0.44
(1,315)	1:56:A:LEU:H	1:54:A:GLU:HG3	8	0.44
(1,315)	1:56:A:LEU:H	1:54:A:GLU:HG3	19	0.44
(1,87)	1:34:A:TYR:HB2	1:34:A:TYR:HE1	10	0.44
(1,18)	1:21:A:ILE:HB	1:35:A:TYR:HA	13	0.44
(1,561)	1:65:A:GLU:H	1:65:A:GLU:HB3	9	0.43

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,561)	1:65:A:GLU:H	1:65:A:GLU:HB3	12	0.43
(1,561)	1:65:A:GLU:H	1:65:A:GLU:HB3	15	0.43
(1,396)	1:12:A:GLU:H	1:12:A:GLU:HB3	3	0.43
(1,87)	1:34:A:TYR:HB2	1:34:A:TYR:HE1	6	0.43
(1,18)	1:21:A:ILE:HB	1:35:A:TYR:HA	6	0.43
(1,18)	1:21:A:ILE:HB	1:35:A:TYR:HA	19	0.43
(1,315)	1:56:A:LEU:H	1:54:A:GLU:HG3	9	0.42
(1,87)	1:34:A:TYR:HB2	1:34:A:TYR:HE1	3	0.42
(1,87)	1:34:A:TYR:HB2	1:34:A:TYR:HE1	8	0.42
(1,87)	1:34:A:TYR:HB2	1:34:A:TYR:HE1	15	0.42
(1,87)	1:34:A:TYR:HB2	1:34:A:TYR:HE1	19	0.42
(1,18)	1:21:A:ILE:HB	1:35:A:TYR:HA	4	0.42
(1,18)	1:21:A:ILE:HB	1:35:A:TYR:HA	5	0.42
(1,561)	1:65:A:GLU:H	1:65:A:GLU:HB3	11	0.41
(1,561)	1:65:A:GLU:H	1:65:A:GLU:HB3	14	0.41
(1,396)	1:12:A:GLU:H	1:12:A:GLU:HB3	14	0.41
(1,87)	1:34:A:TYR:HB2	1:34:A:TYR:HE1	17	0.41
(1,561)	1:65:A:GLU:H	1:65:A:GLU:HB3	3	0.4
(1,561)	1:65:A:GLU:H	1:65:A:GLU:HB3	4	0.4
(1,561)	1:65:A:GLU:H	1:65:A:GLU:HB3	5	0.4
(1,561)	1:65:A:GLU:H	1:65:A:GLU:HB3	6	0.4
(1,561)	1:65:A:GLU:H	1:65:A:GLU:HB3	10	0.4
(1,561)	1:65:A:GLU:H	1:65:A:GLU:HB3	13	0.4
(1,561)	1:65:A:GLU:H	1:65:A:GLU:HB3	16	0.4
(1,561)	1:65:A:GLU:H	1:65:A:GLU:HB3	17	0.4
(1,561)	1:65:A:GLU:H	1:65:A:GLU:HB3	18	0.4
(1,561)	1:65:A:GLU:H	1:65:A:GLU:HB3	19	0.4
(1,561)	1:65:A:GLU:H	1:65:A:GLU:HB3	20	0.4
(1,396)	1:12:A:GLU:H	1:12:A:GLU:HB3	19	0.4
(1,315)	1:56:A:LEU:H	1:54:A:GLU:HG3	11	0.4
(1,87)	1:34:A:TYR:HB2	1:34:A:TYR:HE1	4	0.4
(1,87)	1:34:A:TYR:HB2	1:34:A:TYR:HE1	5	0.4
(1,87)	1:34:A:TYR:HB2	1:34:A:TYR:HE1	7	0.4
(1,87)	1:34:A:TYR:HB2	1:34:A:TYR:HE1	12	0.4
(1,18)	1:21:A:ILE:HB	1:35:A:TYR:HA	10	0.4
(1,561)	1:65:A:GLU:H	1:65:A:GLU:HB3	1	0.39
(1,561)	1:65:A:GLU:H	1:65:A:GLU:HB3	2	0.39
(1,561)	1:65:A:GLU:H	1:65:A:GLU:HB3	8	0.39
(1,396)	1:12:A:GLU:H	1:12:A:GLU:HB3	1	0.39
(1,315)	1:56:A:LEU:H	1:54:A:GLU:HG3	14	0.39
(1,87)	1:34:A:TYR:HB2	1:34:A:TYR:HE1	2	0.39
(1,87)	1:34:A:TYR:HB2	1:34:A:TYR:HE1	9	0.39

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,87)	1:34:A:TYR:HB2	1:34:A:TYR:HE1	13	0.39
(1,87)	1:34:A:TYR:HB2	1:34:A:TYR:HE1	14	0.39
(1,87)	1:34:A:TYR:HB2	1:34:A:TYR:HE1	18	0.39
(1,396)	1:12:A:GLU:H	1:12:A:GLU:HB3	6	0.38
(1,396)	1:12:A:GLU:H	1:12:A:GLU:HB3	10	0.38
(1,396)	1:12:A:GLU:H	1:12:A:GLU:HB3	13	0.38
(1,315)	1:56:A:LEU:H	1:54:A:GLU:HG3	17	0.38
(1,544)	1:60:A:ALA:H	1:59:A:LEU:HB2	19	0.37
(1,87)	1:34:A:TYR:HB2	1:34:A:TYR:HE1	16	0.37
(1,87)	1:34:A:TYR:HB2	1:34:A:TYR:HE1	20	0.37
(1,18)	1:21:A:ILE:HB	1:35:A:TYR:HA	1	0.37
(1,18)	1:21:A:ILE:HB	1:35:A:TYR:HA	16	0.37
(1,561)	1:65:A:GLU:H	1:65:A:GLU:HB3	7	0.36
(1,396)	1:12:A:GLU:H	1:12:A:GLU:HB3	7	0.36
(1,396)	1:12:A:GLU:H	1:12:A:GLU:HB3	17	0.36
(1,18)	1:21:A:ILE:HB	1:35:A:TYR:HA	14	0.36
(1,396)	1:12:A:GLU:H	1:12:A:GLU:HB3	16	0.35
(1,396)	1:12:A:GLU:H	1:12:A:GLU:HB3	18	0.35
(1,315)	1:56:A:LEU:H	1:54:A:GLU:HG3	1	0.35
(1,315)	1:56:A:LEU:H	1:54:A:GLU:HG3	5	0.35
(1,315)	1:56:A:LEU:H	1:54:A:GLU:HG3	15	0.35
(1,315)	1:56:A:LEU:H	1:54:A:GLU:HG3	18	0.35
(1,566)	1:66:A:LYS:H	1:66:A:LYS:HB3	4	0.34
(1,396)	1:12:A:GLU:H	1:12:A:GLU:HB3	2	0.34
(1,396)	1:12:A:GLU:H	1:12:A:GLU:HB3	4	0.34
(1,396)	1:12:A:GLU:H	1:12:A:GLU:HB3	8	0.34
(1,315)	1:56:A:LEU:H	1:54:A:GLU:HG3	2	0.34
(1,315)	1:56:A:LEU:H	1:54:A:GLU:HG3	4	0.34
(1,315)	1:56:A:LEU:H	1:54:A:GLU:HG3	10	0.34
(1,18)	1:21:A:ILE:HB	1:35:A:TYR:HA	7	0.34
(1,544)	1:60:A:ALA:H	1:59:A:LEU:HB2	11	0.33
(1,544)	1:60:A:ALA:H	1:59:A:LEU:HB2	16	0.33
(1,396)	1:12:A:GLU:H	1:12:A:GLU:HB3	12	0.33
(1,88)	1:35:A:TYR:HD1	1:35:A:TYR:HA	17	0.33
(1,18)	1:21:A:ILE:HB	1:35:A:TYR:HA	12	0.33
(1,544)	1:60:A:ALA:H	1:59:A:LEU:HB2	8	0.32
(1,396)	1:12:A:GLU:H	1:12:A:GLU:HB3	9	0.32
(1,18)	1:21:A:ILE:HB	1:35:A:TYR:HA	9	0.32
(1,544)	1:60:A:ALA:H	1:59:A:LEU:HB2	5	0.31
(1,396)	1:12:A:GLU:H	1:12:A:GLU:HB3	5	0.31
(1,396)	1:12:A:GLU:H	1:12:A:GLU:HB3	11	0.31
(1,396)	1:12:A:GLU:H	1:12:A:GLU:HB3	20	0.31

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,315)	1:56:A:LEU:H	1:54:A:GLU:HG3	12	0.31
(1,315)	1:56:A:LEU:H	1:54:A:GLU:HG3	13	0.31
(1,313)	1:58:A:MET:H	1:58:A:MET:HB3	12	0.31
(1,18)	1:21:A:ILE:HB	1:35:A:TYR:HA	18	0.31
(1,544)	1:60:A:ALA:H	1:59:A:LEU:HB2	15	0.3
(1,544)	1:60:A:ALA:H	1:59:A:LEU:HB2	18	0.3
(1,396)	1:12:A:GLU:H	1:12:A:GLU:HB3	15	0.3
(1,315)	1:56:A:LEU:H	1:54:A:GLU:HG3	16	0.3
(1,18)	1:21:A:ILE:HB	1:35:A:TYR:HA	8	0.3
(1,18)	1:21:A:ILE:HB	1:35:A:TYR:HA	11	0.3
(1,544)	1:60:A:ALA:H	1:59:A:LEU:HB2	12	0.29
(1,544)	1:60:A:ALA:H	1:59:A:LEU:HB2	6	0.28
(1,315)	1:56:A:LEU:H	1:54:A:GLU:HG3	20	0.28
(1,313)	1:58:A:MET:H	1:58:A:MET:HB3	1	0.28
(1,313)	1:58:A:MET:H	1:58:A:MET:HB3	6	0.28
(1,311)	1:56:A:LEU:H	1:56:A:LEU:HB3	2	0.28
(1,88)	1:35:A:TYR:HD1	1:35:A:TYR:HA	19	0.28
(1,397)	1:12:A:GLU:H	1:12:A:GLU:HG2	11	0.27
(1,313)	1:58:A:MET:H	1:58:A:MET:HB3	7	0.27
(1,313)	1:58:A:MET:H	1:58:A:MET:HB3	10	0.27
(1,311)	1:56:A:LEU:H	1:56:A:LEU:HB3	11	0.27
(1,311)	1:56:A:LEU:H	1:56:A:LEU:HB3	14	0.27
(1,88)	1:35:A:TYR:HD1	1:35:A:TYR:HA	6	0.27
(1,88)	1:35:A:TYR:HD1	1:35:A:TYR:HA	9	0.27
(1,88)	1:35:A:TYR:HD1	1:35:A:TYR:HA	18	0.27
(1,544)	1:60:A:ALA:H	1:59:A:LEU:HB2	13	0.26
(1,410)	1:14:A:LYS:H	1:14:A:LYS:HG3	4	0.26
(1,311)	1:56:A:LEU:H	1:56:A:LEU:HB3	10	0.26
(1,311)	1:56:A:LEU:H	1:56:A:LEU:HB3	16	0.26
(1,88)	1:35:A:TYR:HD1	1:35:A:TYR:HA	1	0.26
(1,88)	1:35:A:TYR:HD1	1:35:A:TYR:HA	8	0.26
(1,316)	1:58:A:MET:H	1:57:A:ASP:HB2	12	0.25
(1,313)	1:58:A:MET:H	1:58:A:MET:HB3	13	0.25
(1,311)	1:56:A:LEU:H	1:56:A:LEU:HB3	9	0.25
(1,88)	1:35:A:TYR:HD1	1:35:A:TYR:HA	20	0.25
(1,409)	1:15:A:GLU:H	1:14:A:LYS:HD2	18	0.24
(1,404)	1:14:A:LYS:H	1:13:A:GLU:HG2	4	0.24
(1,313)	1:58:A:MET:H	1:58:A:MET:HB3	9	0.24
(1,313)	1:58:A:MET:H	1:58:A:MET:HB3	14	0.24
(1,88)	1:35:A:TYR:HD1	1:35:A:TYR:HA	2	0.24
(1,88)	1:35:A:TYR:HD1	1:35:A:TYR:HA	5	0.24
(1,544)	1:60:A:ALA:H	1:59:A:LEU:HB2	3	0.23

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,544)	1:60:A:ALA:H	1:59:A:LEU:HB2	14	0.23
(1,544)	1:60:A:ALA:H	1:59:A:LEU:HB2	20	0.23
(1,315)	1:56:A:LEU:H	1:54:A:GLU:HG3	7	0.23
(1,313)	1:58:A:MET:H	1:58:A:MET:HB3	5	0.23
(1,313)	1:58:A:MET:H	1:58:A:MET:HB3	8	0.23
(1,313)	1:58:A:MET:H	1:58:A:MET:HB3	17	0.23
(1,313)	1:58:A:MET:H	1:58:A:MET:HB3	19	0.23
(1,311)	1:56:A:LEU:H	1:56:A:LEU:HB3	12	0.23
(1,158)	1:13:A:GLU:H	1:12:A:GLU:HG2	13	0.23
(1,88)	1:35:A:TYR:HD1	1:35:A:TYR:HA	3	0.23
(1,88)	1:35:A:TYR:HD1	1:35:A:TYR:HA	4	0.23
(1,88)	1:35:A:TYR:HD1	1:35:A:TYR:HA	7	0.23
(1,88)	1:35:A:TYR:HD1	1:35:A:TYR:HA	11	0.23
(1,88)	1:35:A:TYR:HD1	1:35:A:TYR:HA	12	0.23
(1,88)	1:35:A:TYR:HD1	1:35:A:TYR:HA	14	0.23
(1,18)	1:21:A:ILE:HB	1:35:A:TYR:HA	20	0.23
(1,544)	1:60:A:ALA:H	1:59:A:LEU:HB2	17	0.22
(1,409)	1:15:A:GLU:H	1:14:A:LYS:HD2	14	0.22
(1,404)	1:14:A:LYS:H	1:13:A:GLU:HG2	5	0.22
(1,313)	1:58:A:MET:H	1:58:A:MET:HB3	16	0.22
(1,311)	1:56:A:LEU:H	1:56:A:LEU:HB3	20	0.22
(1,18)	1:21:A:ILE:HB	1:35:A:TYR:HA	2	0.22
(1,18)	1:21:A:ILE:HB	1:35:A:TYR:HA	17	0.22
(1,544)	1:60:A:ALA:H	1:59:A:LEU:HB2	4	0.21
(1,544)	1:60:A:ALA:H	1:59:A:LEU:HB2	7	0.21
(1,316)	1:58:A:MET:H	1:57:A:ASP:HB2	10	0.21
(1,311)	1:56:A:LEU:H	1:56:A:LEU:HB3	7	0.21
(1,159)	1:13:A:GLU:H	1:13:A:GLU:HG3	16	0.21
(1,88)	1:35:A:TYR:HD1	1:35:A:TYR:HA	16	0.21
(1,567)	1:66:A:LYS:H	1:66:A:LYS:HB2	10	0.2
(1,544)	1:60:A:ALA:H	1:59:A:LEU:HB2	10	0.2
(1,404)	1:14:A:LYS:H	1:13:A:GLU:HG2	13	0.2
(1,353)	1:64:A:ARG:H	1:61:A:ARG:HA	7	0.2
(1,332)	1:57:A:ASP:H	1:60:A:ALA:H	2	0.2
(1,311)	1:56:A:LEU:H	1:56:A:LEU:HB3	13	0.2
(1,296)	1:54:A:GLU:H	1:55:A:LEU:HA	17	0.2
(1,236)	1:40:A:LYS:H	1:37:A:ASP:HB2	6	0.2
(1,189)	1:19:A:SER:H	1:21:A:ILE:HB	3	0.2
(1,189)	1:19:A:SER:H	1:21:A:ILE:HB	12	0.2
(1,159)	1:13:A:GLU:H	1:13:A:GLU:HG3	9	0.2
(1,88)	1:35:A:TYR:HD1	1:35:A:TYR:HA	15	0.2
(1,544)	1:60:A:ALA:H	1:59:A:LEU:HB2	2	0.19

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,544)	1:60:A:ALA:H	1:59:A:LEU:HB2	9	0.19
(1,410)	1:14:A:LYS:H	1:14:A:LYS:HG3	15	0.19
(1,404)	1:14:A:LYS:H	1:13:A:GLU:HG2	18	0.19
(1,316)	1:58:A:MET:H	1:57:A:ASP:HB2	1	0.19
(1,316)	1:58:A:MET:H	1:57:A:ASP:HB2	6	0.19
(1,313)	1:58:A:MET:H	1:58:A:MET:HB3	2	0.19
(1,313)	1:58:A:MET:H	1:58:A:MET:HB3	4	0.19
(1,313)	1:58:A:MET:H	1:58:A:MET:HB3	18	0.19
(1,297)	1:54:A:GLU:H	1:55:A:LEU:HB2	13	0.19
(1,296)	1:54:A:GLU:H	1:55:A:LEU:HA	1	0.19
(1,296)	1:54:A:GLU:H	1:55:A:LEU:HA	8	0.19
(1,296)	1:54:A:GLU:H	1:55:A:LEU:HA	14	0.19
(1,253)	1:55:A:LEU:H	1:52:A:PRO:HB3	13	0.19
(1,211)	1:57:A:ASP:H	1:56:A:LEU:HB3	14	0.19
(1,148)	1:7:A:PHE:H	1:13:A:GLU:HB2	11	0.19
(1,88)	1:35:A:TYR:HD1	1:35:A:TYR:HA	13	0.19
(1,567)	1:66:A:LYS:H	1:66:A:LYS:HB2	11	0.18
(1,410)	1:14:A:LYS:H	1:14:A:LYS:HG3	7	0.18
(1,410)	1:14:A:LYS:H	1:14:A:LYS:HG3	13	0.18
(1,410)	1:14:A:LYS:H	1:14:A:LYS:HG3	20	0.18
(1,332)	1:57:A:ASP:H	1:60:A:ALA:H	3	0.18
(1,316)	1:58:A:MET:H	1:57:A:ASP:HB2	3	0.18
(1,316)	1:58:A:MET:H	1:57:A:ASP:HB2	7	0.18
(1,316)	1:58:A:MET:H	1:57:A:ASP:HB2	20	0.18
(1,313)	1:58:A:MET:H	1:58:A:MET:HB3	11	0.18
(1,313)	1:58:A:MET:H	1:58:A:MET:HB3	15	0.18
(1,313)	1:58:A:MET:H	1:58:A:MET:HB3	20	0.18
(1,311)	1:56:A:LEU:H	1:56:A:LEU:HB3	8	0.18
(1,311)	1:56:A:LEU:H	1:56:A:LEU:HB3	18	0.18
(1,296)	1:54:A:GLU:H	1:55:A:LEU:HA	7	0.18
(1,296)	1:54:A:GLU:H	1:55:A:LEU:HA	12	0.18
(1,296)	1:54:A:GLU:H	1:55:A:LEU:HA	15	0.18
(1,280)	1:51:A:ALA:H	1:49:A:LYS:HA	1	0.18
(1,254)	1:55:A:LEU:H	1:52:A:PRO:HD3	1	0.18
(1,254)	1:55:A:LEU:H	1:52:A:PRO:HD3	3	0.18
(1,254)	1:55:A:LEU:H	1:52:A:PRO:HD3	6	0.18
(1,254)	1:55:A:LEU:H	1:52:A:PRO:HD3	7	0.18
(1,254)	1:55:A:LEU:H	1:52:A:PRO:HD3	9	0.18
(1,254)	1:55:A:LEU:H	1:52:A:PRO:HD3	11	0.18
(1,216)	1:57:A:ASP:H	1:53:A:LYS:HA	19	0.18
(1,162)	1:14:A:LYS:H	1:14:A:LYS:HE2	16	0.18
(1,88)	1:35:A:TYR:HD1	1:35:A:TYR:HA	10	0.18

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,551)	1:61:A:ARG:H	1:61:A:ARG:HG2	14	0.17
(1,544)	1:60:A:ALA:H	1:59:A:LEU:HB2	1	0.17
(1,410)	1:14:A:LYS:H	1:14:A:LYS:HG3	3	0.17
(1,404)	1:14:A:LYS:H	1:13:A:GLU:HG2	20	0.17
(1,332)	1:57:A:ASP:H	1:60:A:ALA:H	9	0.17
(1,332)	1:57:A:ASP:H	1:60:A:ALA:H	15	0.17
(1,332)	1:57:A:ASP:H	1:60:A:ALA:H	19	0.17
(1,332)	1:57:A:ASP:H	1:60:A:ALA:H	20	0.17
(1,311)	1:56:A:LEU:H	1:56:A:LEU:HB3	4	0.17
(1,309)	1:58:A:MET:H	1:59:A:LEU:HB3	9	0.17
(1,297)	1:54:A:GLU:H	1:55:A:LEU:HB2	5	0.17
(1,297)	1:54:A:GLU:H	1:55:A:LEU:HB2	11	0.17
(1,296)	1:54:A:GLU:H	1:55:A:LEU:HA	5	0.17
(1,296)	1:54:A:GLU:H	1:55:A:LEU:HA	10	0.17
(1,289)	1:53:A:LYS:H	1:53:A:LYS:HG3	19	0.17
(1,289)	1:53:A:LYS:H	1:53:A:LYS:HG2	19	0.17
(1,272)	1:50:A:ASP:H	1:48:A:GLU:HG3	19	0.17
(1,254)	1:55:A:LEU:H	1:52:A:PRO:HD3	18	0.17
(1,254)	1:55:A:LEU:H	1:52:A:PRO:HD3	19	0.17
(1,254)	1:55:A:LEU:H	1:52:A:PRO:HD3	20	0.17
(1,236)	1:40:A:LYS:H	1:37:A:ASP:HB2	2	0.17
(1,195)	1:20:A:LYS:H	1:21:A:ILE:HG12	1	0.17
(1,18)	1:21:A:ILE:HB	1:35:A:TYR:HA	3	0.17
(1,567)	1:66:A:LYS:H	1:66:A:LYS:HB2	7	0.16
(1,412)	1:6:A:LYS:H	1:15:A:GLU:HA	14	0.16
(1,410)	1:14:A:LYS:H	1:14:A:LYS:HG3	19	0.16
(1,404)	1:14:A:LYS:H	1:13:A:GLU:HG2	7	0.16
(1,403)	1:14:A:LYS:H	1:13:A:GLU:HG3	6	0.16
(1,393)	1:13:A:GLU:H	1:12:A:GLU:H	5	0.16
(1,332)	1:57:A:ASP:H	1:60:A:ALA:H	6	0.16
(1,297)	1:54:A:GLU:H	1:55:A:LEU:HB2	1	0.16
(1,297)	1:54:A:GLU:H	1:55:A:LEU:HB2	6	0.16
(1,297)	1:54:A:GLU:H	1:55:A:LEU:HB2	17	0.16
(1,296)	1:54:A:GLU:H	1:55:A:LEU:HA	4	0.16
(1,296)	1:54:A:GLU:H	1:55:A:LEU:HA	11	0.16
(1,296)	1:54:A:GLU:H	1:55:A:LEU:HA	20	0.16
(1,282)	1:51:A:ALA:H	1:52:A:PRO:HD3	13	0.16
(1,254)	1:55:A:LEU:H	1:52:A:PRO:HD3	15	0.16
(1,236)	1:40:A:LYS:H	1:37:A:ASP:HB2	9	0.16
(1,236)	1:40:A:LYS:H	1:37:A:ASP:HB2	14	0.16
(1,216)	1:57:A:ASP:H	1:53:A:LYS:HA	2	0.16
(1,195)	1:20:A:LYS:H	1:21:A:ILE:HG12	15	0.16

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,189)	1:19:A:SER:H	1:21:A:ILE:HB	4	0.16
(1,189)	1:19:A:SER:H	1:21:A:ILE:HB	6	0.16
(1,189)	1:19:A:SER:H	1:21:A:ILE:HB	10	0.16
(1,189)	1:19:A:SER:H	1:21:A:ILE:HB	11	0.16
(1,189)	1:19:A:SER:H	1:21:A:ILE:HB	16	0.16
(1,167)	1:15:A:GLU:H	1:14:A:LYS:HB3	6	0.16
(1,158)	1:13:A:GLU:H	1:12:A:GLU:HG2	12	0.16
(1,567)	1:66:A:LYS:H	1:66:A:LYS:HB2	3	0.15
(1,492)	1:38:A:ASN:HD21	1:38:A:ASN:HB3	13	0.15
(1,426)	1:18:A:THR:H	1:17:A:ASP:HB2	12	0.15
(1,409)	1:15:A:GLU:H	1:14:A:LYS:HD2	15	0.15
(1,404)	1:14:A:LYS:H	1:13:A:GLU:HG2	14	0.15
(1,404)	1:14:A:LYS:H	1:13:A:GLU:HG2	19	0.15
(1,332)	1:57:A:ASP:H	1:60:A:ALA:H	5	0.15
(1,332)	1:57:A:ASP:H	1:60:A:ALA:H	14	0.15
(1,311)	1:56:A:LEU:H	1:56:A:LEU:HB3	17	0.15
(1,311)	1:56:A:LEU:H	1:56:A:LEU:HB3	19	0.15
(1,297)	1:54:A:GLU:H	1:55:A:LEU:HB2	7	0.15
(1,297)	1:54:A:GLU:H	1:55:A:LEU:HB2	9	0.15
(1,297)	1:54:A:GLU:H	1:55:A:LEU:HB2	14	0.15
(1,297)	1:54:A:GLU:H	1:55:A:LEU:HB2	16	0.15
(1,297)	1:54:A:GLU:H	1:55:A:LEU:HB2	18	0.15
(1,297)	1:54:A:GLU:H	1:55:A:LEU:HB2	19	0.15
(1,297)	1:54:A:GLU:H	1:55:A:LEU:HB2	20	0.15
(1,296)	1:54:A:GLU:H	1:55:A:LEU:HA	6	0.15
(1,296)	1:54:A:GLU:H	1:55:A:LEU:HA	16	0.15
(1,254)	1:55:A:LEU:H	1:52:A:PRO:HD3	8	0.15
(1,254)	1:55:A:LEU:H	1:52:A:PRO:HD3	17	0.15
(1,236)	1:40:A:LYS:H	1:37:A:ASP:HB2	7	0.15
(1,209)	1:30:A:LEU:H	1:48:A:GLU:HG3	9	0.15
(1,195)	1:20:A:LYS:H	1:21:A:ILE:HG12	6	0.15
(1,189)	1:19:A:SER:H	1:21:A:ILE:HB	9	0.15
(1,189)	1:19:A:SER:H	1:21:A:ILE:HB	14	0.15
(1,189)	1:19:A:SER:H	1:21:A:ILE:HB	17	0.15
(1,148)	1:7:A:PHE:H	1:13:A:GLU:HB2	3	0.15
(1,148)	1:7:A:PHE:H	1:13:A:GLU:HB2	8	0.15
(1,29)	1:5:A:VAL:H	1:15:A:GLU:HA	4	0.15
(1,567)	1:66:A:LYS:H	1:66:A:LYS:HB2	12	0.14
(1,567)	1:66:A:LYS:H	1:66:A:LYS:HB2	14	0.14
(1,567)	1:66:A:LYS:H	1:66:A:LYS:HB2	16	0.14
(1,551)	1:61:A:ARG:H	1:61:A:ARG:HG2	9	0.14
(1,504)	1:41:A:THR:H	1:40:A:LYS:HG2	2	0.14

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,504)	1:41:A:THR:H	1:40:A:LYS:HG2	19	0.14
(1,495)	1:38:A:ASN:HD21	1:38:A:ASN:HB2	8	0.14
(1,492)	1:38:A:ASN:HD21	1:38:A:ASN:HB3	4	0.14
(1,492)	1:38:A:ASN:HD21	1:38:A:ASN:HB3	15	0.14
(1,492)	1:38:A:ASN:HD21	1:38:A:ASN:HB3	17	0.14
(1,492)	1:38:A:ASN:HD21	1:38:A:ASN:HB3	18	0.14
(1,426)	1:18:A:THR:H	1:17:A:ASP:HB2	18	0.14
(1,410)	1:14:A:LYS:H	1:14:A:LYS:HG3	11	0.14
(1,410)	1:14:A:LYS:H	1:14:A:LYS:HG3	12	0.14
(1,410)	1:14:A:LYS:H	1:14:A:LYS:HG3	14	0.14
(1,404)	1:14:A:LYS:H	1:13:A:GLU:HG2	8	0.14
(1,398)	1:12:A:GLU:H	1:12:A:GLU:HG3	20	0.14
(1,353)	1:64:A:ARG:H	1:61:A:ARG:HA	1	0.14
(1,346)	1:63:A:GLU:H	1:65:A:GLU:HG3	16	0.14
(1,332)	1:57:A:ASP:H	1:60:A:ALA:H	1	0.14
(1,332)	1:57:A:ASP:H	1:60:A:ALA:H	12	0.14
(1,332)	1:57:A:ASP:H	1:60:A:ALA:H	13	0.14
(1,316)	1:58:A:MET:H	1:57:A:ASP:HB2	16	0.14
(1,313)	1:58:A:MET:H	1:58:A:MET:HB3	3	0.14
(1,297)	1:54:A:GLU:H	1:55:A:LEU:HB2	3	0.14
(1,297)	1:54:A:GLU:H	1:55:A:LEU:HB2	4	0.14
(1,297)	1:54:A:GLU:H	1:55:A:LEU:HB2	8	0.14
(1,297)	1:54:A:GLU:H	1:55:A:LEU:HB2	10	0.14
(1,296)	1:54:A:GLU:H	1:55:A:LEU:HA	9	0.14
(1,296)	1:54:A:GLU:H	1:55:A:LEU:HA	18	0.14
(1,280)	1:51:A:ALA:H	1:49:A:LYS:HA	4	0.14
(1,280)	1:51:A:ALA:H	1:49:A:LYS:HA	6	0.14
(1,280)	1:51:A:ALA:H	1:49:A:LYS:HA	17	0.14
(1,280)	1:51:A:ALA:H	1:49:A:LYS:HA	18	0.14
(1,272)	1:50:A:ASP:H	1:48:A:GLU:HG3	9	0.14
(1,254)	1:55:A:LEU:H	1:52:A:PRO:HD3	4	0.14
(1,236)	1:40:A:LYS:H	1:37:A:ASP:HB2	5	0.14
(1,236)	1:40:A:LYS:H	1:37:A:ASP:HB2	13	0.14
(1,211)	1:57:A:ASP:H	1:56:A:LEU:HB3	10	0.14
(1,211)	1:57:A:ASP:H	1:56:A:LEU:HB3	11	0.14
(1,195)	1:20:A:LYS:H	1:21:A:ILE:HG12	5	0.14
(1,189)	1:19:A:SER:H	1:21:A:ILE:HB	13	0.14
(1,189)	1:19:A:SER:H	1:21:A:ILE:HB	19	0.14
(1,167)	1:15:A:GLU:H	1:14:A:LYS:HB3	9	0.14
(1,167)	1:15:A:GLU:H	1:14:A:LYS:HB3	17	0.14
(1,159)	1:13:A:GLU:H	1:13:A:GLU:HG3	8	0.14
(1,159)	1:13:A:GLU:H	1:13:A:GLU:HG3	18	0.14

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,159)	1:13:A:GLU:H	1:13:A:GLU:HG3	19	0.14
(1,134)	1:49:A:LYS:H	1:48:A:GLU:HG2	14	0.14
(1,106)	1:16:A:VAL:H	1:6:A:LYS:HA	17	0.14
(1,29)	1:5:A:VAL:H	1:15:A:GLU:HA	2	0.14
(1,29)	1:5:A:VAL:H	1:15:A:GLU:HA	17	0.14
(1,567)	1:66:A:LYS:H	1:66:A:LYS:HB2	13	0.13
(1,560)	1:66:A:LYS:H	1:65:A:GLU:HB2	10	0.13
(1,560)	1:66:A:LYS:H	1:65:A:GLU:HB2	12	0.13
(1,551)	1:61:A:ARG:H	1:61:A:ARG:HG2	17	0.13
(1,551)	1:61:A:ARG:H	1:61:A:ARG:HG2	20	0.13
(1,546)	1:61:A:ARG:H	1:60:A:ALA:HA	14	0.13
(1,495)	1:38:A:ASN:HD21	1:38:A:ASN:HB2	12	0.13
(1,492)	1:38:A:ASN:HD21	1:38:A:ASN:HB3	9	0.13
(1,410)	1:14:A:LYS:H	1:14:A:LYS:HG3	8	0.13
(1,393)	1:13:A:GLU:H	1:12:A:GLU:H	4	0.13
(1,385)	1:11:A:GLY:H	1:10:A:LYS:HB3	16	0.13
(1,345)	1:60:A:ALA:H	1:62:A:ALA:H	19	0.13
(1,332)	1:57:A:ASP:H	1:60:A:ALA:H	8	0.13
(1,316)	1:58:A:MET:H	1:57:A:ASP:HB2	9	0.13
(1,309)	1:58:A:MET:H	1:59:A:LEU:HB3	10	0.13
(1,297)	1:54:A:GLU:H	1:55:A:LEU:HB2	2	0.13
(1,297)	1:54:A:GLU:H	1:55:A:LEU:HB2	12	0.13
(1,297)	1:54:A:GLU:H	1:55:A:LEU:HB2	15	0.13
(1,296)	1:54:A:GLU:H	1:55:A:LEU:HA	3	0.13
(1,296)	1:54:A:GLU:H	1:55:A:LEU:HA	13	0.13
(1,280)	1:51:A:ALA:H	1:49:A:LYS:HA	3	0.13
(1,274)	1:50:A:ASP:H	1:51:A:ALA:HA	16	0.13
(1,254)	1:55:A:LEU:H	1:52:A:PRO:HD3	5	0.13
(1,254)	1:55:A:LEU:H	1:52:A:PRO:HD3	10	0.13
(1,254)	1:55:A:LEU:H	1:52:A:PRO:HD3	12	0.13
(1,254)	1:55:A:LEU:H	1:52:A:PRO:HD3	14	0.13
(1,236)	1:40:A:LYS:H	1:37:A:ASP:HB2	8	0.13
(1,211)	1:57:A:ASP:H	1:56:A:LEU:HB3	2	0.13
(1,211)	1:57:A:ASP:H	1:56:A:LEU:HB3	7	0.13
(1,196)	1:20:A:LYS:H	1:2:A:PRO:HB3	20	0.13
(1,195)	1:20:A:LYS:H	1:21:A:ILE:HG12	13	0.13
(1,195)	1:20:A:LYS:H	1:21:A:ILE:HG12	18	0.13
(1,189)	1:19:A:SER:H	1:21:A:ILE:HB	5	0.13
(1,189)	1:19:A:SER:H	1:21:A:ILE:HB	20	0.13
(1,159)	1:13:A:GLU:H	1:13:A:GLU:HG3	4	0.13
(1,136)	1:3:A:VAL:H	1:2:A:PRO:HB3	7	0.13
(1,134)	1:49:A:LYS:H	1:48:A:GLU:HG2	10	0.13

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,29)	1:5:A:VAL:H	1:15:A:GLU:HA	6	0.13
(1,29)	1:5:A:VAL:H	1:15:A:GLU:HA	16	0.13
(1,567)	1:66:A:LYS:H	1:66:A:LYS:HB2	8	0.12
(1,567)	1:66:A:LYS:H	1:66:A:LYS:HB2	15	0.12
(1,567)	1:66:A:LYS:H	1:66:A:LYS:HB2	17	0.12
(1,567)	1:66:A:LYS:H	1:66:A:LYS:HB2	18	0.12
(1,560)	1:66:A:LYS:H	1:65:A:GLU:HB2	9	0.12
(1,546)	1:61:A:ARG:H	1:60:A:ALA:HA	7	0.12
(1,504)	1:41:A:THR:H	1:40:A:LYS:HG2	7	0.12
(1,492)	1:38:A:ASN:HD21	1:38:A:ASN:HB3	3	0.12
(1,492)	1:38:A:ASN:HD21	1:38:A:ASN:HB3	20	0.12
(1,426)	1:18:A:THR:H	1:17:A:ASP:HB2	3	0.12
(1,412)	1:6:A:LYS:H	1:15:A:GLU:HA	17	0.12
(1,410)	1:14:A:LYS:H	1:14:A:LYS:HG3	1	0.12
(1,410)	1:14:A:LYS:H	1:14:A:LYS:HG3	10	0.12
(1,404)	1:14:A:LYS:H	1:13:A:GLU:HG2	10	0.12
(1,393)	1:13:A:GLU:H	1:12:A:GLU:H	11	0.12
(1,332)	1:57:A:ASP:H	1:60:A:ALA:H	7	0.12
(1,321)	1:58:A:MET:H	1:61:A:ARG:H	2	0.12
(1,316)	1:58:A:MET:H	1:57:A:ASP:HB2	4	0.12
(1,316)	1:58:A:MET:H	1:57:A:ASP:HB2	18	0.12
(1,311)	1:56:A:LEU:H	1:56:A:LEU:HB3	1	0.12
(1,311)	1:56:A:LEU:H	1:56:A:LEU:HB3	3	0.12
(1,311)	1:56:A:LEU:H	1:56:A:LEU:HB3	5	0.12
(1,311)	1:56:A:LEU:H	1:56:A:LEU:HB3	6	0.12
(1,309)	1:58:A:MET:H	1:59:A:LEU:HB3	3	0.12
(1,309)	1:58:A:MET:H	1:59:A:LEU:HB3	17	0.12
(1,296)	1:54:A:GLU:H	1:55:A:LEU:HA	19	0.12
(1,280)	1:51:A:ALA:H	1:49:A:LYS:HA	19	0.12
(1,272)	1:50:A:ASP:H	1:48:A:GLU:HG3	16	0.12
(1,254)	1:55:A:LEU:H	1:52:A:PRO:HD3	2	0.12
(1,254)	1:55:A:LEU:H	1:52:A:PRO:HD3	16	0.12
(1,211)	1:57:A:ASP:H	1:56:A:LEU:HB3	16	0.12
(1,196)	1:20:A:LYS:H	1:2:A:PRO:HB3	10	0.12
(1,196)	1:20:A:LYS:H	1:2:A:PRO:HB3	19	0.12
(1,195)	1:20:A:LYS:H	1:21:A:ILE:HG12	10	0.12
(1,195)	1:20:A:LYS:H	1:21:A:ILE:HG12	19	0.12
(1,189)	1:19:A:SER:H	1:21:A:ILE:HB	2	0.12
(1,189)	1:19:A:SER:H	1:21:A:ILE:HB	7	0.12
(1,159)	1:13:A:GLU:H	1:13:A:GLU:HG3	11	0.12
(1,159)	1:13:A:GLU:H	1:13:A:GLU:HG3	14	0.12
(1,148)	1:7:A:PHE:H	1:13:A:GLU:HB2	10	0.12

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,29)	1:5:A:VAL:H	1:15:A:GLU:HA	10	0.12
(1,29)	1:5:A:VAL:H	1:15:A:GLU:HA	12	0.12
(1,567)	1:66:A:LYS:H	1:66:A:LYS:HB2	2	0.11
(1,560)	1:66:A:LYS:H	1:65:A:GLU:HB2	15	0.11
(1,546)	1:61:A:ARG:H	1:60:A:ALA:HA	11	0.11
(1,546)	1:61:A:ARG:H	1:60:A:ALA:HA	19	0.11
(1,492)	1:38:A:ASN:HD21	1:38:A:ASN:HB3	5	0.11
(1,426)	1:18:A:THR:H	1:17:A:ASP:HB2	8	0.11
(1,426)	1:18:A:THR:H	1:17:A:ASP:HB2	11	0.11
(1,410)	1:14:A:LYS:H	1:14:A:LYS:HG3	2	0.11
(1,409)	1:15:A:GLU:H	1:14:A:LYS:HD2	10	0.11
(1,409)	1:15:A:GLU:H	1:14:A:LYS:HD2	20	0.11
(1,404)	1:14:A:LYS:H	1:13:A:GLU:HG2	1	0.11
(1,404)	1:14:A:LYS:H	1:13:A:GLU:HG2	3	0.11
(1,404)	1:14:A:LYS:H	1:13:A:GLU:HG2	17	0.11
(1,397)	1:12:A:GLU:H	1:12:A:GLU:HG2	3	0.11
(1,393)	1:13:A:GLU:H	1:12:A:GLU:H	8	0.11
(1,393)	1:13:A:GLU:H	1:12:A:GLU:H	14	0.11
(1,393)	1:13:A:GLU:H	1:12:A:GLU:H	17	0.11
(1,393)	1:13:A:GLU:H	1:12:A:GLU:H	20	0.11
(1,375)	1:6:A:LYS:H	1:7:A:PHE:HD1	5	0.11
(1,375)	1:6:A:LYS:H	1:7:A:PHE:HD1	17	0.11
(1,353)	1:64:A:ARG:H	1:61:A:ARG:HA	14	0.11
(1,332)	1:57:A:ASP:H	1:60:A:ALA:H	11	0.11
(1,332)	1:57:A:ASP:H	1:60:A:ALA:H	18	0.11
(1,316)	1:58:A:MET:H	1:57:A:ASP:HB2	8	0.11
(1,316)	1:58:A:MET:H	1:57:A:ASP:HB2	15	0.11
(1,316)	1:58:A:MET:H	1:57:A:ASP:HB2	19	0.11
(1,309)	1:58:A:MET:H	1:59:A:LEU:HB3	13	0.11
(1,300)	1:58:A:MET:H	1:55:A:LEU:H	6	0.11
(1,296)	1:54:A:GLU:H	1:55:A:LEU:HA	2	0.11
(1,209)	1:30:A:LEU:H	1:48:A:GLU:HG3	1	0.11
(1,209)	1:30:A:LEU:H	1:48:A:GLU:HG3	8	0.11
(1,162)	1:14:A:LYS:H	1:14:A:LYS:HE2	8	0.11
(1,159)	1:13:A:GLU:H	1:13:A:GLU:HG3	6	0.11
(1,159)	1:13:A:GLU:H	1:13:A:GLU:HG3	12	0.11
(1,150)	1:8:A:LYS:H	1:7:A:PHE:HE2	13	0.11
(1,150)	1:8:A:LYS:H	1:7:A:PHE:HE2	19	0.11
(1,148)	1:7:A:PHE:H	1:13:A:GLU:HB2	4	0.11
(1,148)	1:7:A:PHE:H	1:13:A:GLU:HB2	16	0.11
(1,148)	1:7:A:PHE:H	1:13:A:GLU:HB2	20	0.11
(1,134)	1:49:A:LYS:H	1:48:A:GLU:HG2	17	0.11

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,134)	1:49:A:LYS:H	1:48:A:GLU:HG2	20	0.11
(1,567)	1:66:A:LYS:H	1:66:A:LYS:HB2	19	0.1
(1,551)	1:61:A:ARG:H	1:61:A:ARG:HG2	18	0.1
(1,492)	1:38:A:ASN:HD21	1:38:A:ASN:HB3	10	0.1
(1,393)	1:13:A:GLU:H	1:12:A:GLU:H	7	0.1
(1,385)	1:11:A:GLY:H	1:10:A:LYS:HB3	13	0.1
(1,321)	1:58:A:MET:H	1:61:A:ARG:H	6	0.1
(1,316)	1:58:A:MET:H	1:57:A:ASP:HB2	11	0.1
(1,309)	1:58:A:MET:H	1:59:A:LEU:HB3	20	0.1
(1,280)	1:51:A:ALA:H	1:49:A:LYS:HA	5	0.1
(1,274)	1:50:A:ASP:H	1:51:A:ALA:HA	9	0.1
(1,209)	1:30:A:LEU:H	1:48:A:GLU:HG3	18	0.1
(1,196)	1:20:A:LYS:H	1:2:A:PRO:HB3	13	0.1
(1,195)	1:20:A:LYS:H	1:21:A:ILE:HG12	14	0.1
(1,162)	1:14:A:LYS:H	1:14:A:LYS:HE2	10	0.1
(1,162)	1:14:A:LYS:H	1:14:A:LYS:HE2	17	0.1
(1,159)	1:13:A:GLU:H	1:13:A:GLU:HG3	7	0.1
(1,137)	1:3:A:VAL:H	1:2:A:PRO:HB2	19	0.1
(1,111)	1:54:A:GLU:H	1:53:A:LYS:HB2	1	0.1
(1,111)	1:54:A:GLU:H	1:53:A:LYS:HB2	7	0.1
(1,29)	1:5:A:VAL:H	1:15:A:GLU:HA	20	0.1
(1,23)	1:21:A:ILE:HG13	1:35:A:TYR:HA	7	0.1

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

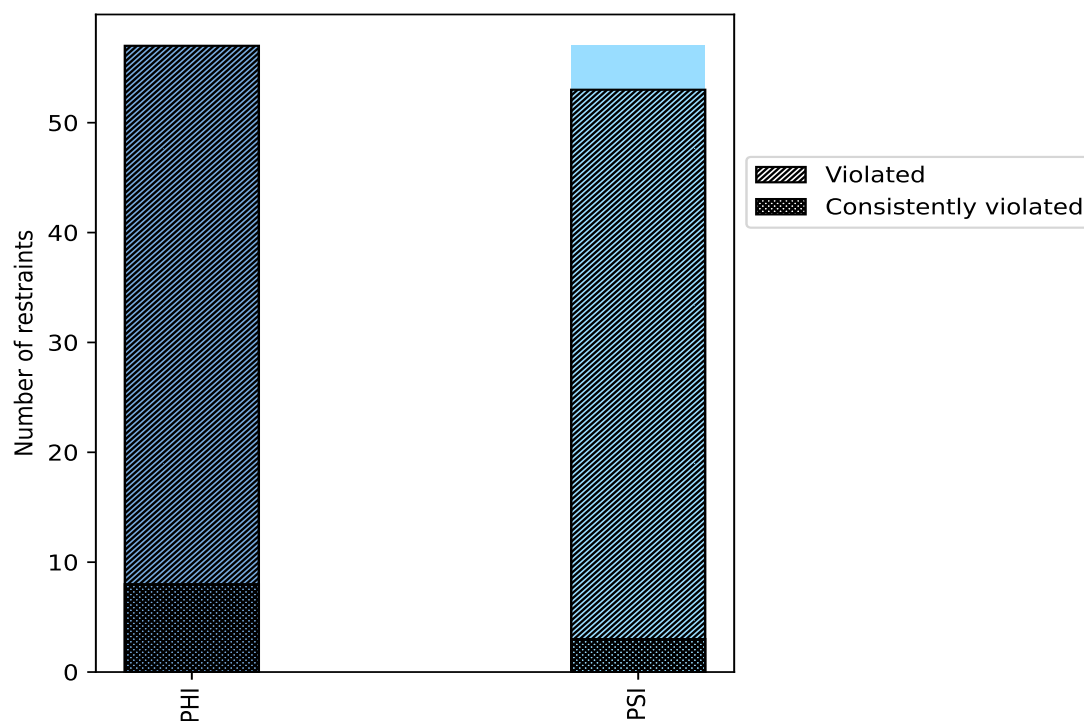
10.1 Summary of dihedral-angle violations [i](#)

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

Angle type	Count	% ¹	Violated ³			Consistently Violated ⁴		
			Count	% ²	% ¹	Count	% ²	% ¹
PHI	57	50.0	57	100.0	50.0	8	14.0	7.0
PSI	57	50.0	53	93.0	46.5	3	5.3	2.6
Total	114	100.0	110	96.5	96.5	11	9.6	9.6

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

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



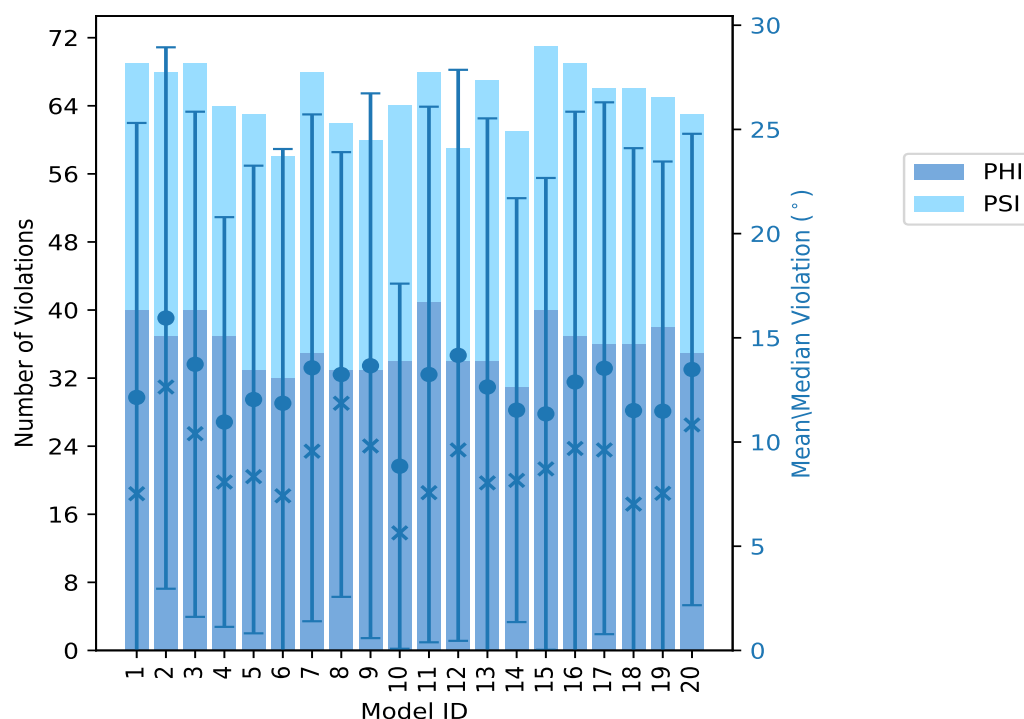
Violated and consistently violated restraints are shown using different hatch patterns in their respective categories

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

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

Model ID	Number of violations			Mean (°)	Max (°)	SD (°)	Median (°)
	PHI	PSI	Total				
1	40	29	69	12.14	55.62	13.17	7.52
2	37	31	68	15.95	59.41	12.99	12.64
3	40	29	69	13.73	57.67	12.12	10.4
4	37	27	64	10.96	50.48	9.83	8.08
5	33	30	63	12.04	52.87	11.22	8.34
6	32	26	58	11.86	56.48	12.2	7.42
7	35	33	68	13.56	55.51	12.16	9.56
8	33	29	62	13.24	53.16	10.67	11.86
9	33	27	60	13.66	60.67	13.07	9.81
10	34	30	64	8.84	51.24	8.76	5.64
11	41	27	68	13.24	57.05	12.85	7.57
12	34	25	59	14.16	64.04	13.7	9.62
13	34	33	67	12.64	50.34	12.89	8.04
14	31	30	61	11.53	49.9	10.17	8.16
15	40	31	71	11.35	57.05	11.32	8.71
16	37	32	69	12.88	76.48	12.97	9.69
17	36	30	66	13.54	55.21	12.76	9.62
18	36	30	66	11.51	64.08	12.59	7.02
19	38	27	65	11.48	54.61	11.98	7.54
20	35	28	63	13.48	50.54	11.31	10.82

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



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

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

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

Number of violated restraints			Fraction of the ensemble	
PHI	PSI	Total	Count ¹	%
2	2	4	1	5.0
3	2	5	2	10.0
2	2	4	3	15.0
1	2	3	4	20.0
2	2	4	5	25.0
0	1	1	6	30.0
3	4	7	7	35.0
1	3	4	8	40.0
5	4	9	9	45.0
1	2	3	10	50.0
5	4	9	11	55.0

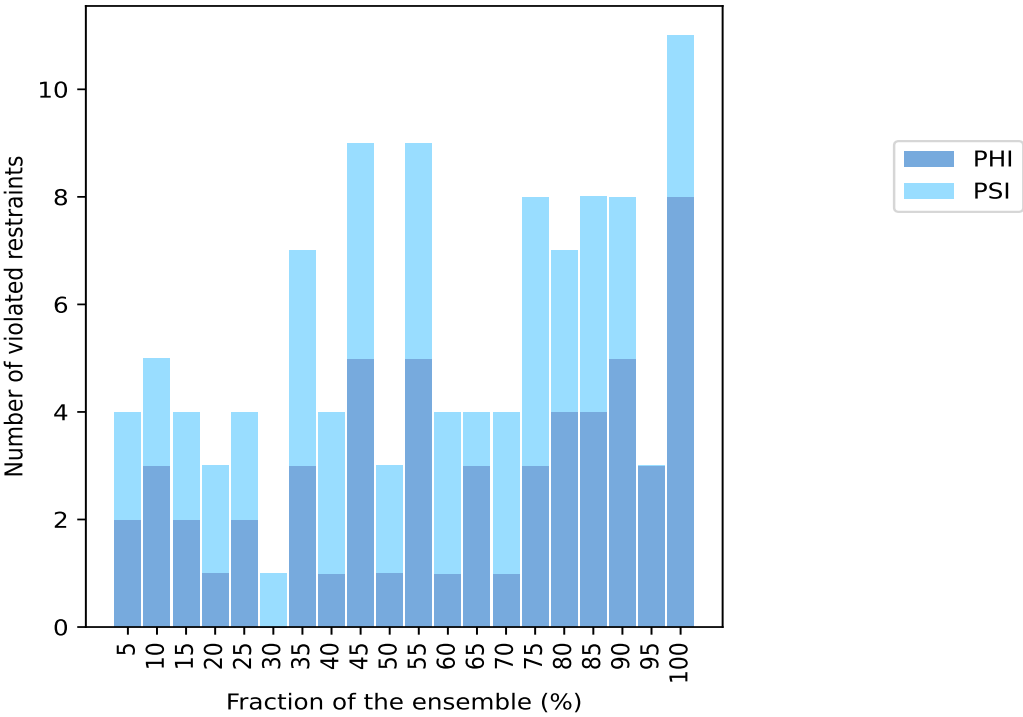
Continued on next page...

Continued from previous page...

Number of violated restraints			Fraction of the ensemble	
PHI	PSI	Total	Count ¹	%
1	3	4	12	60.0
3	1	4	13	65.0
1	3	4	14	70.0
3	5	8	15	75.0
4	3	7	16	80.0
4	4	8	17	85.0
5	3	8	18	90.0
3	0	3	19	95.0
8	3	11	20	100.0

¹ Number of models with violations

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

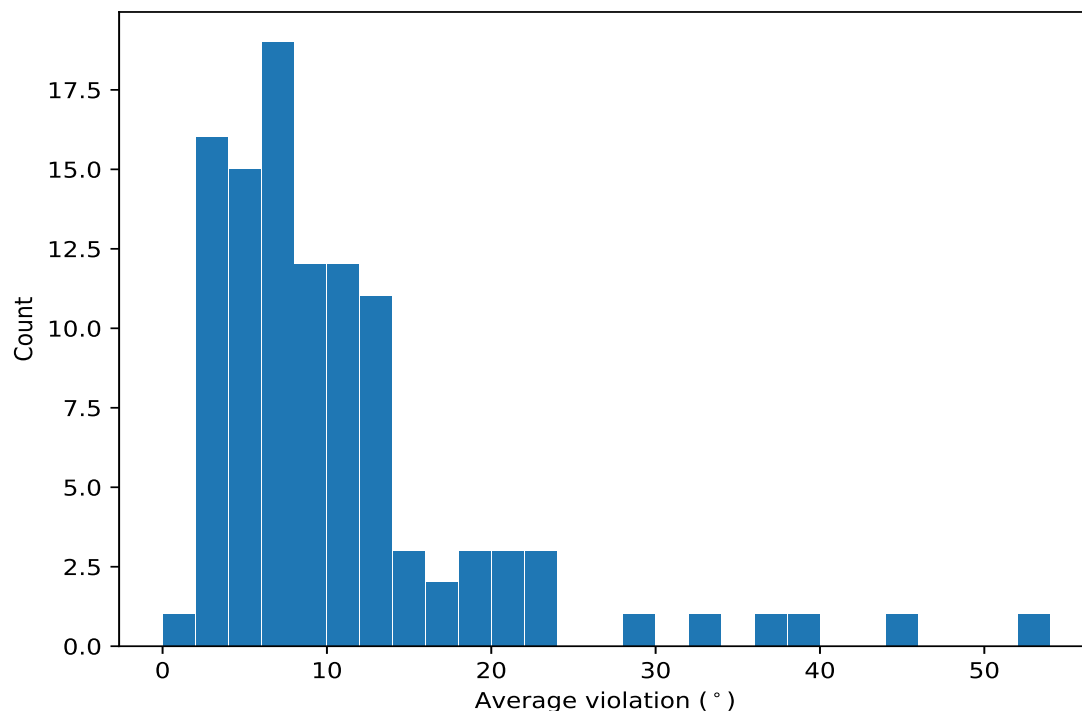


10.4 Most violated dihedral-angle restraints in the ensemble ⓘ

10.4.1 Histogram : Distribution of mean dihedral-angle violations ⓘ

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

in the ensemble



10.4.2 Table: Most violated dihedral-angle restraints [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
(1,37)	1:44:A:GLY:C	1:45:A:LEU:N	1:45:A:LEU:CA	1:45:A:LEU:C	20	52.51	2.9	52.06
(1,91)	1:40:A:LYS:N	1:40:A:LYS:CA	1:40:A:LYS:C	1:41:A:THR:N	20	45.89	15.57	48.8
(1,26)	1:29:A:LYS:C	1:30:A:LEU:N	1:30:A:LEU:CA	1:30:A:LEU:C	20	38.87	15.61	46.64
(1,16)	1:16:A:VAL:C	1:17:A:ASP:N	1:17:A:ASP:CA	1:17:A:ASP:C	20	37.89	7.25	39.25
(1,41)	1:48:A:GLU:C	1:49:A:LYS:N	1:49:A:LYS:CA	1:49:A:LYS:C	20	20.35	11.6	17.18
(1,3)	1:3:A:VAL:C	1:4:A:LYS:N	1:4:A:LYS:CA	1:4:A:LYS:C	20	19.61	7.56	22.85
(1,23)	1:23:A:HIS:C	1:24:A:VAL:N	1:24:A:VAL:CA	1:24:A:VAL:C	20	13.71	6.32	15.18
(1,110)	1:61:A:ARG:N	1:61:A:ARG:CA	1:61:A:ARG:C	1:62:A:ALA:N	20	11.16	4.01	11.66
(1,97)	1:48:A:GLU:N	1:48:A:GLU:CA	1:48:A:GLU:C	1:49:A:LYS:N	20	9.87	5.47	8.85
(1,46)	1:53:A:LYS:C	1:54:A:GLU:N	1:54:A:GLU:CA	1:54:A:GLU:C	20	9.45	5.54	8.63
(1,51)	1:58:A:MET:C	1:59:A:LEU:N	1:59:A:LEU:CA	1:59:A:LEU:C	20	6.47	2.73	6.6
(1,18)	1:18:A:THR:C	1:19:A:SER:N	1:19:A:SER:CA	1:19:A:SER:C	19	23.68	16.15	26.45
(1,54)	1:61:A:ARG:C	1:62:A:ALA:N	1:62:A:ALA:CA	1:62:A:ALA:C	19	13.41	5.29	15.43
(1,53)	1:60:A:ALA:C	1:61:A:ARG:N	1:61:A:ARG:CA	1:61:A:ARG:C	19	13.24	4.34	13.35
(1,31)	1:34:A:TYR:C	1:35:A:TYR:N	1:35:A:TYR:CA	1:35:A:TYR:C	18	29.25	14.77	32.42
(1,114)	1:65:A:GLU:N	1:65:A:GLU:CA	1:65:A:GLU:C	1:66:A:LYS:N	18	15.48	8.36	14.8
(1,2)	1:2:A:PRO:C	1:3:A:VAL:N	1:3:A:VAL:CA	1:3:A:VAL:C	18	14.85	8.12	12.81
(1,70)	1:14:A:LYS:N	1:14:A:LYS:CA	1:14:A:LYS:C	1:15:A:GLU:N	18	13.61	7.87	12.93
(1,14)	1:14:A:LYS:C	1:15:A:GLU:N	1:15:A:GLU:CA	1:15:A:GLU:C	18	11.33	5.16	12.16
(1,69)	1:13:A:GLU:N	1:13:A:GLU:CA	1:13:A:GLU:C	1:14:A:LYS:N	18	10.04	5.57	8.72

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Models ¹	Mean	SD ²	Median
(1,38)	1:45:A:LEU:C	1:46:A:VAL:N	1:46:A:VAL:CA	1:46:A:VAL:C	18	8.37	5.3	7.72
(1,29)	1:32:A:VAL:C	1:33:A:PHE:N	1:33:A:PHE:CA	1:33:A:PHE:C	18	5.5	2.19	4.71
(1,32)	1:35:A:TYR:C	1:36:A:ASP:N	1:36:A:ASP:CA	1:36:A:ASP:C	17	23.1	8.6	26.08
(1,27)	1:30:A:LEU:C	1:31:A:VAL:N	1:31:A:VAL:CA	1:31:A:VAL:C	17	17.69	4.0	17.32
(1,4)	1:4:A:LYS:C	1:5:A:VAL:N	1:5:A:VAL:CA	1:5:A:VAL:C	17	17.58	4.89	17.74
(1,99)	1:50:A:ASP:N	1:50:A:ASP:CA	1:50:A:ASP:C	1:51:A:ALA:N	17	11.77	5.31	12.52
(1,74)	1:18:A:THR:N	1:18:A:THR:CA	1:18:A:THR:C	1:19:A:SER:N	17	9.89	8.02	9.31
(1,55)	1:62:A:ALA:C	1:63:A:GLU:N	1:63:A:GLU:CA	1:63:A:GLU:C	17	5.76	3.59	4.66
(1,102)	1:53:A:LYS:N	1:53:A:LYS:CA	1:53:A:LYS:C	1:54:A:GLU:N	17	4.75	2.08	4.58
(1,109)	1:60:A:ALA:N	1:60:A:ALA:CA	1:60:A:ALA:C	1:61:A:ARG:N	17	4.39	2.84	4.31
(1,5)	1:5:A:VAL:C	1:6:A:LYS:N	1:6:A:LYS:CA	1:6:A:LYS:C	16	21.36	5.12	21.79
(1,67)	1:11:A:GLY:N	1:11:A:GLY:CA	1:11:A:GLY:C	1:12:A:GLU:N	16	11.48	6.44	11.21
(1,56)	1:63:A:GLU:C	1:64:A:ARG:N	1:64:A:ARG:CA	1:64:A:ARG:C	16	11.18	4.7	10.59
(1,10)	1:10:A:LYS:C	1:11:A:GLY:N	1:11:A:GLY:CA	1:11:A:GLY:C	16	10.22	5.42	8.88
(1,60)	1:4:A:LYS:N	1:4:A:LYS:CA	1:4:A:LYS:C	1:5:A:VAL:N	16	7.34	3.41	8.18
(1,61)	1:5:A:VAL:N	1:5:A:VAL:CA	1:5:A:VAL:C	1:6:A:LYS:N	16	6.34	3.88	5.77
(1,40)	1:47:A:PRO:C	1:48:A:GLU:N	1:48:A:GLU:CA	1:48:A:GLU:C	16	4.95	2.93	4.88
(1,87)	1:34:A:TYR:N	1:34:A:TYR:CA	1:34:A:TYR:C	1:35:A:TYR:N	15	18.64	10.52	18.07
(1,71)	1:15:A:GLU:N	1:15:A:GLU:CA	1:15:A:GLU:C	1:16:A:VAL:N	15	12.15	3.79	12.42
(1,43)	1:50:A:ASP:C	1:51:A:ALA:N	1:51:A:ALA:CA	1:51:A:ALA:C	15	10.21	6.42	10.42
(1,77)	1:21:A:ILE:N	1:21:A:ILE:CA	1:21:A:ILE:C	1:22:A:THR:N	15	8.12	5.04	6.98
(1,73)	1:17:A:ASP:N	1:17:A:ASP:CA	1:17:A:ASP:C	1:18:A:THR:N	15	8.0	4.14	8.09
(1,42)	1:49:A:LYS:C	1:50:A:ASP:N	1:50:A:ASP:CA	1:50:A:ASP:C	15	7.98	5.57	5.8
(1,50)	1:57:A:ASP:C	1:58:A:MET:N	1:58:A:MET:CA	1:58:A:MET:C	15	4.67	2.49	4.16
(1,72)	1:16:A:VAL:N	1:16:A:VAL:CA	1:16:A:VAL:C	1:17:A:ASP:N	15	4.63	2.52	4.4
(1,58)	1:2:A:PRO:N	1:2:A:PRO:CA	1:2:A:PRO:C	1:3:A:VAL:N	14	7.01	5.03	5.56
(1,85)	1:32:A:VAL:N	1:32:A:VAL:CA	1:32:A:VAL:C	1:33:A:PHE:N	14	6.35	1.96	5.96
(1,112)	1:63:A:GLU:N	1:63:A:GLU:CA	1:63:A:GLU:C	1:64:A:ARG:N	14	6.24	4.81	3.58
(1,48)	1:55:A:LEU:C	1:56:A:LEU:N	1:56:A:LEU:CA	1:56:A:LEU:C	14	3.48	1.83	3.44
(1,75)	1:19:A:SER:N	1:19:A:SER:CA	1:19:A:SER:C	1:20:A:LYS:N	13	15.32	9.31	14.36
(1,7)	1:7:A:PHE:C	1:8:A:LYS:N	1:8:A:LYS:CA	1:8:A:LYS:C	13	13.34	5.82	15.33
(1,20)	1:20:A:LYS:C	1:21:A:ILE:N	1:21:A:ILE:CA	1:21:A:ILE:C	13	12.72	9.88	11.9
(1,21)	1:21:A:ILE:C	1:22:A:THR:N	1:22:A:THR:CA	1:22:A:THR:C	13	12.22	7.48	11.66
(1,68)	1:12:A:GLU:N	1:12:A:GLU:CA	1:12:A:GLU:C	1:13:A:GLU:N	12	21.59	16.42	22.02
(1,90)	1:38:A:ASN:N	1:38:A:ASN:CA	1:38:A:ASN:C	1:39:A:GLY:N	12	6.52	4.4	5.58
(1,9)	1:9:A:TYR:C	1:10:A:LYS:N	1:10:A:LYS:CA	1:10:A:LYS:C	12	5.75	3.85	5.36
(1,84)	1:31:A:VAL:N	1:31:A:VAL:CA	1:31:A:VAL:C	1:32:A:VAL:N	12	4.43	3.63	2.68
(1,35)	1:40:A:LYS:C	1:41:A:THR:N	1:41:A:THR:CA	1:41:A:THR:C	11	12.45	9.89	11.63
(1,83)	1:30:A:LEU:N	1:30:A:LEU:CA	1:30:A:LEU:C	1:31:A:VAL:N	11	11.81	7.35	11.75
(1,28)	1:31:A:VAL:C	1:32:A:VAL:N	1:32:A:VAL:CA	1:32:A:VAL:C	11	11.43	7.04	10.13
(1,8)	1:8:A:LYS:C	1:9:A:TYR:N	1:9:A:TYR:CA	1:9:A:TYR:C	11	10.93	3.97	11.91
(1,113)	1:64:A:ARG:N	1:64:A:ARG:CA	1:64:A:ARG:C	1:65:A:GLU:N	11	7.86	3.6	7.59
(1,89)	1:36:A:ASP:N	1:36:A:ASP:CA	1:36:A:ASP:C	1:37:A:ASP:N	11	7.63	3.3	7.35
(1,15)	1:15:A:GLU:C	1:16:A:VAL:N	1:16:A:VAL:CA	1:16:A:VAL:C	11	7.31	3.26	8.24
(1,65)	1:9:A:TYR:N	1:9:A:TYR:CA	1:9:A:TYR:C	1:10:A:LYS:N	11	6.89	3.74	6.74
(1,22)	1:22:A:THR:C	1:23:A:HIS:N	1:23:A:HIS:CA	1:23:A:HIS:C	11	6.73	3.28	5.63
(1,36)	1:42:A:GLY:C	1:43:A:HIS:N	1:43:A:HIS:CA	1:43:A:HIS:C	10	13.12	9.24	10.82
(1,78)	1:22:A:THR:N	1:22:A:THR:CA	1:22:A:THR:C	1:23:A:HIS:N	10	6.88	4.67	5.47
(1,106)	1:57:A:ASP:N	1:57:A:ASP:CA	1:57:A:ASP:C	1:58:A:MET:N	10	3.73	1.02	3.58
(1,13)	1:13:A:GLU:C	1:14:A:LYS:N	1:14:A:LYS:CA	1:14:A:LYS:C	9	9.89	7.75	6.07
(1,34)	1:39:A:GLY:C	1:40:A:LYS:N	1:40:A:LYS:CA	1:40:A:LYS:C	9	9.31	6.1	9.61

Continued on next page...

Continued from previous page...

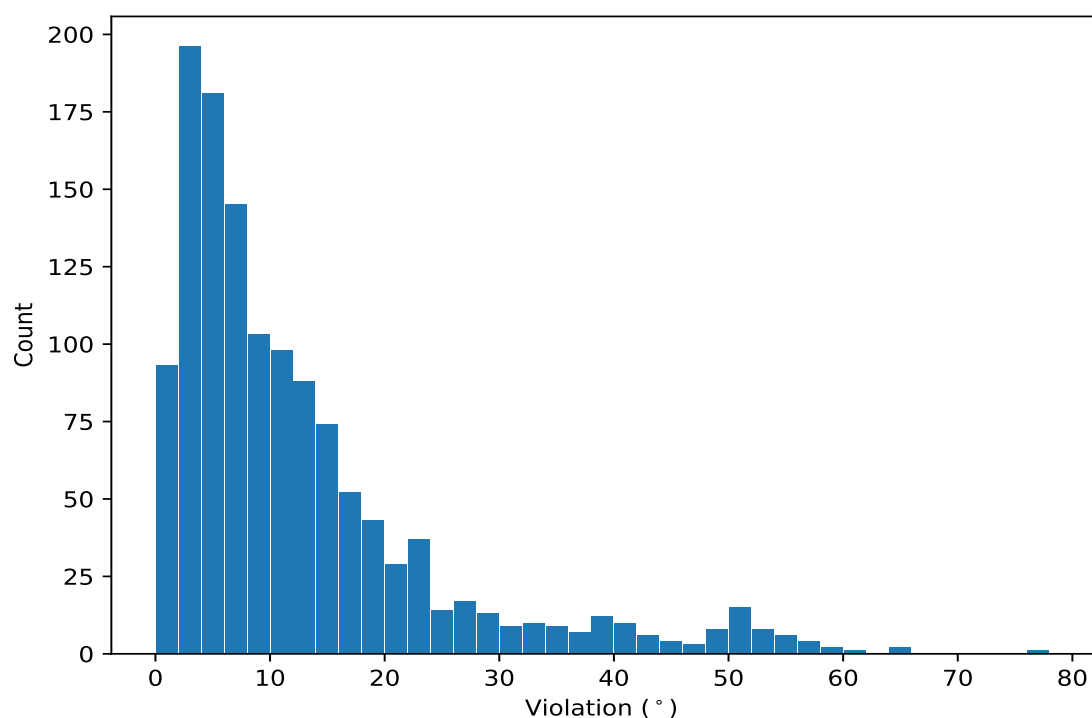
Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Models ¹	Mean	SD ²	Median
(1,66)	1:10:A:LYS:N	1:10:A:LYS:CA	1:10:A:LYS:C	1:11:A:GLY:N	9	8.6	7.96	4.89
(1,11)	1:11:A:GLY:C	1:12:A:GLU:N	1:12:A:GLU:CA	1:12:A:GLU:C	9	8.39	3.22	8.5
(1,63)	1:7:A:PHE:N	1:7:A:PHE:CA	1:7:A:PHE:C	1:8:A:LYS:N	9	6.65	3.0	6.49
(1,6)	1:6:A:LYS:C	1:7:A:PHE:N	1:7:A:PHE:CA	1:7:A:PHE:C	9	5.04	1.71	5.87
(1,33)	1:37:A:ASP:C	1:38:A:ASN:N	1:38:A:ASN:CA	1:38:A:ASN:C	9	4.39	1.69	4.51
(1,107)	1:58:A:MET:N	1:58:A:MET:CA	1:58:A:MET:C	1:59:A:LEU:N	9	3.73	1.89	3.17
(1,108)	1:59:A:LEU:N	1:59:A:LEU:CA	1:59:A:LEU:C	1:60:A:ALA:N	9	2.78	1.28	2.24
(1,93)	1:43:A:HIS:N	1:43:A:HIS:CA	1:43:A:HIS:C	1:44:A:GLY:N	8	6.34	2.84	5.53
(1,64)	1:8:A:LYS:N	1:8:A:LYS:CA	1:8:A:LYS:C	1:9:A:TYR:N	8	5.06	2.75	4.74
(1,1)	1:1:A:GLY:C	1:2:A:PRO:N	1:2:A:PRO:CA	1:2:A:PRO:C	8	4.99	3.49	4.04
(1,95)	1:46:A:VAL:N	1:46:A:VAL:CA	1:46:A:VAL:C	1:47:A:PRO:N	8	3.3	0.72	3.56
(1,12)	1:12:A:GLU:C	1:13:A:GLU:N	1:13:A:GLU:CA	1:13:A:GLU:C	7	32.4	15.09	42.58
(1,88)	1:35:A:TYR:N	1:35:A:TYR:CA	1:35:A:TYR:C	1:36:A:ASP:N	7	18.03	7.93	22.51
(1,76)	1:20:A:LYS:N	1:20:A:LYS:CA	1:20:A:LYS:C	1:21:A:ILE:N	7	8.28	8.03	3.26
(1,19)	1:19:A:SER:C	1:20:A:LYS:N	1:20:A:LYS:CA	1:20:A:LYS:C	7	7.79	6.26	6.43
(1,103)	1:54:A:GLU:N	1:54:A:GLU:CA	1:54:A:GLU:C	1:55:A:LEU:N	7	5.94	3.31	7.06
(1,101)	1:52:A:PRO:N	1:52:A:PRO:CA	1:52:A:PRO:C	1:53:A:LYS:N	7	3.48	1.41	4.14
(1,39)	1:46:A:VAL:C	1:47:A:PRO:N	1:47:A:PRO:CA	1:47:A:PRO:C	7	3.18	1.58	3.34
(1,105)	1:56:A:LEU:N	1:56:A:LEU:CA	1:56:A:LEU:C	1:57:A:ASP:N	6	3.2	2.05	2.42
(1,98)	1:49:A:LYS:N	1:49:A:LYS:CA	1:49:A:LYS:C	1:50:A:ASP:N	5	12.0	7.04	9.0
(1,25)	1:25:A:PHE:C	1:26:A:ARG:N	1:26:A:ARG:CA	1:26:A:ARG:C	5	9.82	2.88	10.45
(1,111)	1:62:A:ALA:N	1:62:A:ALA:CA	1:62:A:ALA:C	1:63:A:GLU:N	5	3.62	1.56	3.4
(1,49)	1:56:A:LEU:C	1:57:A:ASP:N	1:57:A:ASP:CA	1:57:A:ASP:C	5	3.1	1.54	2.7
(1,81)	1:25:A:PHE:N	1:25:A:PHE:CA	1:25:A:PHE:C	1:26:A:ARG:N	4	10.48	2.53	10.55
(1,17)	1:17:A:ASP:C	1:18:A:THR:N	1:18:A:THR:CA	1:18:A:THR:C	4	4.71	3.34	3.73
(1,59)	1:3:A:VAL:N	1:3:A:VAL:CA	1:3:A:VAL:C	1:4:A:LYS:N	4	2.39	0.92	2.17
(1,92)	1:41:A:THR:N	1:41:A:THR:CA	1:41:A:THR:C	1:42:A:GLY:N	3	22.93	25.8	4.84
(1,82)	1:26:A:ARG:N	1:26:A:ARG:CA	1:26:A:ARG:C	1:27:A:HIS:N	3	7.77	2.17	8.71
(1,45)	1:52:A:PRO:C	1:53:A:LYS:N	1:53:A:LYS:CA	1:53:A:LYS:C	3	2.56	1.65	1.79
(1,47)	1:54:A:GLU:C	1:55:A:LEU:N	1:55:A:LEU:CA	1:55:A:LEU:C	3	2.31	0.46	2.09
(1,57)	1:64:A:ARG:C	1:65:A:GLU:N	1:65:A:GLU:CA	1:65:A:GLU:C	2	6.34	1.28	6.34
(1,44)	1:51:A:ALA:C	1:52:A:PRO:N	1:52:A:PRO:CA	1:52:A:PRO:C	2	3.64	1.98	3.64
(1,80)	1:24:A:VAL:N	1:24:A:VAL:CA	1:24:A:VAL:C	1:25:A:PHE:N	2	3.17	1.32	3.17
(1,24)	1:24:A:VAL:C	1:25:A:PHE:N	1:25:A:PHE:CA	1:25:A:PHE:C	2	2.55	0.47	2.55
(1,96)	1:47:A:PRO:N	1:47:A:PRO:CA	1:47:A:PRO:C	1:48:A:GLU:N	2	1.3	0.26	1.3

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 (°)
(1,91)	1:40:A:LYS:N	1:40:A:LYS:CA	1:40:A:LYS:C	1:41:A:THR:N	16	76.48
(1,91)	1:40:A:LYS:N	1:40:A:LYS:CA	1:40:A:LYS:C	1:41:A:THR:N	18	64.08
(1,91)	1:40:A:LYS:N	1:40:A:LYS:CA	1:40:A:LYS:C	1:41:A:THR:N	12	64.04
(1,91)	1:40:A:LYS:N	1:40:A:LYS:CA	1:40:A:LYS:C	1:41:A:THR:N	9	60.67
(1,92)	1:41:A:THR:N	1:41:A:THR:CA	1:41:A:THR:C	1:42:A:GLY:N	2	59.41
(1,37)	1:44:A:GLY:C	1:45:A:LEU:N	1:45:A:LEU:CA	1:45:A:LEU:C	16	58.38
(1,91)	1:40:A:LYS:N	1:40:A:LYS:CA	1:40:A:LYS:C	1:41:A:THR:N	3	57.67
(1,91)	1:40:A:LYS:N	1:40:A:LYS:CA	1:40:A:LYS:C	1:41:A:THR:N	11	57.05
(1,37)	1:44:A:GLY:C	1:45:A:LEU:N	1:45:A:LEU:CA	1:45:A:LEU:C	15	57.05
(1,37)	1:44:A:GLY:C	1:45:A:LEU:N	1:45:A:LEU:CA	1:45:A:LEU:C	6	56.48
(1,26)	1:29:A:LYS:C	1:30:A:LEU:N	1:30:A:LEU:CA	1:30:A:LEU:C	1	55.62
(1,37)	1:44:A:GLY:C	1:45:A:LEU:N	1:45:A:LEU:CA	1:45:A:LEU:C	7	55.51
(1,37)	1:44:A:GLY:C	1:45:A:LEU:N	1:45:A:LEU:CA	1:45:A:LEU:C	3	55.26
(1,91)	1:40:A:LYS:N	1:40:A:LYS:CA	1:40:A:LYS:C	1:41:A:THR:N	17	55.21
(1,37)	1:44:A:GLY:C	1:45:A:LEU:N	1:45:A:LEU:CA	1:45:A:LEU:C	19	54.61
(1,26)	1:29:A:LYS:C	1:30:A:LEU:N	1:30:A:LEU:CA	1:30:A:LEU:C	2	54.05
(1,37)	1:44:A:GLY:C	1:45:A:LEU:N	1:45:A:LEU:CA	1:45:A:LEU:C	18	53.95
(1,26)	1:29:A:LYS:C	1:30:A:LEU:N	1:30:A:LEU:CA	1:30:A:LEU:C	6	53.44
(1,31)	1:34:A:TYR:C	1:35:A:TYR:N	1:35:A:TYR:CA	1:35:A:TYR:C	17	53.41
(1,37)	1:44:A:GLY:C	1:45:A:LEU:N	1:45:A:LEU:CA	1:45:A:LEU:C	8	53.16
(1,37)	1:44:A:GLY:C	1:45:A:LEU:N	1:45:A:LEU:CA	1:45:A:LEU:C	9	53.05

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,37)	1:44:A:GLY:C	1:45:A:LEU:N	1:45:A:LEU:CA	1:45:A:LEU:C	5	52.87
(1,26)	1:29:A:LYS:C	1:30:A:LEU:N	1:30:A:LEU:CA	1:30:A:LEU:C	7	52.66
(1,26)	1:29:A:LYS:C	1:30:A:LEU:N	1:30:A:LEU:CA	1:30:A:LEU:C	9	52.37
(1,18)	1:18:A:THR:C	1:19:A:SER:N	1:19:A:SER:CA	1:19:A:SER:C	11	51.94
(1,91)	1:40:A:LYS:N	1:40:A:LYS:CA	1:40:A:LYS:C	1:41:A:THR:N	5	51.69
(1,37)	1:44:A:GLY:C	1:45:A:LEU:N	1:45:A:LEU:CA	1:45:A:LEU:C	10	51.24
(1,26)	1:29:A:LYS:C	1:30:A:LEU:N	1:30:A:LEU:CA	1:30:A:LEU:C	11	50.8
(1,31)	1:34:A:TYR:C	1:35:A:TYR:N	1:35:A:TYR:CA	1:35:A:TYR:C	3	50.73
(1,26)	1:29:A:LYS:C	1:30:A:LEU:N	1:30:A:LEU:CA	1:30:A:LEU:C	16	50.71
(1,37)	1:44:A:GLY:C	1:45:A:LEU:N	1:45:A:LEU:CA	1:45:A:LEU:C	1	50.69
(1,91)	1:40:A:LYS:N	1:40:A:LYS:CA	1:40:A:LYS:C	1:41:A:THR:N	6	50.68
(1,16)	1:16:A:VAL:C	1:17:A:ASP:N	1:17:A:ASP:CA	1:17:A:ASP:C	7	50.56
(1,37)	1:44:A:GLY:C	1:45:A:LEU:N	1:45:A:LEU:CA	1:45:A:LEU:C	20	50.54
(1,37)	1:44:A:GLY:C	1:45:A:LEU:N	1:45:A:LEU:CA	1:45:A:LEU:C	4	50.48
(1,37)	1:44:A:GLY:C	1:45:A:LEU:N	1:45:A:LEU:CA	1:45:A:LEU:C	2	50.47
(1,37)	1:44:A:GLY:C	1:45:A:LEU:N	1:45:A:LEU:CA	1:45:A:LEU:C	11	50.37
(1,91)	1:40:A:LYS:N	1:40:A:LYS:CA	1:40:A:LYS:C	1:41:A:THR:N	13	50.34
(1,26)	1:29:A:LYS:C	1:30:A:LEU:N	1:30:A:LEU:CA	1:30:A:LEU:C	20	50.31
(1,37)	1:44:A:GLY:C	1:45:A:LEU:N	1:45:A:LEU:CA	1:45:A:LEU:C	13	49.96
(1,37)	1:44:A:GLY:C	1:45:A:LEU:N	1:45:A:LEU:CA	1:45:A:LEU:C	14	49.9
(1,41)	1:48:A:GLU:C	1:49:A:LYS:N	1:49:A:LYS:CA	1:49:A:LYS:C	12	49.78
(1,12)	1:12:A:GLU:C	1:13:A:GLU:N	1:13:A:GLU:CA	1:13:A:GLU:C	1	49.74
(1,16)	1:16:A:VAL:C	1:17:A:ASP:N	1:17:A:ASP:CA	1:17:A:ASP:C	2	49.23
(1,37)	1:44:A:GLY:C	1:45:A:LEU:N	1:45:A:LEU:CA	1:45:A:LEU:C	12	48.12
(1,37)	1:44:A:GLY:C	1:45:A:LEU:N	1:45:A:LEU:CA	1:45:A:LEU:C	17	48.09
(1,26)	1:29:A:LYS:C	1:30:A:LEU:N	1:30:A:LEU:CA	1:30:A:LEU:C	18	48.05
(1,91)	1:40:A:LYS:N	1:40:A:LYS:CA	1:40:A:LYS:C	1:41:A:THR:N	15	47.25
(1,26)	1:29:A:LYS:C	1:30:A:LEU:N	1:30:A:LEU:CA	1:30:A:LEU:C	19	47.15
(1,26)	1:29:A:LYS:C	1:30:A:LEU:N	1:30:A:LEU:CA	1:30:A:LEU:C	13	46.12
(1,16)	1:16:A:VAL:C	1:17:A:ASP:N	1:17:A:ASP:CA	1:17:A:ASP:C	9	45.87
(1,91)	1:40:A:LYS:N	1:40:A:LYS:CA	1:40:A:LYS:C	1:41:A:THR:N	20	45.65
(1,12)	1:12:A:GLU:C	1:13:A:GLU:N	1:13:A:GLU:CA	1:13:A:GLU:C	12	44.52
(1,12)	1:12:A:GLU:C	1:13:A:GLU:N	1:13:A:GLU:CA	1:13:A:GLU:C	19	44.39
(1,18)	1:18:A:THR:C	1:19:A:SER:N	1:19:A:SER:CA	1:19:A:SER:C	17	43.34
(1,31)	1:34:A:TYR:C	1:35:A:TYR:N	1:35:A:TYR:CA	1:35:A:TYR:C	9	42.86
(1,68)	1:12:A:GLU:N	1:12:A:GLU:CA	1:12:A:GLU:C	1:13:A:GLU:N	1	42.78
(1,12)	1:12:A:GLU:C	1:13:A:GLU:N	1:13:A:GLU:CA	1:13:A:GLU:C	13	42.58
(1,68)	1:12:A:GLU:N	1:12:A:GLU:CA	1:12:A:GLU:C	1:13:A:GLU:N	12	42.52
(1,91)	1:40:A:LYS:N	1:40:A:LYS:CA	1:40:A:LYS:C	1:41:A:THR:N	1	42.14
(1,31)	1:34:A:TYR:C	1:35:A:TYR:N	1:35:A:TYR:CA	1:35:A:TYR:C	14	41.86
(1,18)	1:18:A:THR:C	1:19:A:SER:N	1:19:A:SER:CA	1:19:A:SER:C	5	41.8
(1,16)	1:16:A:VAL:C	1:17:A:ASP:N	1:17:A:ASP:CA	1:17:A:ASP:C	8	41.49
(1,16)	1:16:A:VAL:C	1:17:A:ASP:N	1:17:A:ASP:CA	1:17:A:ASP:C	1	41.33
(1,26)	1:29:A:LYS:C	1:30:A:LEU:N	1:30:A:LEU:CA	1:30:A:LEU:C	4	41.29
(1,20)	1:20:A:LYS:C	1:21:A:ILE:N	1:21:A:ILE:CA	1:21:A:ILE:C	7	40.92
(1,91)	1:40:A:LYS:N	1:40:A:LYS:CA	1:40:A:LYS:C	1:41:A:THR:N	19	40.85
(1,16)	1:16:A:VAL:C	1:17:A:ASP:N	1:17:A:ASP:CA	1:17:A:ASP:C	13	40.76
(1,41)	1:48:A:GLU:C	1:49:A:LYS:N	1:49:A:LYS:CA	1:49:A:LYS:C	7	40.58
(1,16)	1:16:A:VAL:C	1:17:A:ASP:N	1:17:A:ASP:CA	1:17:A:ASP:C	10	40.29
(1,16)	1:16:A:VAL:C	1:17:A:ASP:N	1:17:A:ASP:CA	1:17:A:ASP:C	4	39.89
(1,16)	1:16:A:VAL:C	1:17:A:ASP:N	1:17:A:ASP:CA	1:17:A:ASP:C	20	39.73

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,31)	1:34:A:TYR:C	1:35:A:TYR:N	1:35:A:TYR:CA	1:35:A:TYR:C	13	39.66
(1,16)	1:16:A:VAL:C	1:17:A:ASP:N	1:17:A:ASP:CA	1:17:A:ASP:C	19	39.36
(1,74)	1:18:A:THR:N	1:18:A:THR:CA	1:18:A:THR:C	1:19:A:SER:N	1	39.18
(1,18)	1:18:A:THR:C	1:19:A:SER:N	1:19:A:SER:CA	1:19:A:SER:C	15	39.18
(1,68)	1:12:A:GLU:N	1:12:A:GLU:CA	1:12:A:GLU:C	1:13:A:GLU:N	19	39.14
(1,16)	1:16:A:VAL:C	1:17:A:ASP:N	1:17:A:ASP:CA	1:17:A:ASP:C	18	39.13
(1,18)	1:18:A:THR:C	1:19:A:SER:N	1:19:A:SER:CA	1:19:A:SER:C	3	39.07
(1,16)	1:16:A:VAL:C	1:17:A:ASP:N	1:17:A:ASP:CA	1:17:A:ASP:C	12	38.77
(1,31)	1:34:A:TYR:C	1:35:A:TYR:N	1:35:A:TYR:CA	1:35:A:TYR:C	2	38.38
(1,16)	1:16:A:VAL:C	1:17:A:ASP:N	1:17:A:ASP:CA	1:17:A:ASP:C	14	38.27
(1,31)	1:34:A:TYR:C	1:35:A:TYR:N	1:35:A:TYR:CA	1:35:A:TYR:C	8	37.35
(1,18)	1:18:A:THR:C	1:19:A:SER:N	1:19:A:SER:CA	1:19:A:SER:C	8	37.29
(1,16)	1:16:A:VAL:C	1:17:A:ASP:N	1:17:A:ASP:CA	1:17:A:ASP:C	16	37.2
(1,31)	1:34:A:TYR:C	1:35:A:TYR:N	1:35:A:TYR:CA	1:35:A:TYR:C	20	37.19
(1,87)	1:34:A:TYR:N	1:34:A:TYR:CA	1:34:A:TYR:C	1:35:A:TYR:N	3	36.4
(1,31)	1:34:A:TYR:C	1:35:A:TYR:N	1:35:A:TYR:CA	1:35:A:TYR:C	11	36.37
(1,87)	1:34:A:TYR:N	1:34:A:TYR:CA	1:34:A:TYR:C	1:35:A:TYR:N	17	36.32
(1,68)	1:12:A:GLU:N	1:12:A:GLU:CA	1:12:A:GLU:C	1:13:A:GLU:N	13	35.84
(1,16)	1:16:A:VAL:C	1:17:A:ASP:N	1:17:A:ASP:CA	1:17:A:ASP:C	15	35.48
(1,18)	1:18:A:THR:C	1:19:A:SER:N	1:19:A:SER:CA	1:19:A:SER:C	1	34.68
(1,18)	1:18:A:THR:C	1:19:A:SER:N	1:19:A:SER:CA	1:19:A:SER:C	18	34.48
(1,16)	1:16:A:VAL:C	1:17:A:ASP:N	1:17:A:ASP:CA	1:17:A:ASP:C	6	34.37
(1,91)	1:40:A:LYS:N	1:40:A:LYS:CA	1:40:A:LYS:C	1:41:A:THR:N	14	34.2
(1,16)	1:16:A:VAL:C	1:17:A:ASP:N	1:17:A:ASP:CA	1:17:A:ASP:C	17	34.16
(1,26)	1:29:A:LYS:C	1:30:A:LEU:N	1:30:A:LEU:CA	1:30:A:LEU:C	12	34.09
(1,36)	1:42:A:GLY:C	1:43:A:HIS:N	1:43:A:HIS:CA	1:43:A:HIS:C	2	34.06
(1,70)	1:14:A:LYS:N	1:14:A:LYS:CA	1:14:A:LYS:C	1:15:A:GLU:N	9	33.8
(1,2)	1:2:A:PRO:C	1:3:A:VAL:N	1:3:A:VAL:CA	1:3:A:VAL:C	17	33.8
(1,26)	1:29:A:LYS:C	1:30:A:LEU:N	1:30:A:LEU:CA	1:30:A:LEU:C	5	33.69
(1,18)	1:18:A:THR:C	1:19:A:SER:N	1:19:A:SER:CA	1:19:A:SER:C	2	33.63
(1,32)	1:35:A:TYR:C	1:36:A:ASP:N	1:36:A:ASP:CA	1:36:A:ASP:C	2	32.83
(1,41)	1:48:A:GLU:C	1:49:A:LYS:N	1:49:A:LYS:CA	1:49:A:LYS:C	20	32.82
(1,68)	1:12:A:GLU:N	1:12:A:GLU:CA	1:12:A:GLU:C	1:13:A:GLU:N	15	32.78
(1,32)	1:35:A:TYR:C	1:36:A:ASP:N	1:36:A:ASP:CA	1:36:A:ASP:C	12	32.31
(1,68)	1:12:A:GLU:N	1:12:A:GLU:CA	1:12:A:GLU:C	1:13:A:GLU:N	2	32.04
(1,75)	1:19:A:SER:N	1:19:A:SER:CA	1:19:A:SER:C	1:20:A:LYS:N	11	32.02
(1,32)	1:35:A:TYR:C	1:36:A:ASP:N	1:36:A:ASP:CA	1:36:A:ASP:C	15	31.35
(1,32)	1:35:A:TYR:C	1:36:A:ASP:N	1:36:A:ASP:CA	1:36:A:ASP:C	11	31.17
(1,3)	1:3:A:VAL:C	1:4:A:LYS:N	1:4:A:LYS:CA	1:4:A:LYS:C	13	31.03
(1,35)	1:40:A:LYS:C	1:41:A:THR:N	1:41:A:THR:CA	1:41:A:THR:C	4	30.89
(1,87)	1:34:A:TYR:N	1:34:A:TYR:CA	1:34:A:TYR:C	1:35:A:TYR:N	9	30.75
(1,114)	1:65:A:GLU:N	1:65:A:GLU:CA	1:65:A:GLU:C	1:66:A:LYS:N	8	30.6
(1,26)	1:29:A:LYS:C	1:30:A:LEU:N	1:30:A:LEU:CA	1:30:A:LEU:C	3	30.54
(1,83)	1:30:A:LEU:N	1:30:A:LEU:CA	1:30:A:LEU:C	1:31:A:VAL:N	17	30.49
(1,41)	1:48:A:GLU:C	1:49:A:LYS:N	1:49:A:LYS:CA	1:49:A:LYS:C	8	30.15
(1,87)	1:34:A:TYR:N	1:34:A:TYR:CA	1:34:A:TYR:C	1:35:A:TYR:N	13	29.18
(1,16)	1:16:A:VAL:C	1:17:A:ASP:N	1:17:A:ASP:CA	1:17:A:ASP:C	5	28.62
(1,67)	1:11:A:GLY:N	1:11:A:GLY:CA	1:11:A:GLY:C	1:12:A:GLU:N	6	28.47
(1,31)	1:34:A:TYR:C	1:35:A:TYR:N	1:35:A:TYR:CA	1:35:A:TYR:C	18	28.46
(1,32)	1:35:A:TYR:C	1:36:A:ASP:N	1:36:A:ASP:CA	1:36:A:ASP:C	5	28.34
(1,5)	1:5:A:VAL:C	1:6:A:LYS:N	1:6:A:LYS:CA	1:6:A:LYS:C	15	28.27

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,114)	1:65:A:GLU:N	1:65:A:GLU:CA	1:65:A:GLU:C	1:66:A:LYS:N	3	28.25
(1,32)	1:35:A:TYR:C	1:36:A:ASP:N	1:36:A:ASP:CA	1:36:A:ASP:C	13	28.23
(1,31)	1:34:A:TYR:C	1:35:A:TYR:N	1:35:A:TYR:CA	1:35:A:TYR:C	12	28.19
(1,3)	1:3:A:VAL:C	1:4:A:LYS:N	1:4:A:LYS:CA	1:4:A:LYS:C	18	28.17
(1,41)	1:48:A:GLU:C	1:49:A:LYS:N	1:49:A:LYS:CA	1:49:A:LYS:C	14	28.09
(1,91)	1:40:A:LYS:N	1:40:A:LYS:CA	1:40:A:LYS:C	1:41:A:THR:N	4	28.08
(1,5)	1:5:A:VAL:C	1:6:A:LYS:N	1:6:A:LYS:CA	1:6:A:LYS:C	11	28.08
(1,32)	1:35:A:TYR:C	1:36:A:ASP:N	1:36:A:ASP:CA	1:36:A:ASP:C	1	27.95
(1,2)	1:2:A:PRO:C	1:3:A:VAL:N	1:3:A:VAL:CA	1:3:A:VAL:C	3	27.86
(1,26)	1:29:A:LYS:C	1:30:A:LEU:N	1:30:A:LEU:CA	1:30:A:LEU:C	15	27.73
(1,3)	1:3:A:VAL:C	1:4:A:LYS:N	1:4:A:LYS:CA	1:4:A:LYS:C	15	27.59
(1,114)	1:65:A:GLU:N	1:65:A:GLU:CA	1:65:A:GLU:C	1:66:A:LYS:N	7	27.0
(1,66)	1:10:A:LYS:N	1:10:A:LYS:CA	1:10:A:LYS:C	1:11:A:GLY:N	2	26.88
(1,5)	1:5:A:VAL:C	1:6:A:LYS:N	1:6:A:LYS:CA	1:6:A:LYS:C	18	26.87
(1,18)	1:18:A:THR:C	1:19:A:SER:N	1:19:A:SER:CA	1:19:A:SER:C	16	26.45
(1,5)	1:5:A:VAL:C	1:6:A:LYS:N	1:6:A:LYS:CA	1:6:A:LYS:C	6	26.38
(1,88)	1:35:A:TYR:N	1:35:A:TYR:CA	1:35:A:TYR:C	1:36:A:ASP:N	7	26.33
(1,75)	1:19:A:SER:N	1:19:A:SER:CA	1:19:A:SER:C	1:20:A:LYS:N	15	26.24
(1,32)	1:35:A:TYR:C	1:36:A:ASP:N	1:36:A:ASP:CA	1:36:A:ASP:C	14	26.23
(1,41)	1:48:A:GLU:C	1:49:A:LYS:N	1:49:A:LYS:CA	1:49:A:LYS:C	16	26.19
(1,3)	1:3:A:VAL:C	1:4:A:LYS:N	1:4:A:LYS:CA	1:4:A:LYS:C	8	26.12
(1,32)	1:35:A:TYR:C	1:36:A:ASP:N	1:36:A:ASP:CA	1:36:A:ASP:C	17	26.08
(1,21)	1:21:A:ILE:C	1:22:A:THR:N	1:22:A:THR:CA	1:22:A:THR:C	13	26.06
(1,114)	1:65:A:GLU:N	1:65:A:GLU:CA	1:65:A:GLU:C	1:66:A:LYS:N	1	26.04
(1,27)	1:30:A:LEU:C	1:31:A:VAL:N	1:31:A:VAL:CA	1:31:A:VAL:C	17	25.7
(1,13)	1:13:A:GLU:C	1:14:A:LYS:N	1:14:A:LYS:CA	1:14:A:LYS:C	6	25.62
(1,5)	1:5:A:VAL:C	1:6:A:LYS:N	1:6:A:LYS:CA	1:6:A:LYS:C	17	25.6
(1,2)	1:2:A:PRO:C	1:3:A:VAL:N	1:3:A:VAL:CA	1:3:A:VAL:C	2	25.49
(1,36)	1:42:A:GLY:C	1:43:A:HIS:N	1:43:A:HIS:CA	1:43:A:HIS:C	16	25.44
(1,32)	1:35:A:TYR:C	1:36:A:ASP:N	1:36:A:ASP:CA	1:36:A:ASP:C	3	25.2
(1,70)	1:14:A:LYS:N	1:14:A:LYS:CA	1:14:A:LYS:C	1:15:A:GLU:N	17	25.18
(1,35)	1:40:A:LYS:C	1:41:A:THR:N	1:41:A:THR:CA	1:41:A:THR:C	7	24.86
(1,3)	1:3:A:VAL:C	1:4:A:LYS:N	1:4:A:LYS:CA	1:4:A:LYS:C	7	24.74
(1,91)	1:40:A:LYS:N	1:40:A:LYS:CA	1:40:A:LYS:C	1:41:A:THR:N	7	24.6
(1,87)	1:34:A:TYR:N	1:34:A:TYR:CA	1:34:A:TYR:C	1:35:A:TYR:N	11	24.43
(1,3)	1:3:A:VAL:C	1:4:A:LYS:N	1:4:A:LYS:CA	1:4:A:LYS:C	9	24.43
(1,5)	1:5:A:VAL:C	1:6:A:LYS:N	1:6:A:LYS:CA	1:6:A:LYS:C	4	24.37
(1,98)	1:49:A:LYS:N	1:49:A:LYS:CA	1:49:A:LYS:C	1:50:A:ASP:N	12	24.16
(1,88)	1:35:A:TYR:N	1:35:A:TYR:CA	1:35:A:TYR:C	1:36:A:ASP:N	2	23.84
(1,3)	1:3:A:VAL:C	1:4:A:LYS:N	1:4:A:LYS:CA	1:4:A:LYS:C	10	23.82
(1,76)	1:20:A:LYS:N	1:20:A:LYS:CA	1:20:A:LYS:C	1:21:A:ILE:N	7	23.81
(1,10)	1:10:A:LYS:C	1:11:A:GLY:N	1:11:A:GLY:CA	1:11:A:GLY:C	11	23.74
(1,75)	1:19:A:SER:N	1:19:A:SER:CA	1:19:A:SER:C	1:20:A:LYS:N	2	23.66
(1,41)	1:48:A:GLU:C	1:49:A:LYS:N	1:49:A:LYS:CA	1:49:A:LYS:C	2	23.64
(1,4)	1:4:A:LYS:C	1:5:A:VAL:N	1:5:A:VAL:CA	1:5:A:VAL:C	11	23.64
(1,69)	1:13:A:GLU:N	1:13:A:GLU:CA	1:13:A:GLU:C	1:14:A:LYS:N	3	23.58
(1,27)	1:30:A:LEU:C	1:31:A:VAL:N	1:31:A:VAL:CA	1:31:A:VAL:C	13	23.47
(1,32)	1:35:A:TYR:C	1:36:A:ASP:N	1:36:A:ASP:CA	1:36:A:ASP:C	8	23.41
(1,75)	1:19:A:SER:N	1:19:A:SER:CA	1:19:A:SER:C	1:20:A:LYS:N	17	23.38
(1,4)	1:4:A:LYS:C	1:5:A:VAL:N	1:5:A:VAL:CA	1:5:A:VAL:C	2	23.37
(1,27)	1:30:A:LEU:C	1:31:A:VAL:N	1:31:A:VAL:CA	1:31:A:VAL:C	18	23.29

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,27)	1:30:A:LEU:C	1:31:A:VAL:N	1:31:A:VAL:CA	1:31:A:VAL:C	3	23.23
(1,3)	1:3:A:VAL:C	1:4:A:LYS:N	1:4:A:LYS:CA	1:4:A:LYS:C	20	23.21
(1,43)	1:50:A:ASP:C	1:51:A:ALA:N	1:51:A:ALA:CA	1:51:A:ALA:C	8	23.19
(1,3)	1:3:A:VAL:C	1:4:A:LYS:N	1:4:A:LYS:CA	1:4:A:LYS:C	2	23.19
(1,97)	1:48:A:GLU:N	1:48:A:GLU:CA	1:48:A:GLU:C	1:49:A:LYS:N	7	23.08
(1,91)	1:40:A:LYS:N	1:40:A:LYS:CA	1:40:A:LYS:C	1:41:A:THR:N	2	23.08
(1,3)	1:3:A:VAL:C	1:4:A:LYS:N	1:4:A:LYS:CA	1:4:A:LYS:C	19	22.99
(1,88)	1:35:A:TYR:N	1:35:A:TYR:CA	1:35:A:TYR:C	1:36:A:ASP:N	4	22.97
(1,99)	1:50:A:ASP:N	1:50:A:ASP:CA	1:50:A:ASP:C	1:51:A:ALA:N	4	22.93
(1,5)	1:5:A:VAL:C	1:6:A:LYS:N	1:6:A:LYS:CA	1:6:A:LYS:C	20	22.86
(1,5)	1:5:A:VAL:C	1:6:A:LYS:N	1:6:A:LYS:CA	1:6:A:LYS:C	10	22.82
(1,4)	1:4:A:LYS:C	1:5:A:VAL:N	1:5:A:VAL:CA	1:5:A:VAL:C	12	22.82
(1,4)	1:4:A:LYS:C	1:5:A:VAL:N	1:5:A:VAL:CA	1:5:A:VAL:C	5	22.77
(1,41)	1:48:A:GLU:C	1:49:A:LYS:N	1:49:A:LYS:CA	1:49:A:LYS:C	3	22.72
(1,3)	1:3:A:VAL:C	1:4:A:LYS:N	1:4:A:LYS:CA	1:4:A:LYS:C	11	22.71
(1,16)	1:16:A:VAL:C	1:17:A:ASP:N	1:17:A:ASP:CA	1:17:A:ASP:C	11	22.65
(1,88)	1:35:A:TYR:N	1:35:A:TYR:CA	1:35:A:TYR:C	1:36:A:ASP:N	16	22.51
(1,41)	1:48:A:GLU:C	1:49:A:LYS:N	1:49:A:LYS:CA	1:49:A:LYS:C	11	22.48
(1,21)	1:21:A:ILE:C	1:22:A:THR:N	1:22:A:THR:CA	1:22:A:THR:C	9	22.37
(1,19)	1:19:A:SER:C	1:20:A:LYS:N	1:20:A:LYS:CA	1:20:A:LYS:C	20	22.31
(1,2)	1:2:A:PRO:C	1:3:A:VAL:N	1:3:A:VAL:CA	1:3:A:VAL:C	19	22.25
(1,7)	1:7:A:PHE:C	1:8:A:LYS:N	1:8:A:LYS:CA	1:8:A:LYS:C	16	22.13
(1,91)	1:40:A:LYS:N	1:40:A:LYS:CA	1:40:A:LYS:C	1:41:A:THR:N	10	22.1
(1,23)	1:23:A:HIS:C	1:24:A:VAL:N	1:24:A:VAL:CA	1:24:A:VAL:C	3	22.02
(1,91)	1:40:A:LYS:N	1:40:A:LYS:CA	1:40:A:LYS:C	1:41:A:THR:N	8	21.92
(1,42)	1:49:A:LYS:C	1:50:A:ASP:N	1:50:A:ASP:CA	1:50:A:ASP:C	16	21.83
(1,10)	1:10:A:LYS:C	1:11:A:GLY:N	1:11:A:GLY:CA	1:11:A:GLY:C	2	21.63
(1,46)	1:53:A:LYS:C	1:54:A:GLU:N	1:54:A:GLU:CA	1:54:A:GLU:C	9	21.52
(1,13)	1:13:A:GLU:C	1:14:A:LYS:N	1:14:A:LYS:CA	1:14:A:LYS:C	17	21.42
(1,31)	1:34:A:TYR:C	1:35:A:TYR:N	1:35:A:TYR:CA	1:35:A:TYR:C	16	21.41
(1,43)	1:50:A:ASP:C	1:51:A:ALA:N	1:51:A:ALA:CA	1:51:A:ALA:C	20	21.35
(1,114)	1:65:A:GLU:N	1:65:A:GLU:CA	1:65:A:GLU:C	1:66:A:LYS:N	6	21.3
(1,114)	1:65:A:GLU:N	1:65:A:GLU:CA	1:65:A:GLU:C	1:66:A:LYS:N	14	21.28
(1,38)	1:45:A:LEU:C	1:46:A:VAL:N	1:46:A:VAL:CA	1:46:A:VAL:C	3	21.13
(1,75)	1:19:A:SER:N	1:19:A:SER:CA	1:19:A:SER:C	1:20:A:LYS:N	5	21.04
(1,35)	1:40:A:LYS:C	1:41:A:THR:N	1:41:A:THR:CA	1:41:A:THR:C	8	21.04
(1,54)	1:61:A:ARG:C	1:62:A:ALA:N	1:62:A:ALA:CA	1:62:A:ALA:C	1	21.0
(1,87)	1:34:A:TYR:N	1:34:A:TYR:CA	1:34:A:TYR:C	1:35:A:TYR:N	14	20.98
(1,4)	1:4:A:LYS:C	1:5:A:VAL:N	1:5:A:VAL:CA	1:5:A:VAL:C	20	20.86
(1,70)	1:14:A:LYS:N	1:14:A:LYS:CA	1:14:A:LYS:C	1:15:A:GLU:N	5	20.81
(1,32)	1:35:A:TYR:C	1:36:A:ASP:N	1:36:A:ASP:CA	1:36:A:ASP:C	7	20.76
(1,5)	1:5:A:VAL:C	1:6:A:LYS:N	1:6:A:LYS:CA	1:6:A:LYS:C	8	20.76
(1,28)	1:31:A:VAL:C	1:32:A:VAL:N	1:32:A:VAL:CA	1:32:A:VAL:C	11	20.74
(1,23)	1:23:A:HIS:C	1:24:A:VAL:N	1:24:A:VAL:CA	1:24:A:VAL:C	5	20.71
(1,16)	1:16:A:VAL:C	1:17:A:ASP:N	1:17:A:ASP:CA	1:17:A:ASP:C	3	20.63
(1,5)	1:5:A:VAL:C	1:6:A:LYS:N	1:6:A:LYS:CA	1:6:A:LYS:C	16	20.63
(1,67)	1:11:A:GLY:N	1:11:A:GLY:CA	1:11:A:GLY:C	1:12:A:GLU:N	5	20.56
(1,4)	1:4:A:LYS:C	1:5:A:VAL:N	1:5:A:VAL:CA	1:5:A:VAL:C	13	20.53
(1,28)	1:31:A:VAL:C	1:32:A:VAL:N	1:32:A:VAL:CA	1:32:A:VAL:C	9	20.51
(1,23)	1:23:A:HIS:C	1:24:A:VAL:N	1:24:A:VAL:CA	1:24:A:VAL:C	14	20.45
(1,5)	1:5:A:VAL:C	1:6:A:LYS:N	1:6:A:LYS:CA	1:6:A:LYS:C	1	20.23

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,23)	1:23:A:HIS:C	1:24:A:VAL:N	1:24:A:VAL:CA	1:24:A:VAL:C	2	20.15
(1,70)	1:14:A:LYS:N	1:14:A:LYS:CA	1:14:A:LYS:C	1:15:A:GLU:N	18	20.0
(1,99)	1:50:A:ASP:N	1:50:A:ASP:CA	1:50:A:ASP:C	1:51:A:ALA:N	20	19.98
(1,31)	1:34:A:TYR:C	1:35:A:TYR:N	1:35:A:TYR:CA	1:35:A:TYR:C	1	19.92
(1,14)	1:14:A:LYS:C	1:15:A:GLU:N	1:15:A:GLU:CA	1:15:A:GLU:C	20	19.83
(1,7)	1:7:A:PHE:C	1:8:A:LYS:N	1:8:A:LYS:CA	1:8:A:LYS:C	10	19.8
(1,69)	1:13:A:GLU:N	1:13:A:GLU:CA	1:13:A:GLU:C	1:14:A:LYS:N	2	19.73
(1,70)	1:14:A:LYS:N	1:14:A:LYS:CA	1:14:A:LYS:C	1:15:A:GLU:N	6	19.68
(1,28)	1:31:A:VAL:C	1:32:A:VAL:N	1:32:A:VAL:CA	1:32:A:VAL:C	3	19.61
(1,2)	1:2:A:PRO:C	1:3:A:VAL:N	1:3:A:VAL:CA	1:3:A:VAL:C	7	19.61
(1,4)	1:4:A:LYS:C	1:5:A:VAL:N	1:5:A:VAL:CA	1:5:A:VAL:C	18	19.58
(1,35)	1:40:A:LYS:C	1:41:A:THR:N	1:41:A:THR:CA	1:41:A:THR:C	19	19.54
(1,23)	1:23:A:HIS:C	1:24:A:VAL:N	1:24:A:VAL:CA	1:24:A:VAL:C	11	19.5
(1,75)	1:19:A:SER:N	1:19:A:SER:CA	1:19:A:SER:C	1:20:A:LYS:N	8	19.46
(1,14)	1:14:A:LYS:C	1:15:A:GLU:N	1:15:A:GLU:CA	1:15:A:GLU:C	5	19.41
(1,31)	1:34:A:TYR:C	1:35:A:TYR:N	1:35:A:TYR:CA	1:35:A:TYR:C	7	19.4
(1,23)	1:23:A:HIS:C	1:24:A:VAL:N	1:24:A:VAL:CA	1:24:A:VAL:C	7	19.39
(1,3)	1:3:A:VAL:C	1:4:A:LYS:N	1:4:A:LYS:CA	1:4:A:LYS:C	6	19.37
(1,32)	1:35:A:TYR:C	1:36:A:ASP:N	1:36:A:ASP:CA	1:36:A:ASP:C	4	19.34
(1,32)	1:35:A:TYR:C	1:36:A:ASP:N	1:36:A:ASP:CA	1:36:A:ASP:C	19	19.32
(1,56)	1:63:A:GLU:C	1:64:A:ARG:N	1:64:A:ARG:CA	1:64:A:ARG:C	7	19.22
(1,20)	1:20:A:LYS:C	1:21:A:ILE:N	1:21:A:ILE:CA	1:21:A:ILE:C	8	19.04
(1,54)	1:61:A:ARG:C	1:62:A:ALA:N	1:62:A:ALA:CA	1:62:A:ALA:C	7	18.92
(1,71)	1:15:A:GLU:N	1:15:A:GLU:CA	1:15:A:GLU:C	1:16:A:VAL:N	4	18.86
(1,14)	1:14:A:LYS:C	1:15:A:GLU:N	1:15:A:GLU:CA	1:15:A:GLU:C	2	18.81
(1,73)	1:17:A:ASP:N	1:17:A:ASP:CA	1:17:A:ASP:C	1:18:A:THR:N	18	18.79
(1,34)	1:39:A:GLY:C	1:40:A:LYS:N	1:40:A:LYS:CA	1:40:A:LYS:C	17	18.76
(1,23)	1:23:A:HIS:C	1:24:A:VAL:N	1:24:A:VAL:CA	1:24:A:VAL:C	18	18.76
(1,46)	1:53:A:LYS:C	1:54:A:GLU:N	1:54:A:GLU:CA	1:54:A:GLU:C	2	18.74
(1,87)	1:34:A:TYR:N	1:34:A:TYR:CA	1:34:A:TYR:C	1:35:A:TYR:N	20	18.73
(1,54)	1:61:A:ARG:C	1:62:A:ALA:N	1:62:A:ALA:CA	1:62:A:ALA:C	2	18.62
(1,54)	1:61:A:ARG:C	1:62:A:ALA:N	1:62:A:ALA:CA	1:62:A:ALA:C	16	18.52
(1,4)	1:4:A:LYS:C	1:5:A:VAL:N	1:5:A:VAL:CA	1:5:A:VAL:C	10	18.52
(1,53)	1:60:A:ALA:C	1:61:A:ARG:N	1:61:A:ARG:CA	1:61:A:ARG:C	5	18.5
(1,3)	1:3:A:VAL:C	1:4:A:LYS:N	1:4:A:LYS:CA	1:4:A:LYS:C	12	18.49
(1,53)	1:60:A:ALA:C	1:61:A:ARG:N	1:61:A:ARG:CA	1:61:A:ARG:C	13	18.48
(1,83)	1:30:A:LEU:N	1:30:A:LEU:CA	1:30:A:LEU:C	1:31:A:VAL:N	14	18.4
(1,56)	1:63:A:GLU:C	1:64:A:ARG:N	1:64:A:ARG:CA	1:64:A:ARG:C	11	18.4
(1,78)	1:22:A:THR:N	1:22:A:THR:CA	1:22:A:THR:C	1:23:A:HIS:N	7	18.36
(1,27)	1:30:A:LEU:C	1:31:A:VAL:N	1:31:A:VAL:CA	1:31:A:VAL:C	19	18.34
(1,27)	1:30:A:LEU:C	1:31:A:VAL:N	1:31:A:VAL:CA	1:31:A:VAL:C	2	18.23
(1,27)	1:30:A:LEU:C	1:31:A:VAL:N	1:31:A:VAL:CA	1:31:A:VAL:C	11	18.2
(1,34)	1:39:A:GLY:C	1:40:A:LYS:N	1:40:A:LYS:CA	1:40:A:LYS:C	16	18.14
(1,87)	1:34:A:TYR:N	1:34:A:TYR:CA	1:34:A:TYR:C	1:35:A:TYR:N	2	18.07
(1,21)	1:21:A:ILE:C	1:22:A:THR:N	1:22:A:THR:CA	1:22:A:THR:C	17	18.04
(1,97)	1:48:A:GLU:N	1:48:A:GLU:CA	1:48:A:GLU:C	1:49:A:LYS:N	9	17.94
(1,88)	1:35:A:TYR:N	1:35:A:TYR:CA	1:35:A:TYR:C	1:36:A:ASP:N	8	17.9
(1,8)	1:8:A:LYS:C	1:9:A:TYR:N	1:9:A:TYR:CA	1:9:A:TYR:C	12	17.87
(1,21)	1:21:A:ILE:C	1:22:A:THR:N	1:22:A:THR:CA	1:22:A:THR:C	19	17.86
(1,54)	1:61:A:ARG:C	1:62:A:ALA:N	1:62:A:ALA:CA	1:62:A:ALA:C	5	17.77
(1,28)	1:31:A:VAL:C	1:32:A:VAL:N	1:32:A:VAL:CA	1:32:A:VAL:C	15	17.74

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,5)	1:5:A:VAL:C	1:6:A:LYS:N	1:6:A:LYS:CA	1:6:A:LYS:C	7	17.74
(1,4)	1:4:A:LYS:C	1:5:A:VAL:N	1:5:A:VAL:CA	1:5:A:VAL:C	8	17.74
(1,12)	1:12:A:GLU:C	1:13:A:GLU:N	1:13:A:GLU:CA	1:13:A:GLU:C	15	17.73
(1,20)	1:20:A:LYS:C	1:21:A:ILE:N	1:21:A:ILE:CA	1:21:A:ILE:C	15	17.68
(1,41)	1:48:A:GLU:C	1:49:A:LYS:N	1:49:A:LYS:CA	1:49:A:LYS:C	15	17.66
(1,46)	1:53:A:LYS:C	1:54:A:GLU:N	1:54:A:GLU:CA	1:54:A:GLU:C	3	17.61
(1,20)	1:20:A:LYS:C	1:21:A:ILE:N	1:21:A:ILE:CA	1:21:A:ILE:C	16	17.61
(1,3)	1:3:A:VAL:C	1:4:A:LYS:N	1:4:A:LYS:CA	1:4:A:LYS:C	14	17.53
(1,99)	1:50:A:ASP:N	1:50:A:ASP:CA	1:50:A:ASP:C	1:51:A:ALA:N	14	17.49
(1,27)	1:30:A:LEU:C	1:31:A:VAL:N	1:31:A:VAL:CA	1:31:A:VAL:C	14	17.46
(1,5)	1:5:A:VAL:C	1:6:A:LYS:N	1:6:A:LYS:CA	1:6:A:LYS:C	5	17.41
(1,7)	1:7:A:PHE:C	1:8:A:LYS:N	1:8:A:LYS:CA	1:8:A:LYS:C	3	17.35
(1,2)	1:2:A:PRO:C	1:3:A:VAL:N	1:3:A:VAL:CA	1:3:A:VAL:C	8	17.34
(1,27)	1:30:A:LEU:C	1:31:A:VAL:N	1:31:A:VAL:CA	1:31:A:VAL:C	16	17.32
(1,56)	1:63:A:GLU:C	1:64:A:ARG:N	1:64:A:ARG:CA	1:64:A:ARG:C	5	17.23
(1,54)	1:61:A:ARG:C	1:62:A:ALA:N	1:62:A:ALA:CA	1:62:A:ALA:C	14	17.11
(1,26)	1:29:A:LYS:C	1:30:A:LEU:N	1:30:A:LEU:CA	1:30:A:LEU:C	8	17.09
(1,7)	1:7:A:PHE:C	1:8:A:LYS:N	1:8:A:LYS:CA	1:8:A:LYS:C	5	17.08
(1,53)	1:60:A:ALA:C	1:61:A:ARG:N	1:61:A:ARG:CA	1:61:A:ARG:C	12	17.01
(1,110)	1:61:A:ARG:N	1:61:A:ARG:CA	1:61:A:ARG:C	1:62:A:ALA:N	12	16.96
(1,43)	1:50:A:ASP:C	1:51:A:ALA:N	1:51:A:ALA:CA	1:51:A:ALA:C	14	16.94
(1,53)	1:60:A:ALA:C	1:61:A:ARG:N	1:61:A:ARG:CA	1:61:A:ARG:C	19	16.88
(1,76)	1:20:A:LYS:N	1:20:A:LYS:CA	1:20:A:LYS:C	1:21:A:ILE:N	20	16.8
(1,46)	1:53:A:LYS:C	1:54:A:GLU:N	1:54:A:GLU:CA	1:54:A:GLU:C	6	16.79
(1,2)	1:2:A:PRO:C	1:3:A:VAL:N	1:3:A:VAL:CA	1:3:A:VAL:C	13	16.79
(1,54)	1:61:A:ARG:C	1:62:A:ALA:N	1:62:A:ALA:CA	1:62:A:ALA:C	6	16.76
(1,53)	1:60:A:ALA:C	1:61:A:ARG:N	1:61:A:ARG:CA	1:61:A:ARG:C	1	16.75
(1,4)	1:4:A:LYS:C	1:5:A:VAL:N	1:5:A:VAL:CA	1:5:A:VAL:C	16	16.75
(1,53)	1:60:A:ALA:C	1:61:A:ARG:N	1:61:A:ARG:CA	1:61:A:ARG:C	6	16.73
(1,41)	1:48:A:GLU:C	1:49:A:LYS:N	1:49:A:LYS:CA	1:49:A:LYS:C	13	16.69
(1,71)	1:15:A:GLU:N	1:15:A:GLU:CA	1:15:A:GLU:C	1:16:A:VAL:N	10	16.6
(1,27)	1:30:A:LEU:C	1:31:A:VAL:N	1:31:A:VAL:CA	1:31:A:VAL:C	20	16.55
(1,113)	1:64:A:ARG:N	1:64:A:ARG:CA	1:64:A:ARG:C	1:65:A:GLU:N	5	16.51
(1,54)	1:61:A:ARG:C	1:62:A:ALA:N	1:62:A:ALA:CA	1:62:A:ALA:C	12	16.49
(1,56)	1:63:A:GLU:C	1:64:A:ARG:N	1:64:A:ARG:CA	1:64:A:ARG:C	4	16.48
(1,21)	1:21:A:ILE:C	1:22:A:THR:N	1:22:A:THR:CA	1:22:A:THR:C	14	16.38
(1,3)	1:3:A:VAL:C	1:4:A:LYS:N	1:4:A:LYS:CA	1:4:A:LYS:C	3	16.38
(1,23)	1:23:A:HIS:C	1:24:A:VAL:N	1:24:A:VAL:CA	1:24:A:VAL:C	17	16.33
(1,41)	1:48:A:GLU:C	1:49:A:LYS:N	1:49:A:LYS:CA	1:49:A:LYS:C	9	16.32
(1,53)	1:60:A:ALA:C	1:61:A:ARG:N	1:61:A:ARG:CA	1:61:A:ARG:C	17	16.22
(1,41)	1:48:A:GLU:C	1:49:A:LYS:N	1:49:A:LYS:CA	1:49:A:LYS:C	10	16.21
(1,4)	1:4:A:LYS:C	1:5:A:VAL:N	1:5:A:VAL:CA	1:5:A:VAL:C	7	16.17
(1,2)	1:2:A:PRO:C	1:3:A:VAL:N	1:3:A:VAL:CA	1:3:A:VAL:C	20	16.14
(1,38)	1:45:A:LEU:C	1:46:A:VAL:N	1:46:A:VAL:CA	1:46:A:VAL:C	20	16.13
(1,27)	1:30:A:LEU:C	1:31:A:VAL:N	1:31:A:VAL:CA	1:31:A:VAL:C	4	16.06
(1,110)	1:61:A:ARG:N	1:61:A:ARG:CA	1:61:A:ARG:C	1:62:A:ALA:N	17	16.01
(1,112)	1:63:A:GLU:N	1:63:A:GLU:CA	1:63:A:GLU:C	1:64:A:ARG:N	16	15.99
(1,97)	1:48:A:GLU:N	1:48:A:GLU:CA	1:48:A:GLU:C	1:49:A:LYS:N	2	15.94
(1,110)	1:61:A:ARG:N	1:61:A:ARG:CA	1:61:A:ARG:C	1:62:A:ALA:N	2	15.86
(1,58)	1:2:A:PRO:N	1:2:A:PRO:CA	1:2:A:PRO:C	1:3:A:VAL:N	7	15.86
(1,114)	1:65:A:GLU:N	1:65:A:GLU:CA	1:65:A:GLU:C	1:66:A:LYS:N	13	15.83

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,36)	1:42:A:GLY:C	1:43:A:HIS:N	1:43:A:HIS:CA	1:43:A:HIS:C	8	15.83
(1,5)	1:5:A:VAL:C	1:6:A:LYS:N	1:6:A:LYS:CA	1:6:A:LYS:C	2	15.81
(1,70)	1:14:A:LYS:N	1:14:A:LYS:CA	1:14:A:LYS:C	1:15:A:GLU:N	8	15.75
(1,112)	1:63:A:GLU:N	1:63:A:GLU:CA	1:63:A:GLU:C	1:64:A:ARG:N	11	15.65
(1,65)	1:9:A:TYR:N	1:9:A:TYR:CA	1:9:A:TYR:C	1:10:A:LYS:N	2	15.63
(1,77)	1:21:A:ILE:N	1:21:A:ILE:CA	1:21:A:ILE:C	1:22:A:THR:N	3	15.56
(1,71)	1:15:A:GLU:N	1:15:A:GLU:CA	1:15:A:GLU:C	1:16:A:VAL:N	19	15.53
(1,7)	1:7:A:PHE:C	1:8:A:LYS:N	1:8:A:LYS:CA	1:8:A:LYS:C	7	15.51
(1,69)	1:13:A:GLU:N	1:13:A:GLU:CA	1:13:A:GLU:C	1:14:A:LYS:N	12	15.5
(1,41)	1:48:A:GLU:C	1:49:A:LYS:N	1:49:A:LYS:CA	1:49:A:LYS:C	4	15.47
(1,8)	1:8:A:LYS:C	1:9:A:TYR:N	1:9:A:TYR:CA	1:9:A:TYR:C	15	15.47
(1,54)	1:61:A:ARG:C	1:62:A:ALA:N	1:62:A:ALA:CA	1:62:A:ALA:C	3	15.46
(1,7)	1:7:A:PHE:C	1:8:A:LYS:N	1:8:A:LYS:CA	1:8:A:LYS:C	17	15.44
(1,114)	1:65:A:GLU:N	1:65:A:GLU:CA	1:65:A:GLU:C	1:66:A:LYS:N	20	15.43
(1,54)	1:61:A:ARG:C	1:62:A:ALA:N	1:62:A:ALA:CA	1:62:A:ALA:C	17	15.43
(1,98)	1:49:A:LYS:N	1:49:A:LYS:CA	1:49:A:LYS:C	1:50:A:ASP:N	7	15.41
(1,83)	1:30:A:LEU:N	1:30:A:LEU:CA	1:30:A:LEU:C	1:31:A:VAL:N	8	15.41
(1,23)	1:23:A:HIS:C	1:24:A:VAL:N	1:24:A:VAL:CA	1:24:A:VAL:C	20	15.38
(1,67)	1:11:A:GLY:N	1:11:A:GLY:CA	1:11:A:GLY:C	1:12:A:GLU:N	11	15.37
(1,27)	1:30:A:LEU:C	1:31:A:VAL:N	1:31:A:VAL:CA	1:31:A:VAL:C	12	15.36
(1,23)	1:23:A:HIS:C	1:24:A:VAL:N	1:24:A:VAL:CA	1:24:A:VAL:C	13	15.35
(1,4)	1:4:A:LYS:C	1:5:A:VAL:N	1:5:A:VAL:CA	1:5:A:VAL:C	15	15.34
(1,7)	1:7:A:PHE:C	1:8:A:LYS:N	1:8:A:LYS:CA	1:8:A:LYS:C	11	15.33
(1,56)	1:63:A:GLU:C	1:64:A:ARG:N	1:64:A:ARG:CA	1:64:A:ARG:C	16	15.3
(1,110)	1:61:A:ARG:N	1:61:A:ARG:CA	1:61:A:ARG:C	1:62:A:ALA:N	18	15.29
(1,87)	1:34:A:TYR:N	1:34:A:TYR:CA	1:34:A:TYR:C	1:35:A:TYR:N	8	15.27
(1,66)	1:10:A:LYS:N	1:10:A:LYS:CA	1:10:A:LYS:C	1:11:A:GLY:N	12	15.26
(1,4)	1:4:A:LYS:C	1:5:A:VAL:N	1:5:A:VAL:CA	1:5:A:VAL:C	19	15.23
(1,7)	1:7:A:PHE:C	1:8:A:LYS:N	1:8:A:LYS:CA	1:8:A:LYS:C	19	15.22
(1,110)	1:61:A:ARG:N	1:61:A:ARG:CA	1:61:A:ARG:C	1:62:A:ALA:N	20	15.16
(1,4)	1:4:A:LYS:C	1:5:A:VAL:N	1:5:A:VAL:CA	1:5:A:VAL:C	4	15.13
(1,99)	1:50:A:ASP:N	1:50:A:ASP:CA	1:50:A:ASP:C	1:51:A:ALA:N	10	15.12
(1,77)	1:21:A:ILE:N	1:21:A:ILE:CA	1:21:A:ILE:C	1:22:A:THR:N	15	15.05
(1,114)	1:65:A:GLU:N	1:65:A:GLU:CA	1:65:A:GLU:C	1:66:A:LYS:N	19	15.04
(1,54)	1:61:A:ARG:C	1:62:A:ALA:N	1:62:A:ALA:CA	1:62:A:ALA:C	13	15.01
(1,23)	1:23:A:HIS:C	1:24:A:VAL:N	1:24:A:VAL:CA	1:24:A:VAL:C	12	15.01
(1,71)	1:15:A:GLU:N	1:15:A:GLU:CA	1:15:A:GLU:C	1:16:A:VAL:N	3	14.93
(1,53)	1:60:A:ALA:C	1:61:A:ARG:N	1:61:A:ARG:CA	1:61:A:ARG:C	16	14.92
(1,27)	1:30:A:LEU:C	1:31:A:VAL:N	1:31:A:VAL:CA	1:31:A:VAL:C	1	14.91
(1,42)	1:49:A:LYS:C	1:50:A:ASP:N	1:50:A:ASP:CA	1:50:A:ASP:C	8	14.8
(1,97)	1:48:A:GLU:N	1:48:A:GLU:CA	1:48:A:GLU:C	1:49:A:LYS:N	16	14.73
(1,74)	1:18:A:THR:N	1:18:A:THR:CA	1:18:A:THR:C	1:19:A:SER:N	13	14.67
(1,38)	1:45:A:LEU:C	1:46:A:VAL:N	1:46:A:VAL:CA	1:46:A:VAL:C	5	14.67
(1,43)	1:50:A:ASP:C	1:51:A:ALA:N	1:51:A:ALA:CA	1:51:A:ALA:C	11	14.64
(1,27)	1:30:A:LEU:C	1:31:A:VAL:N	1:31:A:VAL:CA	1:31:A:VAL:C	7	14.64
(1,61)	1:5:A:VAL:N	1:5:A:VAL:CA	1:5:A:VAL:C	1:6:A:LYS:N	6	14.61
(1,53)	1:60:A:ALA:C	1:61:A:ARG:N	1:61:A:ARG:CA	1:61:A:ARG:C	3	14.58
(1,114)	1:65:A:GLU:N	1:65:A:GLU:CA	1:65:A:GLU:C	1:66:A:LYS:N	5	14.57
(1,23)	1:23:A:HIS:C	1:24:A:VAL:N	1:24:A:VAL:CA	1:24:A:VAL:C	15	14.48
(1,14)	1:14:A:LYS:C	1:15:A:GLU:N	1:15:A:GLU:CA	1:15:A:GLU:C	3	14.45
(1,70)	1:14:A:LYS:N	1:14:A:LYS:CA	1:14:A:LYS:C	1:15:A:GLU:N	20	14.4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,99)	1:50:A:ASP:N	1:50:A:ASP:CA	1:50:A:ASP:C	1:51:A:ALA:N	16	14.38
(1,75)	1:19:A:SER:N	1:19:A:SER:CA	1:19:A:SER:C	1:20:A:LYS:N	18	14.36
(1,67)	1:11:A:GLY:N	1:11:A:GLY:CA	1:11:A:GLY:C	1:12:A:GLU:N	13	14.36
(1,42)	1:49:A:LYS:C	1:50:A:ASP:N	1:50:A:ASP:CA	1:50:A:ASP:C	20	14.35
(1,77)	1:21:A:ILE:N	1:21:A:ILE:CA	1:21:A:ILE:C	1:22:A:THR:N	13	14.27
(1,110)	1:61:A:ARG:N	1:61:A:ARG:CA	1:61:A:ARG:C	1:62:A:ALA:N	8	14.26
(1,77)	1:21:A:ILE:N	1:21:A:ILE:CA	1:21:A:ILE:C	1:22:A:THR:N	9	14.18
(1,77)	1:21:A:ILE:N	1:21:A:ILE:CA	1:21:A:ILE:C	1:22:A:THR:N	14	14.17
(1,12)	1:12:A:GLU:C	1:13:A:GLU:N	1:13:A:GLU:CA	1:13:A:GLU:C	2	14.17
(1,71)	1:15:A:GLU:N	1:15:A:GLU:CA	1:15:A:GLU:C	1:16:A:VAL:N	2	14.15
(1,71)	1:15:A:GLU:N	1:15:A:GLU:CA	1:15:A:GLU:C	1:16:A:VAL:N	18	14.13
(1,110)	1:61:A:ARG:N	1:61:A:ARG:CA	1:61:A:ARG:C	1:62:A:ALA:N	13	14.11
(1,23)	1:23:A:HIS:C	1:24:A:VAL:N	1:24:A:VAL:CA	1:24:A:VAL:C	6	14.11
(1,69)	1:13:A:GLU:N	1:13:A:GLU:CA	1:13:A:GLU:C	1:14:A:LYS:N	1	14.1
(1,2)	1:2:A:PRO:C	1:3:A:VAL:N	1:3:A:VAL:CA	1:3:A:VAL:C	9	14.09
(1,99)	1:50:A:ASP:N	1:50:A:ASP:CA	1:50:A:ASP:C	1:51:A:ALA:N	3	14.08
(1,55)	1:62:A:ALA:C	1:63:A:GLU:N	1:63:A:GLU:CA	1:63:A:GLU:C	11	14.03
(1,35)	1:40:A:LYS:C	1:41:A:THR:N	1:41:A:THR:CA	1:41:A:THR:C	14	14.03
(1,99)	1:50:A:ASP:N	1:50:A:ASP:CA	1:50:A:ASP:C	1:51:A:ALA:N	8	13.96
(1,3)	1:3:A:VAL:C	1:4:A:LYS:N	1:4:A:LYS:CA	1:4:A:LYS:C	4	13.95
(1,69)	1:13:A:GLU:N	1:13:A:GLU:CA	1:13:A:GLU:C	1:14:A:LYS:N	17	13.93
(1,99)	1:50:A:ASP:N	1:50:A:ASP:CA	1:50:A:ASP:C	1:51:A:ALA:N	2	13.9
(1,14)	1:14:A:LYS:C	1:15:A:GLU:N	1:15:A:GLU:CA	1:15:A:GLU:C	18	13.9
(1,84)	1:31:A:VAL:N	1:31:A:VAL:CA	1:31:A:VAL:C	1:32:A:VAL:N	11	13.89
(1,97)	1:48:A:GLU:N	1:48:A:GLU:CA	1:48:A:GLU:C	1:49:A:LYS:N	20	13.88
(1,11)	1:11:A:GLY:C	1:12:A:GLU:N	1:12:A:GLU:CA	1:12:A:GLU:C	5	13.88
(1,63)	1:7:A:PHE:N	1:7:A:PHE:CA	1:7:A:PHE:C	1:8:A:LYS:N	10	13.87
(1,27)	1:30:A:LEU:C	1:31:A:VAL:N	1:31:A:VAL:CA	1:31:A:VAL:C	6	13.87
(1,66)	1:10:A:LYS:N	1:10:A:LYS:CA	1:10:A:LYS:C	1:11:A:GLY:N	17	13.83
(1,90)	1:38:A:ASN:N	1:38:A:ASN:CA	1:38:A:ASN:C	1:39:A:GLY:N	8	13.78
(1,12)	1:12:A:GLU:C	1:13:A:GLU:N	1:13:A:GLU:CA	1:13:A:GLU:C	17	13.68
(1,25)	1:25:A:PHE:C	1:26:A:ARG:N	1:26:A:ARG:CA	1:26:A:ARG:C	5	13.67
(1,38)	1:45:A:LEU:C	1:46:A:VAL:N	1:46:A:VAL:CA	1:46:A:VAL:C	9	13.65
(1,14)	1:14:A:LYS:C	1:15:A:GLU:N	1:15:A:GLU:CA	1:15:A:GLU:C	9	13.64
(1,4)	1:4:A:LYS:C	1:5:A:VAL:N	1:5:A:VAL:CA	1:5:A:VAL:C	3	13.63
(1,27)	1:30:A:LEU:C	1:31:A:VAL:N	1:31:A:VAL:CA	1:31:A:VAL:C	8	13.62
(1,1)	1:1:A:GLY:C	1:2:A:PRO:N	1:2:A:PRO:CA	1:2:A:PRO:C	17	13.58
(1,70)	1:14:A:LYS:N	1:14:A:LYS:CA	1:14:A:LYS:C	1:15:A:GLU:N	3	13.56
(1,110)	1:61:A:ARG:N	1:61:A:ARG:CA	1:61:A:ARG:C	1:62:A:ALA:N	6	13.55
(1,20)	1:20:A:LYS:C	1:21:A:ILE:N	1:21:A:ILE:CA	1:21:A:ILE:C	14	13.55
(1,81)	1:25:A:PHE:N	1:25:A:PHE:CA	1:25:A:PHE:C	1:26:A:ARG:N	5	13.53
(1,26)	1:29:A:LYS:C	1:30:A:LEU:N	1:30:A:LEU:CA	1:30:A:LEU:C	10	13.51
(1,20)	1:20:A:LYS:C	1:21:A:ILE:N	1:21:A:ILE:CA	1:21:A:ILE:C	4	13.51
(1,4)	1:4:A:LYS:C	1:5:A:VAL:N	1:5:A:VAL:CA	1:5:A:VAL:C	9	13.48
(1,70)	1:14:A:LYS:N	1:14:A:LYS:CA	1:14:A:LYS:C	1:15:A:GLU:N	1	13.47
(1,53)	1:60:A:ALA:C	1:61:A:ARG:N	1:61:A:ARG:CA	1:61:A:ARG:C	15	13.35
(1,53)	1:60:A:ALA:C	1:61:A:ARG:N	1:61:A:ARG:CA	1:61:A:ARG:C	2	13.3
(1,67)	1:11:A:GLY:N	1:11:A:GLY:CA	1:11:A:GLY:C	1:12:A:GLU:N	12	13.29
(1,40)	1:47:A:PRO:C	1:48:A:GLU:N	1:48:A:GLU:CA	1:48:A:GLU:C	7	13.29
(1,83)	1:30:A:LEU:N	1:30:A:LEU:CA	1:30:A:LEU:C	1:31:A:VAL:N	10	13.27
(1,67)	1:11:A:GLY:N	1:11:A:GLY:CA	1:11:A:GLY:C	1:12:A:GLU:N	15	13.24

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,58)	1:2:A:PRO:N	1:2:A:PRO:CA	1:2:A:PRO:C	1:3:A:VAL:N	20	13.24
(1,28)	1:31:A:VAL:C	1:32:A:VAL:N	1:32:A:VAL:CA	1:32:A:VAL:C	5	13.23
(1,97)	1:48:A:GLU:N	1:48:A:GLU:CA	1:48:A:GLU:C	1:49:A:LYS:N	11	13.22
(1,61)	1:5:A:VAL:N	1:5:A:VAL:CA	1:5:A:VAL:C	1:6:A:LYS:N	7	13.2
(1,87)	1:34:A:TYR:N	1:34:A:TYR:CA	1:34:A:TYR:C	1:35:A:TYR:N	16	13.17
(1,14)	1:14:A:LYS:C	1:15:A:GLU:N	1:15:A:GLU:CA	1:15:A:GLU:C	14	13.17
(1,34)	1:39:A:GLY:C	1:40:A:LYS:N	1:40:A:LYS:CA	1:40:A:LYS:C	5	13.08
(1,58)	1:2:A:PRO:N	1:2:A:PRO:CA	1:2:A:PRO:C	1:3:A:VAL:N	13	13.07
(1,71)	1:15:A:GLU:N	1:15:A:GLU:CA	1:15:A:GLU:C	1:16:A:VAL:N	16	13.06
(1,55)	1:62:A:ALA:C	1:63:A:GLU:N	1:63:A:GLU:CA	1:63:A:GLU:C	16	13.06
(1,69)	1:13:A:GLU:N	1:13:A:GLU:CA	1:13:A:GLU:C	1:14:A:LYS:N	15	13.02
(1,14)	1:14:A:LYS:C	1:15:A:GLU:N	1:15:A:GLU:CA	1:15:A:GLU:C	6	12.98
(1,97)	1:48:A:GLU:N	1:48:A:GLU:CA	1:48:A:GLU:C	1:49:A:LYS:N	19	12.91
(1,9)	1:9:A:TYR:C	1:10:A:LYS:N	1:10:A:LYS:CA	1:10:A:LYS:C	2	12.88
(1,3)	1:3:A:VAL:C	1:4:A:LYS:N	1:4:A:LYS:CA	1:4:A:LYS:C	17	12.87
(1,21)	1:21:A:ILE:C	1:22:A:THR:N	1:22:A:THR:CA	1:22:A:THR:C	6	12.86
(1,53)	1:60:A:ALA:C	1:61:A:ARG:N	1:61:A:ARG:CA	1:61:A:ARG:C	4	12.77
(1,58)	1:2:A:PRO:N	1:2:A:PRO:CA	1:2:A:PRO:C	1:3:A:VAL:N	12	12.75
(1,97)	1:48:A:GLU:N	1:48:A:GLU:CA	1:48:A:GLU:C	1:49:A:LYS:N	14	12.7
(1,8)	1:8:A:LYS:C	1:9:A:TYR:N	1:9:A:TYR:CA	1:9:A:TYR:C	1	12.69
(1,38)	1:45:A:LEU:C	1:46:A:VAL:N	1:46:A:VAL:CA	1:46:A:VAL:C	7	12.67
(1,8)	1:8:A:LYS:C	1:9:A:TYR:N	1:9:A:TYR:CA	1:9:A:TYR:C	5	12.6
(1,22)	1:22:A:THR:C	1:23:A:HIS:N	1:23:A:HIS:CA	1:23:A:HIS:C	3	12.54
(1,51)	1:58:A:MET:C	1:59:A:LEU:N	1:59:A:LEU:CA	1:59:A:LEU:C	1	12.53
(1,99)	1:50:A:ASP:N	1:50:A:ASP:CA	1:50:A:ASP:C	1:51:A:ALA:N	1	12.52
(1,53)	1:60:A:ALA:C	1:61:A:ARG:N	1:61:A:ARG:CA	1:61:A:ARG:C	20	12.52
(1,31)	1:34:A:TYR:C	1:35:A:TYR:N	1:35:A:TYR:CA	1:35:A:TYR:C	4	12.51
(1,10)	1:10:A:LYS:C	1:11:A:GLY:N	1:11:A:GLY:CA	1:11:A:GLY:C	7	12.51
(1,11)	1:11:A:GLY:C	1:12:A:GLU:N	1:12:A:GLU:CA	1:12:A:GLU:C	6	12.48
(1,14)	1:14:A:LYS:C	1:15:A:GLU:N	1:15:A:GLU:CA	1:15:A:GLU:C	15	12.47
(1,93)	1:43:A:HIS:N	1:43:A:HIS:CA	1:43:A:HIS:C	1:44:A:GLY:N	9	12.45
(1,71)	1:15:A:GLU:N	1:15:A:GLU:CA	1:15:A:GLU:C	1:16:A:VAL:N	20	12.42
(1,70)	1:14:A:LYS:N	1:14:A:LYS:CA	1:14:A:LYS:C	1:15:A:GLU:N	2	12.39
(1,109)	1:60:A:ALA:N	1:60:A:ALA:CA	1:60:A:ALA:C	1:61:A:ARG:N	16	12.36
(1,112)	1:63:A:GLU:N	1:63:A:GLU:CA	1:63:A:GLU:C	1:64:A:ARG:N	9	12.35
(1,97)	1:48:A:GLU:N	1:48:A:GLU:CA	1:48:A:GLU:C	1:49:A:LYS:N	8	12.35
(1,54)	1:61:A:ARG:C	1:62:A:ALA:N	1:62:A:ALA:CA	1:62:A:ALA:C	18	12.33
(1,46)	1:53:A:LYS:C	1:54:A:GLU:N	1:54:A:GLU:CA	1:54:A:GLU:C	19	12.33
(1,46)	1:53:A:LYS:C	1:54:A:GLU:N	1:54:A:GLU:CA	1:54:A:GLU:C	10	12.31
(1,81)	1:25:A:PHE:N	1:25:A:PHE:CA	1:25:A:PHE:C	1:26:A:ARG:N	9	12.3
(1,5)	1:5:A:VAL:C	1:6:A:LYS:N	1:6:A:LYS:CA	1:6:A:LYS:C	3	12.27
(1,53)	1:60:A:ALA:C	1:61:A:ARG:N	1:61:A:ARG:CA	1:61:A:ARG:C	18	12.26
(1,73)	1:17:A:ASP:N	1:17:A:ASP:CA	1:17:A:ASP:C	1:18:A:THR:N	3	12.22
(1,67)	1:11:A:GLY:N	1:11:A:GLY:CA	1:11:A:GLY:C	1:12:A:GLU:N	19	12.22
(1,26)	1:29:A:LYS:C	1:30:A:LEU:N	1:30:A:LEU:CA	1:30:A:LEU:C	14	12.18
(1,70)	1:14:A:LYS:N	1:14:A:LYS:CA	1:14:A:LYS:C	1:15:A:GLU:N	16	12.15
(1,10)	1:10:A:LYS:C	1:11:A:GLY:N	1:11:A:GLY:CA	1:11:A:GLY:C	19	12.14
(1,110)	1:61:A:ARG:N	1:61:A:ARG:CA	1:61:A:ARG:C	1:62:A:ALA:N	16	12.1
(1,42)	1:49:A:LYS:C	1:50:A:ASP:N	1:50:A:ASP:CA	1:50:A:ASP:C	4	12.07
(1,41)	1:48:A:GLU:C	1:49:A:LYS:N	1:49:A:LYS:CA	1:49:A:LYS:C	19	12.07
(1,8)	1:8:A:LYS:C	1:9:A:TYR:N	1:9:A:TYR:CA	1:9:A:TYR:C	10	12.07

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,41)	1:48:A:GLU:C	1:49:A:LYS:N	1:49:A:LYS:CA	1:49:A:LYS:C	6	12.04
(1,71)	1:15:A:GLU:N	1:15:A:GLU:CA	1:15:A:GLU:C	1:16:A:VAL:N	8	12.02
(1,68)	1:12:A:GLU:N	1:12:A:GLU:CA	1:12:A:GLU:C	1:13:A:GLU:N	9	12.01
(1,43)	1:50:A:ASP:C	1:51:A:ALA:N	1:51:A:ALA:CA	1:51:A:ALA:C	12	12.0
(1,53)	1:60:A:ALA:C	1:61:A:ARG:N	1:61:A:ARG:CA	1:61:A:ARG:C	8	11.99
(1,60)	1:4:A:LYS:N	1:4:A:LYS:CA	1:4:A:LYS:C	1:5:A:VAL:N	20	11.91
(1,8)	1:8:A:LYS:C	1:9:A:TYR:N	1:9:A:TYR:CA	1:9:A:TYR:C	7	11.91
(1,60)	1:4:A:LYS:N	1:4:A:LYS:CA	1:4:A:LYS:C	1:5:A:VAL:N	3	11.9
(1,20)	1:20:A:LYS:C	1:21:A:ILE:N	1:21:A:ILE:CA	1:21:A:ILE:C	2	11.9
(1,7)	1:7:A:PHE:C	1:8:A:LYS:N	1:8:A:LYS:CA	1:8:A:LYS:C	2	11.89
(1,89)	1:36:A:ASP:N	1:36:A:ASP:CA	1:36:A:ASP:C	1:37:A:ASP:N	8	11.88
(1,114)	1:65:A:GLU:N	1:65:A:GLU:CA	1:65:A:GLU:C	1:66:A:LYS:N	2	11.86
(1,14)	1:14:A:LYS:C	1:15:A:GLU:N	1:15:A:GLU:CA	1:15:A:GLU:C	8	11.84
(1,83)	1:30:A:LEU:N	1:30:A:LEU:CA	1:30:A:LEU:C	1:31:A:VAL:N	3	11.79
(1,89)	1:36:A:ASP:N	1:36:A:ASP:CA	1:36:A:ASP:C	1:37:A:ASP:N	2	11.77
(1,83)	1:30:A:LEU:N	1:30:A:LEU:CA	1:30:A:LEU:C	1:31:A:VAL:N	13	11.75
(1,110)	1:61:A:ARG:N	1:61:A:ARG:CA	1:61:A:ARG:C	1:62:A:ALA:N	1	11.74
(1,31)	1:34:A:TYR:C	1:35:A:TYR:N	1:35:A:TYR:CA	1:35:A:TYR:C	5	11.74
(1,103)	1:54:A:GLU:N	1:54:A:GLU:CA	1:54:A:GLU:C	1:55:A:LEU:N	9	11.69
(1,10)	1:10:A:LYS:C	1:11:A:GLY:N	1:11:A:GLY:CA	1:11:A:GLY:C	4	11.67
(1,21)	1:21:A:ILE:C	1:22:A:THR:N	1:22:A:THR:CA	1:22:A:THR:C	15	11.66
(1,14)	1:14:A:LYS:C	1:15:A:GLU:N	1:15:A:GLU:CA	1:15:A:GLU:C	10	11.64
(1,35)	1:40:A:LYS:C	1:41:A:THR:N	1:41:A:THR:CA	1:41:A:THR:C	10	11.63
(1,9)	1:9:A:TYR:C	1:10:A:LYS:N	1:10:A:LYS:CA	1:10:A:LYS:C	12	11.63
(1,5)	1:5:A:VAL:C	1:6:A:LYS:N	1:6:A:LYS:CA	1:6:A:LYS:C	12	11.63
(1,75)	1:19:A:SER:N	1:19:A:SER:CA	1:19:A:SER:C	1:20:A:LYS:N	3	11.62
(1,114)	1:65:A:GLU:N	1:65:A:GLU:CA	1:65:A:GLU:C	1:66:A:LYS:N	18	11.61
(1,90)	1:38:A:ASN:N	1:38:A:ASN:CA	1:38:A:ASN:C	1:39:A:GLY:N	15	11.61
(1,110)	1:61:A:ARG:N	1:61:A:ARG:CA	1:61:A:ARG:C	1:62:A:ALA:N	15	11.59
(1,56)	1:63:A:GLU:C	1:64:A:ARG:N	1:64:A:ARG:CA	1:64:A:ARG:C	17	11.57
(1,60)	1:4:A:LYS:N	1:4:A:LYS:CA	1:4:A:LYS:C	1:5:A:VAL:N	6	11.56
(1,71)	1:15:A:GLU:N	1:15:A:GLU:CA	1:15:A:GLU:C	1:16:A:VAL:N	11	11.55
(1,15)	1:15:A:GLU:C	1:16:A:VAL:N	1:16:A:VAL:CA	1:16:A:VAL:C	2	11.53
(1,2)	1:2:A:PRO:C	1:3:A:VAL:N	1:3:A:VAL:CA	1:3:A:VAL:C	4	11.53
(1,18)	1:18:A:THR:C	1:19:A:SER:N	1:19:A:SER:CA	1:19:A:SER:C	19	11.52
(1,113)	1:64:A:ARG:N	1:64:A:ARG:CA	1:64:A:ARG:C	1:65:A:GLU:N	11	11.51
(1,53)	1:60:A:ALA:C	1:61:A:ARG:N	1:61:A:ARG:CA	1:61:A:ARG:C	10	11.51
(1,54)	1:61:A:ARG:C	1:62:A:ALA:N	1:62:A:ALA:CA	1:62:A:ALA:C	20	11.48
(1,21)	1:21:A:ILE:C	1:22:A:THR:N	1:22:A:THR:CA	1:22:A:THR:C	16	11.48
(1,23)	1:23:A:HIS:C	1:24:A:VAL:N	1:24:A:VAL:CA	1:24:A:VAL:C	9	11.45
(1,67)	1:11:A:GLY:N	1:11:A:GLY:CA	1:11:A:GLY:C	1:12:A:GLU:N	20	11.43
(1,43)	1:50:A:ASP:C	1:51:A:ALA:N	1:51:A:ALA:CA	1:51:A:ALA:C	3	11.42
(1,69)	1:13:A:GLU:N	1:13:A:GLU:CA	1:13:A:GLU:C	1:14:A:LYS:N	14	11.38
(1,43)	1:50:A:ASP:C	1:51:A:ALA:N	1:51:A:ALA:CA	1:51:A:ALA:C	16	11.37
(1,78)	1:22:A:THR:N	1:22:A:THR:CA	1:22:A:THR:C	1:23:A:HIS:N	8	11.32
(1,54)	1:61:A:ARG:C	1:62:A:ALA:N	1:62:A:ALA:CA	1:62:A:ALA:C	4	11.24
(1,72)	1:16:A:VAL:N	1:16:A:VAL:CA	1:16:A:VAL:C	1:17:A:ASP:N	2	11.23
(1,15)	1:15:A:GLU:C	1:16:A:VAL:N	1:16:A:VAL:CA	1:16:A:VAL:C	19	11.22
(1,87)	1:34:A:TYR:N	1:34:A:TYR:CA	1:34:A:TYR:C	1:35:A:TYR:N	12	11.17
(1,36)	1:42:A:GLY:C	1:43:A:HIS:N	1:43:A:HIS:CA	1:43:A:HIS:C	7	11.12
(1,89)	1:36:A:ASP:N	1:36:A:ASP:CA	1:36:A:ASP:C	1:37:A:ASP:N	10	11.1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,22)	1:22:A:THR:C	1:23:A:HIS:N	1:23:A:HIS:CA	1:23:A:HIS:C	9	11.07
(1,85)	1:32:A:VAL:N	1:32:A:VAL:CA	1:32:A:VAL:C	1:33:A:PHE:N	16	11.04
(1,10)	1:10:A:LYS:C	1:11:A:GLY:N	1:11:A:GLY:CA	1:11:A:GLY:C	17	11.03
(1,90)	1:38:A:ASN:N	1:38:A:ASN:CA	1:38:A:ASN:C	1:39:A:GLY:N	5	11.0
(1,74)	1:18:A:THR:N	1:18:A:THR:CA	1:18:A:THR:C	1:19:A:SER:N	18	10.99
(1,67)	1:11:A:GLY:N	1:11:A:GLY:CA	1:11:A:GLY:C	1:12:A:GLU:N	2	10.99
(1,13)	1:13:A:GLU:C	1:14:A:LYS:N	1:14:A:LYS:CA	1:14:A:LYS:C	9	10.95
(1,89)	1:36:A:ASP:N	1:36:A:ASP:CA	1:36:A:ASP:C	1:37:A:ASP:N	17	10.94
(1,69)	1:13:A:GLU:N	1:13:A:GLU:CA	1:13:A:GLU:C	1:14:A:LYS:N	16	10.92
(1,36)	1:42:A:GLY:C	1:43:A:HIS:N	1:43:A:HIS:CA	1:43:A:HIS:C	14	10.92
(1,56)	1:63:A:GLU:C	1:64:A:ARG:N	1:64:A:ARG:CA	1:64:A:ARG:C	15	10.91
(1,25)	1:25:A:PHE:C	1:26:A:ARG:N	1:26:A:ARG:CA	1:26:A:ARG:C	11	10.91
(1,18)	1:18:A:THR:C	1:19:A:SER:N	1:19:A:SER:CA	1:19:A:SER:C	20	10.91
(1,71)	1:15:A:GLU:N	1:15:A:GLU:CA	1:15:A:GLU:C	1:16:A:VAL:N	9	10.88
(1,110)	1:61:A:ARG:N	1:61:A:ARG:CA	1:61:A:ARG:C	1:62:A:ALA:N	11	10.87
(1,73)	1:17:A:ASP:N	1:17:A:ASP:CA	1:17:A:ASP:C	1:18:A:THR:N	17	10.83
(1,46)	1:53:A:LYS:C	1:54:A:GLU:N	1:54:A:GLU:CA	1:54:A:GLU:C	20	10.82
(1,67)	1:11:A:GLY:N	1:11:A:GLY:CA	1:11:A:GLY:C	1:12:A:GLU:N	17	10.8
(1,2)	1:2:A:PRO:C	1:3:A:VAL:N	1:3:A:VAL:CA	1:3:A:VAL:C	6	10.8
(1,56)	1:63:A:GLU:C	1:64:A:ARG:N	1:64:A:ARG:CA	1:64:A:ARG:C	14	10.78
(1,74)	1:18:A:THR:N	1:18:A:THR:CA	1:18:A:THR:C	1:19:A:SER:N	4	10.75
(1,38)	1:45:A:LEU:C	1:46:A:VAL:N	1:46:A:VAL:CA	1:46:A:VAL:C	15	10.72
(1,36)	1:42:A:GLY:C	1:43:A:HIS:N	1:43:A:HIS:CA	1:43:A:HIS:C	13	10.72
(1,51)	1:58:A:MET:C	1:59:A:LEU:N	1:59:A:LEU:CA	1:59:A:LEU:C	19	10.66
(1,8)	1:8:A:LYS:C	1:9:A:TYR:N	1:9:A:TYR:CA	1:9:A:TYR:C	13	10.62
(1,64)	1:8:A:LYS:N	1:8:A:LYS:CA	1:8:A:LYS:C	1:9:A:TYR:N	1	10.56
(1,73)	1:17:A:ASP:N	1:17:A:ASP:CA	1:17:A:ASP:C	1:18:A:THR:N	11	10.53
(1,74)	1:18:A:THR:N	1:18:A:THR:CA	1:18:A:THR:C	1:19:A:SER:N	14	10.49
(1,7)	1:7:A:PHE:C	1:8:A:LYS:N	1:8:A:LYS:CA	1:8:A:LYS:C	4	10.49
(1,90)	1:38:A:ASN:N	1:38:A:ASN:CA	1:38:A:ASN:C	1:39:A:GLY:N	6	10.48
(1,18)	1:18:A:THR:C	1:19:A:SER:N	1:19:A:SER:CA	1:19:A:SER:C	14	10.46
(1,25)	1:25:A:PHE:C	1:26:A:ARG:N	1:26:A:ARG:CA	1:26:A:ARG:C	9	10.45
(1,43)	1:50:A:ASP:C	1:51:A:ALA:N	1:51:A:ALA:CA	1:51:A:ALA:C	7	10.42
(1,69)	1:13:A:GLU:N	1:13:A:GLU:CA	1:13:A:GLU:C	1:14:A:LYS:N	20	10.4
(1,56)	1:63:A:GLU:C	1:64:A:ARG:N	1:64:A:ARG:CA	1:64:A:ARG:C	3	10.4
(1,27)	1:30:A:LEU:C	1:31:A:VAL:N	1:31:A:VAL:CA	1:31:A:VAL:C	10	10.4
(1,22)	1:22:A:THR:C	1:23:A:HIS:N	1:23:A:HIS:CA	1:23:A:HIS:C	7	10.36
(1,61)	1:5:A:VAL:N	1:5:A:VAL:CA	1:5:A:VAL:C	1:6:A:LYS:N	12	10.35
(1,75)	1:19:A:SER:N	1:19:A:SER:CA	1:19:A:SER:C	1:20:A:LYS:N	16	10.34
(1,34)	1:39:A:GLY:C	1:40:A:LYS:N	1:40:A:LYS:CA	1:40:A:LYS:C	15	10.29
(1,110)	1:61:A:ARG:N	1:61:A:ARG:CA	1:61:A:ARG:C	1:62:A:ALA:N	5	10.27
(1,17)	1:17:A:ASP:C	1:18:A:THR:N	1:18:A:THR:CA	1:18:A:THR:C	1	10.18
(1,110)	1:61:A:ARG:N	1:61:A:ARG:CA	1:61:A:ARG:C	1:62:A:ALA:N	3	10.15
(1,28)	1:31:A:VAL:C	1:32:A:VAL:N	1:32:A:VAL:CA	1:32:A:VAL:C	6	10.13
(1,74)	1:18:A:THR:N	1:18:A:THR:CA	1:18:A:THR:C	1:19:A:SER:N	20	10.12
(1,60)	1:4:A:LYS:N	1:4:A:LYS:CA	1:4:A:LYS:C	1:5:A:VAL:N	11	10.11
(1,74)	1:18:A:THR:N	1:18:A:THR:CA	1:18:A:THR:C	1:19:A:SER:N	19	10.07
(1,70)	1:14:A:LYS:N	1:14:A:LYS:CA	1:14:A:LYS:C	1:15:A:GLU:N	15	10.07
(1,55)	1:62:A:ALA:C	1:63:A:GLU:N	1:63:A:GLU:CA	1:63:A:GLU:C	9	10.06
(1,29)	1:32:A:VAL:C	1:33:A:PHE:N	1:33:A:PHE:CA	1:33:A:PHE:C	16	10.03
(1,9)	1:9:A:TYR:C	1:10:A:LYS:N	1:10:A:LYS:CA	1:10:A:LYS:C	17	10.02

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,60)	1:4:A:LYS:N	1:4:A:LYS:CA	1:4:A:LYS:C	1:5:A:VAL:N	19	9.96
(1,114)	1:65:A:GLU:N	1:65:A:GLU:CA	1:65:A:GLU:C	1:66:A:LYS:N	17	9.95
(1,42)	1:49:A:LYS:C	1:50:A:ASP:N	1:50:A:ASP:CA	1:50:A:ASP:C	12	9.95
(1,74)	1:18:A:THR:N	1:18:A:THR:CA	1:18:A:THR:C	1:19:A:SER:N	12	9.94
(1,99)	1:50:A:ASP:N	1:50:A:ASP:CA	1:50:A:ASP:C	1:51:A:ALA:N	13	9.89
(1,58)	1:2:A:PRO:N	1:2:A:PRO:CA	1:2:A:PRO:C	1:3:A:VAL:N	9	9.86
(1,82)	1:26:A:ARG:N	1:26:A:ARG:CA	1:26:A:ARG:C	1:27:A:HIS:N	8	9.83
(1,2)	1:2:A:PRO:C	1:3:A:VAL:N	1:3:A:VAL:CA	1:3:A:VAL:C	1	9.82
(1,23)	1:23:A:HIS:C	1:24:A:VAL:N	1:24:A:VAL:CA	1:24:A:VAL:C	8	9.8
(1,87)	1:34:A:TYR:N	1:34:A:TYR:CA	1:34:A:TYR:C	1:35:A:TYR:N	7	9.79
(1,8)	1:8:A:LYS:C	1:9:A:TYR:N	1:9:A:TYR:CA	1:9:A:TYR:C	2	9.78
(1,15)	1:15:A:GLU:C	1:16:A:VAL:N	1:16:A:VAL:CA	1:16:A:VAL:C	9	9.76
(1,90)	1:38:A:ASN:N	1:38:A:ASN:CA	1:38:A:ASN:C	1:39:A:GLY:N	2	9.71
(1,113)	1:64:A:ARG:N	1:64:A:ARG:CA	1:64:A:ARG:C	1:65:A:GLU:N	4	9.69
(1,46)	1:53:A:LYS:C	1:54:A:GLU:N	1:54:A:GLU:CA	1:54:A:GLU:C	16	9.69
(1,65)	1:9:A:TYR:N	1:9:A:TYR:CA	1:9:A:TYR:C	1:10:A:LYS:N	12	9.62
(1,34)	1:39:A:GLY:C	1:40:A:LYS:N	1:40:A:LYS:CA	1:40:A:LYS:C	20	9.61
(1,10)	1:10:A:LYS:C	1:11:A:GLY:N	1:11:A:GLY:CA	1:11:A:GLY:C	1	9.51
(1,10)	1:10:A:LYS:C	1:11:A:GLY:N	1:11:A:GLY:CA	1:11:A:GLY:C	9	9.51
(1,73)	1:17:A:ASP:N	1:17:A:ASP:CA	1:17:A:ASP:C	1:18:A:THR:N	4	9.47
(1,14)	1:14:A:LYS:C	1:15:A:GLU:N	1:15:A:GLU:CA	1:15:A:GLU:C	1	9.46
(1,99)	1:50:A:ASP:N	1:50:A:ASP:CA	1:50:A:ASP:C	1:51:A:ALA:N	15	9.45
(1,88)	1:35:A:TYR:N	1:35:A:TYR:CA	1:35:A:TYR:C	1:36:A:ASP:N	19	9.41
(1,58)	1:2:A:PRO:N	1:2:A:PRO:CA	1:2:A:PRO:C	1:3:A:VAL:N	19	9.4
(1,2)	1:2:A:PRO:C	1:3:A:VAL:N	1:3:A:VAL:CA	1:3:A:VAL:C	15	9.38
(1,99)	1:50:A:ASP:N	1:50:A:ASP:CA	1:50:A:ASP:C	1:51:A:ALA:N	12	9.37
(1,70)	1:14:A:LYS:N	1:14:A:LYS:CA	1:14:A:LYS:C	1:15:A:GLU:N	14	9.37
(1,65)	1:9:A:TYR:N	1:9:A:TYR:CA	1:9:A:TYR:C	1:10:A:LYS:N	15	9.37
(1,21)	1:21:A:ILE:C	1:22:A:THR:N	1:22:A:THR:CA	1:22:A:THR:C	1	9.37
(1,11)	1:11:A:GLY:C	1:12:A:GLU:N	1:12:A:GLU:CA	1:12:A:GLU:C	9	9.37
(1,102)	1:53:A:LYS:N	1:53:A:LYS:CA	1:53:A:LYS:C	1:54:A:GLU:N	7	9.34
(1,15)	1:15:A:GLU:C	1:16:A:VAL:N	1:16:A:VAL:CA	1:16:A:VAL:C	8	9.34
(1,74)	1:18:A:THR:N	1:18:A:THR:CA	1:18:A:THR:C	1:19:A:SER:N	16	9.31
(1,97)	1:48:A:GLU:N	1:48:A:GLU:CA	1:48:A:GLU:C	1:49:A:LYS:N	17	9.3
(1,73)	1:17:A:ASP:N	1:17:A:ASP:CA	1:17:A:ASP:C	1:18:A:THR:N	1	9.24
(1,25)	1:25:A:PHE:C	1:26:A:ARG:N	1:26:A:ARG:CA	1:26:A:ARG:C	15	9.22
(1,68)	1:12:A:GLU:N	1:12:A:GLU:CA	1:12:A:GLU:C	1:13:A:GLU:N	6	9.21
(1,51)	1:58:A:MET:C	1:59:A:LEU:N	1:59:A:LEU:CA	1:59:A:LEU:C	7	9.18
(1,18)	1:18:A:THR:C	1:19:A:SER:N	1:19:A:SER:CA	1:19:A:SER:C	7	9.16
(1,109)	1:60:A:ALA:N	1:60:A:ALA:CA	1:60:A:ALA:C	1:61:A:ARG:N	5	9.13
(1,14)	1:14:A:LYS:C	1:15:A:GLU:N	1:15:A:GLU:CA	1:15:A:GLU:C	16	9.13
(1,98)	1:49:A:LYS:N	1:49:A:LYS:CA	1:49:A:LYS:C	1:50:A:ASP:N	1	9.0
(1,29)	1:32:A:VAL:C	1:33:A:PHE:N	1:33:A:PHE:CA	1:33:A:PHE:C	10	8.99
(1,74)	1:18:A:THR:N	1:18:A:THR:CA	1:18:A:THR:C	1:19:A:SER:N	7	8.96
(1,41)	1:48:A:GLU:C	1:49:A:LYS:N	1:49:A:LYS:CA	1:49:A:LYS:C	17	8.96
(1,11)	1:11:A:GLY:C	1:12:A:GLU:N	1:12:A:GLU:CA	1:12:A:GLU:C	4	8.96
(1,61)	1:5:A:VAL:N	1:5:A:VAL:CA	1:5:A:VAL:C	1:6:A:LYS:N	17	8.92
(1,77)	1:21:A:ILE:N	1:21:A:ILE:CA	1:21:A:ILE:C	1:22:A:THR:N	1	8.91
(1,51)	1:58:A:MET:C	1:59:A:LEU:N	1:59:A:LEU:CA	1:59:A:LEU:C	13	8.91
(1,50)	1:57:A:ASP:C	1:58:A:MET:N	1:58:A:MET:CA	1:58:A:MET:C	19	8.89
(1,46)	1:53:A:LYS:C	1:54:A:GLU:N	1:54:A:GLU:CA	1:54:A:GLU:C	18	8.85

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,114)	1:65:A:GLU:N	1:65:A:GLU:CA	1:65:A:GLU:C	1:66:A:LYS:N	11	8.83
(1,20)	1:20:A:LYS:C	1:21:A:ILE:N	1:21:A:ILE:CA	1:21:A:ILE:C	3	8.82
(1,36)	1:42:A:GLY:C	1:43:A:HIS:N	1:43:A:HIS:CA	1:43:A:HIS:C	3	8.81
(1,29)	1:32:A:VAL:C	1:33:A:PHE:N	1:33:A:PHE:CA	1:33:A:PHE:C	2	8.81
(1,81)	1:25:A:PHE:N	1:25:A:PHE:CA	1:25:A:PHE:C	1:26:A:ARG:N	15	8.8
(1,60)	1:4:A:LYS:N	1:4:A:LYS:CA	1:4:A:LYS:C	1:5:A:VAL:N	15	8.8
(1,56)	1:63:A:GLU:C	1:64:A:ARG:N	1:64:A:ARG:CA	1:64:A:ARG:C	10	8.77
(1,93)	1:43:A:HIS:N	1:43:A:HIS:CA	1:43:A:HIS:C	1:44:A:GLY:N	3	8.72
(1,82)	1:26:A:ARG:N	1:26:A:ARG:CA	1:26:A:ARG:C	1:27:A:HIS:N	15	8.71
(1,54)	1:61:A:ARG:C	1:62:A:ALA:N	1:62:A:ALA:CA	1:62:A:ALA:C	15	8.67
(1,46)	1:53:A:LYS:C	1:54:A:GLU:N	1:54:A:GLU:CA	1:54:A:GLU:C	11	8.64
(1,42)	1:49:A:LYS:C	1:50:A:ASP:N	1:50:A:ASP:CA	1:50:A:ASP:C	14	8.64
(1,32)	1:35:A:TYR:C	1:36:A:ASP:N	1:36:A:ASP:CA	1:36:A:ASP:C	18	8.64
(1,73)	1:17:A:ASP:N	1:17:A:ASP:CA	1:17:A:ASP:C	1:18:A:THR:N	12	8.63
(1,46)	1:53:A:LYS:C	1:54:A:GLU:N	1:54:A:GLU:CA	1:54:A:GLU:C	4	8.62
(1,13)	1:13:A:GLU:C	1:14:A:LYS:N	1:14:A:LYS:CA	1:14:A:LYS:C	20	8.59
(1,85)	1:32:A:VAL:N	1:32:A:VAL:CA	1:32:A:VAL:C	1:33:A:PHE:N	19	8.55
(1,60)	1:4:A:LYS:N	1:4:A:LYS:CA	1:4:A:LYS:C	1:5:A:VAL:N	5	8.53
(1,51)	1:58:A:MET:C	1:59:A:LEU:N	1:59:A:LEU:CA	1:59:A:LEU:C	14	8.53
(1,46)	1:53:A:LYS:C	1:54:A:GLU:N	1:54:A:GLU:CA	1:54:A:GLU:C	7	8.53
(1,67)	1:11:A:GLY:N	1:11:A:GLY:CA	1:11:A:GLY:C	1:12:A:GLU:N	4	8.52
(1,38)	1:45:A:LEU:C	1:46:A:VAL:N	1:46:A:VAL:CA	1:46:A:VAL:C	4	8.52
(1,61)	1:5:A:VAL:N	1:5:A:VAL:CA	1:5:A:VAL:C	1:6:A:LYS:N	20	8.5
(1,11)	1:11:A:GLY:C	1:12:A:GLU:N	1:12:A:GLU:CA	1:12:A:GLU:C	16	8.5
(1,15)	1:15:A:GLU:C	1:16:A:VAL:N	1:16:A:VAL:CA	1:16:A:VAL:C	10	8.48
(1,28)	1:31:A:VAL:C	1:32:A:VAL:N	1:32:A:VAL:CA	1:32:A:VAL:C	13	8.47
(1,56)	1:63:A:GLU:C	1:64:A:ARG:N	1:64:A:ARG:CA	1:64:A:ARG:C	18	8.46
(1,78)	1:22:A:THR:N	1:22:A:THR:CA	1:22:A:THR:C	1:23:A:HIS:N	17	8.41
(1,97)	1:48:A:GLU:N	1:48:A:GLU:CA	1:48:A:GLU:C	1:49:A:LYS:N	13	8.4
(1,71)	1:15:A:GLU:N	1:15:A:GLU:CA	1:15:A:GLU:C	1:16:A:VAL:N	17	8.4
(1,71)	1:15:A:GLU:N	1:15:A:GLU:CA	1:15:A:GLU:C	1:16:A:VAL:N	13	8.39
(1,107)	1:58:A:MET:N	1:58:A:MET:CA	1:58:A:MET:C	1:59:A:LEU:N	9	8.36
(1,77)	1:21:A:ILE:N	1:21:A:ILE:CA	1:21:A:ILE:C	1:22:A:THR:N	18	8.34
(1,2)	1:2:A:PRO:C	1:3:A:VAL:N	1:3:A:VAL:CA	1:3:A:VAL:C	5	8.34
(1,38)	1:45:A:LEU:C	1:46:A:VAL:N	1:46:A:VAL:CA	1:46:A:VAL:C	8	8.3
(1,113)	1:64:A:ARG:N	1:64:A:ARG:CA	1:64:A:ARG:C	1:65:A:GLU:N	7	8.26
(1,7)	1:7:A:PHE:C	1:8:A:LYS:N	1:8:A:LYS:CA	1:8:A:LYS:C	20	8.26
(1,67)	1:11:A:GLY:N	1:11:A:GLY:CA	1:11:A:GLY:C	1:12:A:GLU:N	18	8.24
(1,15)	1:15:A:GLU:C	1:16:A:VAL:N	1:16:A:VAL:CA	1:16:A:VAL:C	20	8.24
(1,10)	1:10:A:LYS:C	1:11:A:GLY:N	1:11:A:GLY:CA	1:11:A:GLY:C	20	8.24
(1,15)	1:15:A:GLU:C	1:16:A:VAL:N	1:16:A:VAL:CA	1:16:A:VAL:C	4	8.23
(1,60)	1:4:A:LYS:N	1:4:A:LYS:CA	1:4:A:LYS:C	1:5:A:VAL:N	9	8.2
(1,2)	1:2:A:PRO:C	1:3:A:VAL:N	1:3:A:VAL:CA	1:3:A:VAL:C	16	8.18
(1,10)	1:10:A:LYS:C	1:11:A:GLY:N	1:11:A:GLY:CA	1:11:A:GLY:C	12	8.17
(1,60)	1:4:A:LYS:N	1:4:A:LYS:CA	1:4:A:LYS:C	1:5:A:VAL:N	14	8.16
(1,61)	1:5:A:VAL:N	1:5:A:VAL:CA	1:5:A:VAL:C	1:6:A:LYS:N	4	8.14
(1,73)	1:17:A:ASP:N	1:17:A:ASP:CA	1:17:A:ASP:C	1:18:A:THR:N	6	8.09
(1,84)	1:31:A:VAL:N	1:31:A:VAL:CA	1:31:A:VAL:C	1:32:A:VAL:N	9	8.07
(1,38)	1:45:A:LEU:C	1:46:A:VAL:N	1:46:A:VAL:CA	1:46:A:VAL:C	13	8.06
(1,114)	1:65:A:GLU:N	1:65:A:GLU:CA	1:65:A:GLU:C	1:66:A:LYS:N	16	8.05
(1,56)	1:63:A:GLU:C	1:64:A:ARG:N	1:64:A:ARG:CA	1:64:A:ARG:C	13	8.04

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,22)	1:22:A:THR:C	1:23:A:HIS:N	1:23:A:HIS:CA	1:23:A:HIS:C	4	8.02
(1,8)	1:8:A:LYS:C	1:9:A:TYR:N	1:9:A:TYR:CA	1:9:A:TYR:C	3	7.98
(1,50)	1:57:A:ASP:C	1:58:A:MET:N	1:58:A:MET:CA	1:58:A:MET:C	10	7.97
(1,63)	1:7:A:PHE:N	1:7:A:PHE:CA	1:7:A:PHE:C	1:8:A:LYS:N	4	7.96
(1,10)	1:10:A:LYS:C	1:11:A:GLY:N	1:11:A:GLY:CA	1:11:A:GLY:C	14	7.94
(1,113)	1:64:A:ARG:N	1:64:A:ARG:CA	1:64:A:ARG:C	1:65:A:GLU:N	13	7.93
(1,103)	1:54:A:GLU:N	1:54:A:GLU:CA	1:54:A:GLU:C	1:55:A:LEU:N	6	7.89
(1,51)	1:58:A:MET:C	1:59:A:LEU:N	1:59:A:LEU:CA	1:59:A:LEU:C	17	7.89
(1,29)	1:32:A:VAL:C	1:33:A:PHE:N	1:33:A:PHE:CA	1:33:A:PHE:C	4	7.89
(1,23)	1:23:A:HIS:C	1:24:A:VAL:N	1:24:A:VAL:CA	1:24:A:VAL:C	1	7.89
(1,74)	1:18:A:THR:N	1:18:A:THR:CA	1:18:A:THR:C	1:19:A:SER:N	10	7.85
(1,65)	1:9:A:TYR:N	1:9:A:TYR:CA	1:9:A:TYR:C	1:10:A:LYS:N	19	7.85
(1,51)	1:58:A:MET:C	1:59:A:LEU:N	1:59:A:LEU:CA	1:59:A:LEU:C	12	7.85
(1,50)	1:57:A:ASP:C	1:58:A:MET:N	1:58:A:MET:CA	1:58:A:MET:C	12	7.81
(1,85)	1:32:A:VAL:N	1:32:A:VAL:CA	1:32:A:VAL:C	1:33:A:PHE:N	2	7.8
(1,72)	1:16:A:VAL:N	1:16:A:VAL:CA	1:16:A:VAL:C	1:17:A:ASP:N	7	7.8
(1,10)	1:10:A:LYS:C	1:11:A:GLY:N	1:11:A:GLY:CA	1:11:A:GLY:C	15	7.79
(1,71)	1:15:A:GLU:N	1:15:A:GLU:CA	1:15:A:GLU:C	1:16:A:VAL:N	12	7.78
(1,18)	1:18:A:THR:C	1:19:A:SER:N	1:19:A:SER:CA	1:19:A:SER:C	13	7.77
(1,28)	1:31:A:VAL:C	1:32:A:VAL:N	1:32:A:VAL:CA	1:32:A:VAL:C	16	7.76
(1,42)	1:49:A:LYS:C	1:50:A:ASP:N	1:50:A:ASP:CA	1:50:A:ASP:C	1	7.74
(1,67)	1:11:A:GLY:N	1:11:A:GLY:CA	1:11:A:GLY:C	1:12:A:GLU:N	9	7.71
(1,43)	1:50:A:ASP:C	1:51:A:ALA:N	1:51:A:ALA:CA	1:51:A:ALA:C	18	7.7
(1,50)	1:57:A:ASP:C	1:58:A:MET:N	1:58:A:MET:CA	1:58:A:MET:C	1	7.67
(1,56)	1:63:A:GLU:C	1:64:A:ARG:N	1:64:A:ARG:CA	1:64:A:ARG:C	20	7.66
(1,85)	1:32:A:VAL:N	1:32:A:VAL:CA	1:32:A:VAL:C	1:33:A:PHE:N	20	7.63
(1,78)	1:22:A:THR:N	1:22:A:THR:CA	1:22:A:THR:C	1:23:A:HIS:N	18	7.63
(1,57)	1:64:A:ARG:C	1:65:A:GLU:N	1:65:A:GLU:CA	1:65:A:GLU:C	12	7.62
(1,20)	1:20:A:LYS:C	1:21:A:ILE:N	1:21:A:ILE:CA	1:21:A:ILE:C	1	7.6
(1,14)	1:14:A:LYS:C	1:15:A:GLU:N	1:15:A:GLU:CA	1:15:A:GLU:C	11	7.6
(1,113)	1:64:A:ARG:N	1:64:A:ARG:CA	1:64:A:ARG:C	1:65:A:GLU:N	15	7.59
(1,89)	1:36:A:ASP:N	1:36:A:ASP:CA	1:36:A:ASP:C	1:37:A:ASP:N	11	7.55
(1,33)	1:37:A:ASP:C	1:38:A:ASN:N	1:38:A:ASN:CA	1:38:A:ASN:C	19	7.54
(1,11)	1:11:A:GLY:C	1:12:A:GLU:N	1:12:A:GLU:CA	1:12:A:GLU:C	14	7.54
(1,112)	1:63:A:GLU:N	1:63:A:GLU:CA	1:63:A:GLU:C	1:64:A:ARG:N	12	7.53
(1,54)	1:61:A:ARG:C	1:62:A:ALA:N	1:62:A:ALA:CA	1:62:A:ALA:C	11	7.53
(1,87)	1:34:A:TYR:N	1:34:A:TYR:CA	1:34:A:TYR:C	1:35:A:TYR:N	18	7.52
(1,76)	1:20:A:LYS:N	1:20:A:LYS:CA	1:20:A:LYS:C	1:21:A:ILE:N	1	7.52
(1,65)	1:9:A:TYR:N	1:9:A:TYR:CA	1:9:A:TYR:C	1:10:A:LYS:N	20	7.52
(1,114)	1:65:A:GLU:N	1:65:A:GLU:CA	1:65:A:GLU:C	1:66:A:LYS:N	4	7.49
(1,40)	1:47:A:PRO:C	1:48:A:GLU:N	1:48:A:GLU:CA	1:48:A:GLU:C	16	7.48
(1,10)	1:10:A:LYS:C	1:11:A:GLY:N	1:11:A:GLY:CA	1:11:A:GLY:C	10	7.48
(1,63)	1:7:A:PHE:N	1:7:A:PHE:CA	1:7:A:PHE:C	1:8:A:LYS:N	19	7.47
(1,74)	1:18:A:THR:N	1:18:A:THR:CA	1:18:A:THR:C	1:19:A:SER:N	6	7.46
(1,73)	1:17:A:ASP:N	1:17:A:ASP:CA	1:17:A:ASP:C	1:18:A:THR:N	15	7.41
(1,51)	1:58:A:MET:C	1:59:A:LEU:N	1:59:A:LEU:CA	1:59:A:LEU:C	3	7.41
(1,36)	1:42:A:GLY:C	1:43:A:HIS:N	1:43:A:HIS:CA	1:43:A:HIS:C	4	7.41
(1,64)	1:8:A:LYS:N	1:8:A:LYS:CA	1:8:A:LYS:C	1:9:A:TYR:N	16	7.4
(1,38)	1:45:A:LEU:C	1:46:A:VAL:N	1:46:A:VAL:CA	1:46:A:VAL:C	10	7.39
(1,18)	1:18:A:THR:C	1:19:A:SER:N	1:19:A:SER:CA	1:19:A:SER:C	6	7.39
(1,89)	1:36:A:ASP:N	1:36:A:ASP:CA	1:36:A:ASP:C	1:37:A:ASP:N	3	7.35

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,60)	1:4:A:LYS:N	1:4:A:LYS:CA	1:4:A:LYS:C	1:5:A:VAL:N	18	7.34
(1,89)	1:36:A:ASP:N	1:36:A:ASP:CA	1:36:A:ASP:C	1:37:A:ASP:N	13	7.32
(1,19)	1:19:A:SER:C	1:20:A:LYS:N	1:20:A:LYS:CA	1:20:A:LYS:C	14	7.31
(1,81)	1:25:A:PHE:N	1:25:A:PHE:CA	1:25:A:PHE:C	1:26:A:ARG:N	11	7.3
(1,110)	1:61:A:ARG:N	1:61:A:ARG:CA	1:61:A:ARG:C	1:62:A:ALA:N	19	7.28
(1,103)	1:54:A:GLU:N	1:54:A:GLU:CA	1:54:A:GLU:C	1:55:A:LEU:N	3	7.28
(1,29)	1:32:A:VAL:C	1:33:A:PHE:N	1:33:A:PHE:CA	1:33:A:PHE:C	18	7.28
(1,11)	1:11:A:GLY:C	1:12:A:GLU:N	1:12:A:GLU:CA	1:12:A:GLU:C	3	7.28
(1,90)	1:38:A:ASN:N	1:38:A:ASN:CA	1:38:A:ASN:C	1:39:A:GLY:N	3	7.26
(1,50)	1:57:A:ASP:C	1:58:A:MET:N	1:58:A:MET:CA	1:58:A:MET:C	17	7.25
(1,48)	1:55:A:LEU:C	1:56:A:LEU:N	1:56:A:LEU:CA	1:56:A:LEU:C	14	7.23
(1,113)	1:64:A:ARG:N	1:64:A:ARG:CA	1:64:A:ARG:C	1:65:A:GLU:N	1	7.22
(1,85)	1:32:A:VAL:N	1:32:A:VAL:CA	1:32:A:VAL:C	1:33:A:PHE:N	4	7.22
(1,22)	1:22:A:THR:C	1:23:A:HIS:N	1:23:A:HIS:CA	1:23:A:HIS:C	18	7.21
(1,112)	1:63:A:GLU:N	1:63:A:GLU:CA	1:63:A:GLU:C	1:64:A:ARG:N	7	7.2
(1,105)	1:56:A:LEU:N	1:56:A:LEU:CA	1:56:A:LEU:C	1:57:A:ASP:N	1	7.16
(1,40)	1:47:A:PRO:C	1:48:A:GLU:N	1:48:A:GLU:CA	1:48:A:GLU:C	11	7.12
(1,9)	1:9:A:TYR:C	1:10:A:LYS:N	1:10:A:LYS:CA	1:10:A:LYS:C	5	7.09
(1,55)	1:62:A:ALA:C	1:63:A:GLU:N	1:63:A:GLU:CA	1:63:A:GLU:C	7	7.08
(1,103)	1:54:A:GLU:N	1:54:A:GLU:CA	1:54:A:GLU:C	1:55:A:LEU:N	18	7.06
(1,69)	1:13:A:GLU:N	1:13:A:GLU:CA	1:13:A:GLU:C	1:14:A:LYS:N	9	7.05
(1,51)	1:58:A:MET:C	1:59:A:LEU:N	1:59:A:LEU:CA	1:59:A:LEU:C	6	7.05
(1,110)	1:61:A:ARG:N	1:61:A:ARG:CA	1:61:A:ARG:C	1:62:A:ALA:N	7	7.04
(1,58)	1:2:A:PRO:N	1:2:A:PRO:CA	1:2:A:PRO:C	1:3:A:VAL:N	10	7.04
(1,40)	1:47:A:PRO:C	1:48:A:GLU:N	1:48:A:GLU:CA	1:48:A:GLU:C	19	7.03
(1,19)	1:19:A:SER:C	1:20:A:LYS:N	1:20:A:LYS:CA	1:20:A:LYS:C	6	7.03
(1,51)	1:58:A:MET:C	1:59:A:LEU:N	1:59:A:LEU:CA	1:59:A:LEU:C	2	7.01
(1,77)	1:21:A:ILE:N	1:21:A:ILE:CA	1:21:A:ILE:C	1:22:A:THR:N	16	6.98
(1,2)	1:2:A:PRO:C	1:3:A:VAL:N	1:3:A:VAL:CA	1:3:A:VAL:C	18	6.98
(1,63)	1:7:A:PHE:N	1:7:A:PHE:CA	1:7:A:PHE:C	1:8:A:LYS:N	7	6.95
(1,46)	1:53:A:LYS:C	1:54:A:GLU:N	1:54:A:GLU:CA	1:54:A:GLU:C	1	6.95
(1,70)	1:14:A:LYS:N	1:14:A:LYS:CA	1:14:A:LYS:C	1:15:A:GLU:N	11	6.94
(1,55)	1:62:A:ALA:C	1:63:A:GLU:N	1:63:A:GLU:CA	1:63:A:GLU:C	5	6.94
(1,14)	1:14:A:LYS:C	1:15:A:GLU:N	1:15:A:GLU:CA	1:15:A:GLU:C	19	6.9
(1,85)	1:32:A:VAL:N	1:32:A:VAL:CA	1:32:A:VAL:C	1:33:A:PHE:N	18	6.89
(1,84)	1:31:A:VAL:N	1:31:A:VAL:CA	1:31:A:VAL:C	1:32:A:VAL:N	3	6.86
(1,48)	1:55:A:LEU:C	1:56:A:LEU:N	1:56:A:LEU:CA	1:56:A:LEU:C	17	6.84
(1,110)	1:61:A:ARG:N	1:61:A:ARG:CA	1:61:A:ARG:C	1:62:A:ALA:N	9	6.83
(1,73)	1:17:A:ASP:N	1:17:A:ASP:CA	1:17:A:ASP:C	1:18:A:THR:N	16	6.81
(1,34)	1:39:A:GLY:C	1:40:A:LYS:N	1:40:A:LYS:CA	1:40:A:LYS:C	18	6.78
(1,65)	1:9:A:TYR:N	1:9:A:TYR:CA	1:9:A:TYR:C	1:10:A:LYS:N	3	6.74
(1,93)	1:43:A:HIS:N	1:43:A:HIS:CA	1:43:A:HIS:C	1:44:A:GLY:N	7	6.71
(1,32)	1:35:A:TYR:C	1:36:A:ASP:N	1:36:A:ASP:CA	1:36:A:ASP:C	6	6.71
(1,102)	1:53:A:LYS:N	1:53:A:LYS:CA	1:53:A:LYS:C	1:54:A:GLU:N	11	6.7
(1,102)	1:53:A:LYS:N	1:53:A:LYS:CA	1:53:A:LYS:C	1:54:A:GLU:N	20	6.69
(1,55)	1:62:A:ALA:C	1:63:A:GLU:N	1:63:A:GLU:CA	1:63:A:GLU:C	18	6.69
(1,6)	1:6:A:LYS:C	1:7:A:PHE:N	1:7:A:PHE:CA	1:7:A:PHE:C	8	6.69
(1,61)	1:5:A:VAL:N	1:5:A:VAL:CA	1:5:A:VAL:C	1:6:A:LYS:N	15	6.68
(1,60)	1:4:A:LYS:N	1:4:A:LYS:CA	1:4:A:LYS:C	1:5:A:VAL:N	2	6.68
(1,55)	1:62:A:ALA:C	1:63:A:GLU:N	1:63:A:GLU:CA	1:63:A:GLU:C	12	6.67
(1,20)	1:20:A:LYS:C	1:21:A:ILE:N	1:21:A:ILE:CA	1:21:A:ILE:C	18	6.67

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,72)	1:16:A:VAL:N	1:16:A:VAL:CA	1:16:A:VAL:C	1:17:A:ASP:N	8	6.65
(1,83)	1:30:A:LEU:N	1:30:A:LEU:CA	1:30:A:LEU:C	1:31:A:VAL:N	18	6.63
(1,75)	1:19:A:SER:N	1:19:A:SER:CA	1:19:A:SER:C	1:20:A:LYS:N	4	6.62
(1,56)	1:63:A:GLU:C	1:64:A:ARG:N	1:64:A:ARG:CA	1:64:A:ARG:C	9	6.62
(1,53)	1:60:A:ALA:C	1:61:A:ARG:N	1:61:A:ARG:CA	1:61:A:ARG:C	11	6.62
(1,112)	1:63:A:GLU:N	1:63:A:GLU:CA	1:63:A:GLU:C	1:64:A:ARG:N	2	6.57
(1,6)	1:6:A:LYS:C	1:7:A:PHE:N	1:7:A:PHE:CA	1:7:A:PHE:C	3	6.55
(1,83)	1:30:A:LEU:N	1:30:A:LEU:CA	1:30:A:LEU:C	1:31:A:VAL:N	11	6.52
(1,69)	1:13:A:GLU:N	1:13:A:GLU:CA	1:13:A:GLU:C	1:14:A:LYS:N	6	6.52
(1,6)	1:6:A:LYS:C	1:7:A:PHE:N	1:7:A:PHE:CA	1:7:A:PHE:C	6	6.52
(1,97)	1:48:A:GLU:N	1:48:A:GLU:CA	1:48:A:GLU:C	1:49:A:LYS:N	6	6.51
(1,56)	1:63:A:GLU:C	1:64:A:ARG:N	1:64:A:ARG:CA	1:64:A:ARG:C	12	6.51
(1,102)	1:53:A:LYS:N	1:53:A:LYS:CA	1:53:A:LYS:C	1:54:A:GLU:N	1	6.5
(1,102)	1:53:A:LYS:N	1:53:A:LYS:CA	1:53:A:LYS:C	1:54:A:GLU:N	14	6.5
(1,40)	1:47:A:PRO:C	1:48:A:GLU:N	1:48:A:GLU:CA	1:48:A:GLU:C	2	6.5
(1,63)	1:7:A:PHE:N	1:7:A:PHE:CA	1:7:A:PHE:C	1:8:A:LYS:N	16	6.49
(1,29)	1:32:A:VAL:C	1:33:A:PHE:N	1:33:A:PHE:CA	1:33:A:PHE:C	19	6.47
(1,72)	1:16:A:VAL:N	1:16:A:VAL:CA	1:16:A:VAL:C	1:17:A:ASP:N	9	6.45
(1,33)	1:37:A:ASP:C	1:38:A:ASN:N	1:38:A:ASN:CA	1:38:A:ASN:C	20	6.43
(1,19)	1:19:A:SER:C	1:20:A:LYS:N	1:20:A:LYS:CA	1:20:A:LYS:C	2	6.43
(1,61)	1:5:A:VAL:N	1:5:A:VAL:CA	1:5:A:VAL:C	1:6:A:LYS:N	8	6.41
(1,70)	1:14:A:LYS:N	1:14:A:LYS:CA	1:14:A:LYS:C	1:15:A:GLU:N	13	6.39
(1,69)	1:13:A:GLU:N	1:13:A:GLU:CA	1:13:A:GLU:C	1:14:A:LYS:N	11	6.39
(1,8)	1:8:A:LYS:C	1:9:A:TYR:N	1:9:A:TYR:CA	1:9:A:TYR:C	16	6.39
(1,41)	1:48:A:GLU:C	1:49:A:LYS:N	1:49:A:LYS:CA	1:49:A:LYS:C	5	6.35
(1,9)	1:9:A:TYR:C	1:10:A:LYS:N	1:10:A:LYS:CA	1:10:A:LYS:C	3	6.34
(1,102)	1:53:A:LYS:N	1:53:A:LYS:CA	1:53:A:LYS:C	1:54:A:GLU:N	9	6.26
(1,102)	1:53:A:LYS:N	1:53:A:LYS:CA	1:53:A:LYS:C	1:54:A:GLU:N	17	6.26
(1,6)	1:6:A:LYS:C	1:7:A:PHE:N	1:7:A:PHE:CA	1:7:A:PHE:C	18	6.22
(1,98)	1:49:A:LYS:N	1:49:A:LYS:CA	1:49:A:LYS:C	1:50:A:ASP:N	9	6.21
(1,19)	1:19:A:SER:C	1:20:A:LYS:N	1:20:A:LYS:CA	1:20:A:LYS:C	9	6.21
(1,46)	1:53:A:LYS:C	1:54:A:GLU:N	1:54:A:GLU:CA	1:54:A:GLU:C	13	6.2
(1,51)	1:58:A:MET:C	1:59:A:LEU:N	1:59:A:LEU:CA	1:59:A:LEU:C	4	6.19
(1,9)	1:9:A:TYR:C	1:10:A:LYS:N	1:10:A:LYS:CA	1:10:A:LYS:C	4	6.15
(1,99)	1:50:A:ASP:N	1:50:A:ASP:CA	1:50:A:ASP:C	1:51:A:ALA:N	19	6.13
(1,51)	1:58:A:MET:C	1:59:A:LEU:N	1:59:A:LEU:CA	1:59:A:LEU:C	10	6.13
(1,2)	1:2:A:PRO:C	1:3:A:VAL:N	1:3:A:VAL:CA	1:3:A:VAL:C	10	6.11
(1,13)	1:13:A:GLU:C	1:14:A:LYS:N	1:14:A:LYS:CA	1:14:A:LYS:C	3	6.07
(1,85)	1:32:A:VAL:N	1:32:A:VAL:CA	1:32:A:VAL:C	1:33:A:PHE:N	10	6.06
(1,109)	1:60:A:ALA:N	1:60:A:ALA:CA	1:60:A:ALA:C	1:61:A:ARG:N	12	6.05
(1,40)	1:47:A:PRO:C	1:48:A:GLU:N	1:48:A:GLU:CA	1:48:A:GLU:C	9	6.05
(1,110)	1:61:A:ARG:N	1:61:A:ARG:CA	1:61:A:ARG:C	1:62:A:ALA:N	4	6.03
(1,84)	1:31:A:VAL:N	1:31:A:VAL:CA	1:31:A:VAL:C	1:32:A:VAL:N	13	6.03
(1,51)	1:58:A:MET:C	1:59:A:LEU:N	1:59:A:LEU:CA	1:59:A:LEU:C	5	6.03
(1,21)	1:21:A:ILE:C	1:22:A:THR:N	1:22:A:THR:CA	1:22:A:THR:C	8	5.98
(1,26)	1:29:A:LYS:C	1:30:A:LEU:N	1:30:A:LEU:CA	1:30:A:LEU:C	17	5.97
(1,99)	1:50:A:ASP:N	1:50:A:ASP:CA	1:50:A:ASP:C	1:51:A:ALA:N	7	5.93
(1,113)	1:64:A:ARG:N	1:64:A:ARG:CA	1:64:A:ARG:C	1:65:A:GLU:N	18	5.89
(1,109)	1:60:A:ALA:N	1:60:A:ALA:CA	1:60:A:ALA:C	1:61:A:ARG:N	9	5.89
(1,83)	1:30:A:LEU:N	1:30:A:LEU:CA	1:30:A:LEU:C	1:31:A:VAL:N	6	5.89
(1,97)	1:48:A:GLU:N	1:48:A:GLU:CA	1:48:A:GLU:C	1:49:A:LYS:N	4	5.88

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,6)	1:6:A:LYS:C	1:7:A:PHE:N	1:7:A:PHE:CA	1:7:A:PHE:C	14	5.87
(1,99)	1:50:A:ASP:N	1:50:A:ASP:CA	1:50:A:ASP:C	1:51:A:ALA:N	11	5.86
(1,85)	1:32:A:VAL:N	1:32:A:VAL:CA	1:32:A:VAL:C	1:33:A:PHE:N	14	5.85
(1,97)	1:48:A:GLU:N	1:48:A:GLU:CA	1:48:A:GLU:C	1:49:A:LYS:N	5	5.84
(1,64)	1:8:A:LYS:N	1:8:A:LYS:CA	1:8:A:LYS:C	1:9:A:TYR:N	14	5.84
(1,63)	1:7:A:PHE:N	1:7:A:PHE:CA	1:7:A:PHE:C	1:8:A:LYS:N	14	5.83
(1,31)	1:34:A:TYR:C	1:35:A:TYR:N	1:35:A:TYR:CA	1:35:A:TYR:C	10	5.82
(1,42)	1:49:A:LYS:C	1:50:A:ASP:N	1:50:A:ASP:CA	1:50:A:ASP:C	2	5.8
(1,108)	1:59:A:LEU:N	1:59:A:LEU:CA	1:59:A:LEU:C	1:60:A:ALA:N	1	5.79
(1,99)	1:50:A:ASP:N	1:50:A:ASP:CA	1:50:A:ASP:C	1:51:A:ALA:N	18	5.77
(1,42)	1:49:A:LYS:C	1:50:A:ASP:N	1:50:A:ASP:CA	1:50:A:ASP:C	15	5.77
(1,111)	1:62:A:ALA:N	1:62:A:ALA:CA	1:62:A:ALA:C	1:63:A:GLU:N	14	5.76
(1,29)	1:32:A:VAL:C	1:33:A:PHE:N	1:33:A:PHE:CA	1:33:A:PHE:C	3	5.76
(1,85)	1:32:A:VAL:N	1:32:A:VAL:CA	1:32:A:VAL:C	1:33:A:PHE:N	17	5.75
(1,78)	1:22:A:THR:N	1:22:A:THR:CA	1:22:A:THR:C	1:23:A:HIS:N	3	5.75
(1,66)	1:10:A:LYS:N	1:10:A:LYS:CA	1:10:A:LYS:C	1:11:A:GLY:N	11	5.72
(1,65)	1:9:A:TYR:N	1:9:A:TYR:CA	1:9:A:TYR:C	1:10:A:LYS:N	17	5.71
(1,109)	1:60:A:ALA:N	1:60:A:ALA:CA	1:60:A:ALA:C	1:61:A:ARG:N	4	5.68
(1,75)	1:19:A:SER:N	1:19:A:SER:CA	1:19:A:SER:C	1:20:A:LYS:N	9	5.68
(1,39)	1:46:A:VAL:C	1:47:A:PRO:N	1:47:A:PRO:CA	1:47:A:PRO:C	5	5.64
(1,22)	1:22:A:THR:C	1:23:A:HIS:N	1:23:A:HIS:CA	1:23:A:HIS:C	6	5.63
(1,10)	1:10:A:LYS:C	1:11:A:GLY:N	1:11:A:GLY:CA	1:11:A:GLY:C	13	5.63
(1,44)	1:51:A:ALA:C	1:52:A:PRO:N	1:52:A:PRO:CA	1:52:A:PRO:C	15	5.62
(1,93)	1:43:A:HIS:N	1:43:A:HIS:CA	1:43:A:HIS:C	1:44:A:GLY:N	4	5.61
(1,54)	1:61:A:ARG:C	1:62:A:ALA:N	1:62:A:ALA:CA	1:62:A:ALA:C	8	5.61
(1,1)	1:1:A:GLY:C	1:2:A:PRO:N	1:2:A:PRO:CA	1:2:A:PRO:C	16	5.59
(1,106)	1:57:A:ASP:N	1:57:A:ASP:CA	1:57:A:ASP:C	1:58:A:MET:N	13	5.56
(1,46)	1:53:A:LYS:C	1:54:A:GLU:N	1:54:A:GLU:CA	1:54:A:GLU:C	15	5.56
(1,89)	1:36:A:ASP:N	1:36:A:ASP:CA	1:36:A:ASP:C	1:37:A:ASP:N	5	5.54
(1,43)	1:50:A:ASP:C	1:51:A:ALA:N	1:51:A:ALA:CA	1:51:A:ALA:C	4	5.54
(1,69)	1:13:A:GLU:N	1:13:A:GLU:CA	1:13:A:GLU:C	1:14:A:LYS:N	13	5.53
(1,64)	1:8:A:LYS:N	1:8:A:LYS:CA	1:8:A:LYS:C	1:9:A:TYR:N	3	5.52
(1,83)	1:30:A:LEU:N	1:30:A:LEU:CA	1:30:A:LEU:C	1:31:A:VAL:N	12	5.51
(1,65)	1:9:A:TYR:N	1:9:A:TYR:CA	1:9:A:TYR:C	1:10:A:LYS:N	14	5.5
(1,43)	1:50:A:ASP:C	1:51:A:ALA:N	1:51:A:ALA:CA	1:51:A:ALA:C	6	5.5
(1,13)	1:13:A:GLU:C	1:14:A:LYS:N	1:14:A:LYS:CA	1:14:A:LYS:C	14	5.5
(1,51)	1:58:A:MET:C	1:59:A:LEU:N	1:59:A:LEU:CA	1:59:A:LEU:C	20	5.49
(1,15)	1:15:A:GLU:C	1:16:A:VAL:N	1:16:A:VAL:CA	1:16:A:VAL:C	7	5.48
(1,106)	1:57:A:ASP:N	1:57:A:ASP:CA	1:57:A:ASP:C	1:58:A:MET:N	14	5.45
(1,93)	1:43:A:HIS:N	1:43:A:HIS:CA	1:43:A:HIS:C	1:44:A:GLY:N	16	5.45
(1,70)	1:14:A:LYS:N	1:14:A:LYS:CA	1:14:A:LYS:C	1:15:A:GLU:N	19	5.45
(1,42)	1:49:A:LYS:C	1:50:A:ASP:N	1:50:A:ASP:CA	1:50:A:ASP:C	10	5.45
(1,110)	1:61:A:ARG:N	1:61:A:ARG:CA	1:61:A:ARG:C	1:62:A:ALA:N	10	5.43
(1,85)	1:32:A:VAL:N	1:32:A:VAL:CA	1:32:A:VAL:C	1:33:A:PHE:N	6	5.42
(1,43)	1:50:A:ASP:C	1:51:A:ALA:N	1:51:A:ALA:CA	1:51:A:ALA:C	10	5.37
(1,13)	1:13:A:GLU:C	1:14:A:LYS:N	1:14:A:LYS:CA	1:14:A:LYS:C	15	5.35
(1,87)	1:34:A:TYR:N	1:34:A:TYR:CA	1:34:A:TYR:C	1:35:A:TYR:N	1	5.33
(1,18)	1:18:A:THR:C	1:19:A:SER:N	1:19:A:SER:CA	1:19:A:SER:C	9	5.33
(1,97)	1:48:A:GLU:N	1:48:A:GLU:CA	1:48:A:GLU:C	1:49:A:LYS:N	10	5.32
(1,77)	1:21:A:ILE:N	1:21:A:ILE:CA	1:21:A:ILE:C	1:22:A:THR:N	10	5.31
(1,89)	1:36:A:ASP:N	1:36:A:ASP:CA	1:36:A:ASP:C	1:37:A:ASP:N	20	5.3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,29)	1:32:A:VAL:C	1:33:A:PHE:N	1:33:A:PHE:CA	1:33:A:PHE:C	17	5.3
(1,3)	1:3:A:VAL:C	1:4:A:LYS:N	1:4:A:LYS:CA	1:4:A:LYS:C	16	5.25
(1,109)	1:60:A:ALA:N	1:60:A:ALA:CA	1:60:A:ALA:C	1:61:A:ARG:N	1	5.24
(1,49)	1:56:A:LEU:C	1:57:A:ASP:N	1:57:A:ASP:CA	1:57:A:ASP:C	1	5.24
(1,22)	1:22:A:THR:C	1:23:A:HIS:N	1:23:A:HIS:CA	1:23:A:HIS:C	11	5.24
(1,98)	1:49:A:LYS:N	1:49:A:LYS:CA	1:49:A:LYS:C	1:50:A:ASP:N	18	5.23
(1,93)	1:43:A:HIS:N	1:43:A:HIS:CA	1:43:A:HIS:C	1:44:A:GLY:N	11	5.19
(1,78)	1:22:A:THR:N	1:22:A:THR:CA	1:22:A:THR:C	1:23:A:HIS:N	4	5.19
(1,3)	1:3:A:VAL:C	1:4:A:LYS:N	1:4:A:LYS:CA	1:4:A:LYS:C	5	5.19
(1,33)	1:37:A:ASP:C	1:38:A:ASN:N	1:38:A:ASN:CA	1:38:A:ASN:C	8	5.15
(1,55)	1:62:A:ALA:C	1:63:A:GLU:N	1:63:A:GLU:CA	1:63:A:GLU:C	8	5.14
(1,38)	1:45:A:LEU:C	1:46:A:VAL:N	1:46:A:VAL:CA	1:46:A:VAL:C	1	5.14
(1,61)	1:5:A:VAL:N	1:5:A:VAL:CA	1:5:A:VAL:C	1:6:A:LYS:N	16	5.13
(1,69)	1:13:A:GLU:N	1:13:A:GLU:CA	1:13:A:GLU:C	1:14:A:LYS:N	8	5.1
(1,3)	1:3:A:VAL:C	1:4:A:LYS:N	1:4:A:LYS:CA	1:4:A:LYS:C	1	5.1
(1,46)	1:53:A:LYS:C	1:54:A:GLU:N	1:54:A:GLU:CA	1:54:A:GLU:C	8	5.09
(1,77)	1:21:A:ILE:N	1:21:A:ILE:CA	1:21:A:ILE:C	1:22:A:THR:N	8	5.07
(1,46)	1:53:A:LYS:C	1:54:A:GLU:N	1:54:A:GLU:CA	1:54:A:GLU:C	12	5.07
(1,57)	1:64:A:ARG:C	1:65:A:GLU:N	1:65:A:GLU:CA	1:65:A:GLU:C	13	5.05
(1,40)	1:47:A:PRO:C	1:48:A:GLU:N	1:48:A:GLU:CA	1:48:A:GLU:C	14	5.05
(1,1)	1:1:A:GLY:C	1:2:A:PRO:N	1:2:A:PRO:CA	1:2:A:PRO:C	7	5.05
(1,40)	1:47:A:PRO:C	1:48:A:GLU:N	1:48:A:GLU:CA	1:48:A:GLU:C	8	5.01
(1,1)	1:1:A:GLY:C	1:2:A:PRO:N	1:2:A:PRO:CA	1:2:A:PRO:C	19	4.99
(1,101)	1:52:A:PRO:N	1:52:A:PRO:CA	1:52:A:PRO:C	1:53:A:LYS:N	12	4.98
(1,74)	1:18:A:THR:N	1:18:A:THR:CA	1:18:A:THR:C	1:19:A:SER:N	11	4.92
(1,48)	1:55:A:LEU:C	1:56:A:LEU:N	1:56:A:LEU:CA	1:56:A:LEU:C	2	4.92
(1,60)	1:4:A:LYS:N	1:4:A:LYS:CA	1:4:A:LYS:C	1:5:A:VAL:N	8	4.91
(1,72)	1:16:A:VAL:N	1:16:A:VAL:CA	1:16:A:VAL:C	1:17:A:ASP:N	4	4.9
(1,85)	1:32:A:VAL:N	1:32:A:VAL:CA	1:32:A:VAL:C	1:33:A:PHE:N	8	4.89
(1,66)	1:10:A:LYS:N	1:10:A:LYS:CA	1:10:A:LYS:C	1:11:A:GLY:N	7	4.89
(1,38)	1:45:A:LEU:C	1:46:A:VAL:N	1:46:A:VAL:CA	1:46:A:VAL:C	2	4.89
(1,72)	1:16:A:VAL:N	1:16:A:VAL:CA	1:16:A:VAL:C	1:17:A:ASP:N	20	4.88
(1,41)	1:48:A:GLU:C	1:49:A:LYS:N	1:49:A:LYS:CA	1:49:A:LYS:C	18	4.88
(1,84)	1:31:A:VAL:N	1:31:A:VAL:CA	1:31:A:VAL:C	1:32:A:VAL:N	5	4.86
(1,25)	1:25:A:PHE:C	1:26:A:ARG:N	1:26:A:ARG:CA	1:26:A:ARG:C	20	4.86
(1,45)	1:52:A:PRO:C	1:53:A:LYS:N	1:53:A:LYS:CA	1:53:A:LYS:C	2	4.85
(1,32)	1:35:A:TYR:C	1:36:A:ASP:N	1:36:A:ASP:CA	1:36:A:ASP:C	10	4.85
(1,92)	1:41:A:THR:N	1:41:A:THR:CA	1:41:A:THR:C	1:42:A:GLY:N	3	4.84
(1,69)	1:13:A:GLU:N	1:13:A:GLU:CA	1:13:A:GLU:C	1:14:A:LYS:N	19	4.84
(1,29)	1:32:A:VAL:C	1:33:A:PHE:N	1:33:A:PHE:CA	1:33:A:PHE:C	6	4.83
(1,107)	1:58:A:MET:N	1:58:A:MET:CA	1:58:A:MET:C	1:59:A:LEU:N	7	4.81
(1,35)	1:40:A:LYS:C	1:41:A:THR:N	1:41:A:THR:CA	1:41:A:THR:C	11	4.8
(1,101)	1:52:A:PRO:N	1:52:A:PRO:CA	1:52:A:PRO:C	1:53:A:LYS:N	5	4.78
(1,102)	1:53:A:LYS:N	1:53:A:LYS:CA	1:53:A:LYS:C	1:54:A:GLU:N	3	4.77
(1,82)	1:26:A:ARG:N	1:26:A:ARG:CA	1:26:A:ARG:C	1:27:A:HIS:N	1	4.77
(1,40)	1:47:A:PRO:C	1:48:A:GLU:N	1:48:A:GLU:CA	1:48:A:GLU:C	20	4.75
(1,23)	1:23:A:HIS:C	1:24:A:VAL:N	1:24:A:VAL:CA	1:24:A:VAL:C	19	4.72
(1,85)	1:32:A:VAL:N	1:32:A:VAL:CA	1:32:A:VAL:C	1:33:A:PHE:N	12	4.67
(1,61)	1:5:A:VAL:N	1:5:A:VAL:CA	1:5:A:VAL:C	1:6:A:LYS:N	3	4.67
(1,73)	1:17:A:ASP:N	1:17:A:ASP:CA	1:17:A:ASP:C	1:18:A:THR:N	5	4.66
(1,55)	1:62:A:ALA:C	1:63:A:GLU:N	1:63:A:GLU:CA	1:63:A:GLU:C	10	4.66

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,6)	1:6:A:LYS:C	1:7:A:PHE:N	1:7:A:PHE:CA	1:7:A:PHE:C	11	4.65
(1,22)	1:22:A:THR:C	1:23:A:HIS:N	1:23:A:HIS:CA	1:23:A:HIS:C	10	4.64
(1,39)	1:46:A:VAL:C	1:47:A:PRO:N	1:47:A:PRO:CA	1:47:A:PRO:C	9	4.61
(1,109)	1:60:A:ALA:N	1:60:A:ALA:CA	1:60:A:ALA:C	1:61:A:ARG:N	3	4.6
(1,29)	1:32:A:VAL:C	1:33:A:PHE:N	1:33:A:PHE:CA	1:33:A:PHE:C	8	4.59
(1,102)	1:53:A:LYS:N	1:53:A:LYS:CA	1:53:A:LYS:C	1:54:A:GLU:N	10	4.58
(1,38)	1:45:A:LEU:C	1:46:A:VAL:N	1:46:A:VAL:CA	1:46:A:VAL:C	6	4.57
(1,111)	1:62:A:ALA:N	1:62:A:ALA:CA	1:62:A:ALA:C	1:63:A:GLU:N	1	4.56
(1,9)	1:9:A:TYR:C	1:10:A:LYS:N	1:10:A:LYS:CA	1:10:A:LYS:C	15	4.56
(1,107)	1:58:A:MET:N	1:58:A:MET:CA	1:58:A:MET:C	1:59:A:LEU:N	12	4.54
(1,92)	1:41:A:THR:N	1:41:A:THR:CA	1:41:A:THR:C	1:42:A:GLY:N	14	4.54
(1,68)	1:12:A:GLU:N	1:12:A:GLU:CA	1:12:A:GLU:C	1:13:A:GLU:N	18	4.54
(1,63)	1:7:A:PHE:N	1:7:A:PHE:CA	1:7:A:PHE:C	1:8:A:LYS:N	13	4.54
(1,42)	1:49:A:LYS:C	1:50:A:ASP:N	1:50:A:ASP:CA	1:50:A:ASP:C	9	4.53
(1,33)	1:37:A:ASP:C	1:38:A:ASN:N	1:38:A:ASN:CA	1:38:A:ASN:C	18	4.53
(1,97)	1:48:A:GLU:N	1:48:A:GLU:CA	1:48:A:GLU:C	1:49:A:LYS:N	1	4.52
(1,33)	1:37:A:ASP:C	1:38:A:ASN:N	1:38:A:ASN:CA	1:38:A:ASN:C	1	4.51
(1,22)	1:22:A:THR:C	1:23:A:HIS:N	1:23:A:HIS:CA	1:23:A:HIS:C	1	4.51
(1,97)	1:48:A:GLU:N	1:48:A:GLU:CA	1:48:A:GLU:C	1:49:A:LYS:N	3	4.49
(1,80)	1:24:A:VAL:N	1:24:A:VAL:CA	1:24:A:VAL:C	1:25:A:PHE:N	2	4.49
(1,70)	1:14:A:LYS:N	1:14:A:LYS:CA	1:14:A:LYS:C	1:15:A:GLU:N	4	4.49
(1,55)	1:62:A:ALA:C	1:63:A:GLU:N	1:63:A:GLU:CA	1:63:A:GLU:C	6	4.49
(1,36)	1:42:A:GLY:C	1:43:A:HIS:N	1:43:A:HIS:CA	1:43:A:HIS:C	11	4.48
(1,49)	1:56:A:LEU:C	1:57:A:ASP:N	1:57:A:ASP:CA	1:57:A:ASP:C	4	4.47
(1,109)	1:60:A:ALA:N	1:60:A:ALA:CA	1:60:A:ALA:C	1:61:A:ARG:N	15	4.46
(1,72)	1:16:A:VAL:N	1:16:A:VAL:CA	1:16:A:VAL:C	1:17:A:ASP:N	10	4.46
(1,50)	1:57:A:ASP:C	1:58:A:MET:N	1:58:A:MET:CA	1:58:A:MET:C	6	4.44
(1,101)	1:52:A:PRO:N	1:52:A:PRO:CA	1:52:A:PRO:C	1:53:A:LYS:N	13	4.41
(1,29)	1:32:A:VAL:C	1:33:A:PHE:N	1:33:A:PHE:CA	1:33:A:PHE:C	7	4.41
(1,72)	1:16:A:VAL:N	1:16:A:VAL:CA	1:16:A:VAL:C	1:17:A:ASP:N	17	4.4
(1,95)	1:46:A:VAL:N	1:46:A:VAL:CA	1:46:A:VAL:C	1:47:A:PRO:N	18	4.37
(1,50)	1:57:A:ASP:C	1:58:A:MET:N	1:58:A:MET:CA	1:58:A:MET:C	2	4.34
(1,105)	1:56:A:LEU:N	1:56:A:LEU:CA	1:56:A:LEU:C	1:57:A:ASP:N	17	4.33
(1,69)	1:13:A:GLU:N	1:13:A:GLU:CA	1:13:A:GLU:C	1:14:A:LYS:N	7	4.32
(1,109)	1:60:A:ALA:N	1:60:A:ALA:CA	1:60:A:ALA:C	1:61:A:ARG:N	2	4.31
(1,77)	1:21:A:ILE:N	1:21:A:ILE:CA	1:21:A:ILE:C	1:22:A:THR:N	2	4.31
(1,48)	1:55:A:LEU:C	1:56:A:LEU:N	1:56:A:LEU:CA	1:56:A:LEU:C	11	4.31
(1,11)	1:11:A:GLY:C	1:12:A:GLU:N	1:12:A:GLU:CA	1:12:A:GLU:C	20	4.31
(1,6)	1:6:A:LYS:C	1:7:A:PHE:N	1:7:A:PHE:CA	1:7:A:PHE:C	20	4.31
(1,114)	1:65:A:GLU:N	1:65:A:GLU:CA	1:65:A:GLU:C	1:66:A:LYS:N	10	4.27
(1,83)	1:30:A:LEU:N	1:30:A:LEU:CA	1:30:A:LEU:C	1:31:A:VAL:N	20	4.24
(1,55)	1:62:A:ALA:C	1:63:A:GLU:N	1:63:A:GLU:CA	1:63:A:GLU:C	3	4.23
(1,74)	1:18:A:THR:N	1:18:A:THR:CA	1:18:A:THR:C	1:19:A:SER:N	5	4.22
(1,69)	1:13:A:GLU:N	1:13:A:GLU:CA	1:13:A:GLU:C	1:14:A:LYS:N	4	4.22
(1,17)	1:17:A:ASP:C	1:18:A:THR:N	1:18:A:THR:CA	1:18:A:THR:C	17	4.21
(1,29)	1:32:A:VAL:C	1:33:A:PHE:N	1:33:A:PHE:CA	1:33:A:PHE:C	11	4.2
(1,102)	1:53:A:LYS:N	1:53:A:LYS:CA	1:53:A:LYS:C	1:54:A:GLU:N	4	4.18
(1,20)	1:20:A:LYS:C	1:21:A:ILE:N	1:21:A:ILE:CA	1:21:A:ILE:C	9	4.18
(1,67)	1:11:A:GLY:N	1:11:A:GLY:CA	1:11:A:GLY:C	1:12:A:GLU:N	1	4.17
(1,43)	1:50:A:ASP:C	1:51:A:ALA:N	1:51:A:ALA:CA	1:51:A:ALA:C	1	4.17
(1,108)	1:59:A:LEU:N	1:59:A:LEU:CA	1:59:A:LEU:C	1:60:A:ALA:N	5	4.16

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,73)	1:17:A:ASP:N	1:17:A:ASP:CA	1:17:A:ASP:C	1:18:A:THR:N	14	4.16
(1,51)	1:58:A:MET:C	1:59:A:LEU:N	1:59:A:LEU:CA	1:59:A:LEU:C	16	4.16
(1,50)	1:57:A:ASP:C	1:58:A:MET:N	1:58:A:MET:CA	1:58:A:MET:C	11	4.16
(1,113)	1:64:A:ARG:N	1:64:A:ARG:CA	1:64:A:ARG:C	1:65:A:GLU:N	16	4.15
(1,72)	1:16:A:VAL:N	1:16:A:VAL:CA	1:16:A:VAL:C	1:17:A:ASP:N	15	4.15
(1,29)	1:32:A:VAL:C	1:33:A:PHE:N	1:33:A:PHE:CA	1:33:A:PHE:C	1	4.15
(1,101)	1:52:A:PRO:N	1:52:A:PRO:CA	1:52:A:PRO:C	1:53:A:LYS:N	2	4.14
(1,48)	1:55:A:LEU:C	1:56:A:LEU:N	1:56:A:LEU:CA	1:56:A:LEU:C	1	4.14
(1,19)	1:19:A:SER:C	1:20:A:LYS:N	1:20:A:LYS:CA	1:20:A:LYS:C	19	4.13
(1,69)	1:13:A:GLU:N	1:13:A:GLU:CA	1:13:A:GLU:C	1:14:A:LYS:N	10	4.11
(1,28)	1:31:A:VAL:C	1:32:A:VAL:N	1:32:A:VAL:CA	1:32:A:VAL:C	10	4.11
(1,15)	1:15:A:GLU:C	1:16:A:VAL:N	1:16:A:VAL:CA	1:16:A:VAL:C	18	4.11
(1,106)	1:57:A:ASP:N	1:57:A:ASP:CA	1:57:A:ASP:C	1:58:A:MET:N	17	4.1
(1,65)	1:9:A:TYR:N	1:9:A:TYR:CA	1:9:A:TYR:C	1:10:A:LYS:N	5	4.1
(1,23)	1:23:A:HIS:C	1:24:A:VAL:N	1:24:A:VAL:CA	1:24:A:VAL:C	10	4.1
(1,73)	1:17:A:ASP:N	1:17:A:ASP:CA	1:17:A:ASP:C	1:18:A:THR:N	19	4.09
(1,58)	1:2:A:PRO:N	1:2:A:PRO:CA	1:2:A:PRO:C	1:3:A:VAL:N	17	4.08
(1,39)	1:46:A:VAL:C	1:47:A:PRO:N	1:47:A:PRO:CA	1:47:A:PRO:C	14	4.08
(1,38)	1:45:A:LEU:C	1:46:A:VAL:N	1:46:A:VAL:CA	1:46:A:VAL:C	11	4.08
(1,66)	1:10:A:LYS:N	1:10:A:LYS:CA	1:10:A:LYS:C	1:11:A:GLY:N	5	4.06
(1,53)	1:60:A:ALA:C	1:61:A:ARG:N	1:61:A:ARG:CA	1:61:A:ARG:C	7	4.0
(1,41)	1:48:A:GLU:C	1:49:A:LYS:N	1:49:A:LYS:CA	1:49:A:LYS:C	1	3.97
(1,68)	1:12:A:GLU:N	1:12:A:GLU:CA	1:12:A:GLU:C	1:13:A:GLU:N	7	3.96
(1,64)	1:8:A:LYS:N	1:8:A:LYS:CA	1:8:A:LYS:C	1:9:A:TYR:N	5	3.96
(1,21)	1:21:A:ILE:C	1:22:A:THR:N	1:22:A:THR:CA	1:22:A:THR:C	18	3.96
(1,74)	1:18:A:THR:N	1:18:A:THR:CA	1:18:A:THR:C	1:19:A:SER:N	9	3.91
(1,95)	1:46:A:VAL:N	1:46:A:VAL:CA	1:46:A:VAL:C	1:47:A:PRO:N	5	3.9
(1,72)	1:16:A:VAL:N	1:16:A:VAL:CA	1:16:A:VAL:C	1:17:A:ASP:N	18	3.9
(1,18)	1:18:A:THR:C	1:19:A:SER:N	1:19:A:SER:CA	1:19:A:SER:C	12	3.9
(1,90)	1:38:A:ASN:N	1:38:A:ASN:CA	1:38:A:ASN:C	1:39:A:GLY:N	14	3.89
(1,113)	1:64:A:ARG:N	1:64:A:ARG:CA	1:64:A:ARG:C	1:65:A:GLU:N	20	3.88
(1,29)	1:32:A:VAL:C	1:33:A:PHE:N	1:33:A:PHE:CA	1:33:A:PHE:C	12	3.88
(1,97)	1:48:A:GLU:N	1:48:A:GLU:CA	1:48:A:GLU:C	1:49:A:LYS:N	12	3.85
(1,10)	1:10:A:LYS:C	1:11:A:GLY:N	1:11:A:GLY:CA	1:11:A:GLY:C	18	3.85
(1,38)	1:45:A:LEU:C	1:46:A:VAL:N	1:46:A:VAL:CA	1:46:A:VAL:C	12	3.82
(1,102)	1:53:A:LYS:N	1:53:A:LYS:CA	1:53:A:LYS:C	1:54:A:GLU:N	8	3.79
(1,113)	1:64:A:ARG:N	1:64:A:ARG:CA	1:64:A:ARG:C	1:65:A:GLU:N	17	3.78
(1,112)	1:63:A:GLU:N	1:63:A:GLU:CA	1:63:A:GLU:C	1:64:A:ARG:N	10	3.78
(1,55)	1:62:A:ALA:C	1:63:A:GLU:N	1:63:A:GLU:CA	1:63:A:GLU:C	15	3.77
(1,93)	1:43:A:HIS:N	1:43:A:HIS:CA	1:43:A:HIS:C	1:44:A:GLY:N	5	3.75
(1,59)	1:3:A:VAL:N	1:3:A:VAL:CA	1:3:A:VAL:C	1:4:A:LYS:N	10	3.72
(1,106)	1:57:A:ASP:N	1:57:A:ASP:CA	1:57:A:ASP:C	1:58:A:MET:N	20	3.71
(1,95)	1:46:A:VAL:N	1:46:A:VAL:CA	1:46:A:VAL:C	1:47:A:PRO:N	2	3.69
(1,54)	1:61:A:ARG:C	1:62:A:ALA:N	1:62:A:ALA:CA	1:62:A:ALA:C	10	3.68
(1,73)	1:17:A:ASP:N	1:17:A:ASP:CA	1:17:A:ASP:C	1:18:A:THR:N	10	3.67
(1,7)	1:7:A:PHE:C	1:8:A:LYS:N	1:8:A:LYS:CA	1:8:A:LYS:C	18	3.67
(1,103)	1:54:A:GLU:N	1:54:A:GLU:CA	1:54:A:GLU:C	1:55:A:LEU:N	20	3.66
(1,62)	1:6:A:LYS:N	1:6:A:LYS:CA	1:6:A:LYS:C	1:7:A:PHE:N	14	3.64
(1,35)	1:40:A:LYS:C	1:41:A:THR:N	1:41:A:THR:CA	1:41:A:THR:C	12	3.64
(1,34)	1:39:A:GLY:C	1:40:A:LYS:N	1:40:A:LYS:CA	1:40:A:LYS:C	9	3.64
(1,85)	1:32:A:VAL:N	1:32:A:VAL:CA	1:32:A:VAL:C	1:33:A:PHE:N	1	3.63

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,14)	1:14:A:LYS:C	1:15:A:GLU:N	1:15:A:GLU:CA	1:15:A:GLU:C	4	3.63
(1,50)	1:57:A:ASP:C	1:58:A:MET:N	1:58:A:MET:CA	1:58:A:MET:C	5	3.62
(1,74)	1:18:A:THR:N	1:18:A:THR:CA	1:18:A:THR:C	1:19:A:SER:N	8	3.61
(1,106)	1:57:A:ASP:N	1:57:A:ASP:CA	1:57:A:ASP:C	1:58:A:MET:N	6	3.6
(1,71)	1:15:A:GLU:N	1:15:A:GLU:CA	1:15:A:GLU:C	1:16:A:VAL:N	7	3.59
(1,50)	1:57:A:ASP:C	1:58:A:MET:N	1:58:A:MET:CA	1:58:A:MET:C	3	3.59
(1,106)	1:57:A:ASP:N	1:57:A:ASP:CA	1:57:A:ASP:C	1:58:A:MET:N	16	3.56
(1,95)	1:46:A:VAL:N	1:46:A:VAL:CA	1:46:A:VAL:C	1:47:A:PRO:N	16	3.56
(1,95)	1:46:A:VAL:N	1:46:A:VAL:CA	1:46:A:VAL:C	1:47:A:PRO:N	19	3.56
(1,48)	1:55:A:LEU:C	1:56:A:LEU:N	1:56:A:LEU:CA	1:56:A:LEU:C	13	3.56
(1,42)	1:49:A:LYS:C	1:50:A:ASP:N	1:50:A:ASP:CA	1:50:A:ASP:C	13	3.53
(1,85)	1:32:A:VAL:N	1:32:A:VAL:CA	1:32:A:VAL:C	1:33:A:PHE:N	7	3.51
(1,33)	1:37:A:ASP:C	1:38:A:ASN:N	1:38:A:ASN:CA	1:38:A:ASN:C	11	3.51
(1,30)	1:33:A:PHE:C	1:34:A:TYR:N	1:34:A:TYR:CA	1:34:A:TYR:C	19	3.51
(1,14)	1:14:A:LYS:C	1:15:A:GLU:N	1:15:A:GLU:CA	1:15:A:GLU:C	12	3.49
(1,77)	1:21:A:ILE:N	1:21:A:ILE:CA	1:21:A:ILE:C	1:22:A:THR:N	6	3.48
(1,78)	1:22:A:THR:N	1:22:A:THR:CA	1:22:A:THR:C	1:23:A:HIS:N	16	3.46
(1,48)	1:55:A:LEU:C	1:56:A:LEU:N	1:56:A:LEU:CA	1:56:A:LEU:C	16	3.45
(1,48)	1:55:A:LEU:C	1:56:A:LEU:N	1:56:A:LEU:CA	1:56:A:LEU:C	5	3.43
(1,29)	1:32:A:VAL:C	1:33:A:PHE:N	1:33:A:PHE:CA	1:33:A:PHE:C	15	3.43
(1,63)	1:7:A:PHE:N	1:7:A:PHE:CA	1:7:A:PHE:C	1:8:A:LYS:N	9	3.41
(1,38)	1:45:A:LEU:C	1:46:A:VAL:N	1:46:A:VAL:CA	1:46:A:VAL:C	18	3.41
(1,29)	1:32:A:VAL:C	1:33:A:PHE:N	1:33:A:PHE:CA	1:33:A:PHE:C	9	3.41
(1,111)	1:62:A:ALA:N	1:62:A:ALA:CA	1:62:A:ALA:C	1:63:A:GLU:N	11	3.4
(1,112)	1:63:A:GLU:N	1:63:A:GLU:CA	1:63:A:GLU:C	1:64:A:ARG:N	15	3.39
(1,99)	1:50:A:ASP:N	1:50:A:ASP:CA	1:50:A:ASP:C	1:51:A:ALA:N	17	3.38
(1,102)	1:53:A:LYS:N	1:53:A:LYS:CA	1:53:A:LYS:C	1:54:A:GLU:N	6	3.37
(1,102)	1:53:A:LYS:N	1:53:A:LYS:CA	1:53:A:LYS:C	1:54:A:GLU:N	13	3.37
(1,106)	1:57:A:ASP:N	1:57:A:ASP:CA	1:57:A:ASP:C	1:58:A:MET:N	9	3.36
(1,63)	1:7:A:PHE:N	1:7:A:PHE:CA	1:7:A:PHE:C	1:8:A:LYS:N	11	3.35
(1,51)	1:58:A:MET:C	1:59:A:LEU:N	1:59:A:LEU:CA	1:59:A:LEU:C	15	3.35
(1,39)	1:46:A:VAL:C	1:47:A:PRO:N	1:47:A:PRO:CA	1:47:A:PRO:C	13	3.34
(1,112)	1:63:A:GLU:N	1:63:A:GLU:CA	1:63:A:GLU:C	1:64:A:ARG:N	5	3.33
(1,111)	1:62:A:ALA:N	1:62:A:ALA:CA	1:62:A:ALA:C	1:63:A:GLU:N	3	3.33
(1,13)	1:13:A:GLU:C	1:14:A:LYS:N	1:14:A:LYS:CA	1:14:A:LYS:C	12	3.31
(1,40)	1:47:A:PRO:C	1:48:A:GLU:N	1:48:A:GLU:CA	1:48:A:GLU:C	17	3.3
(1,97)	1:48:A:GLU:N	1:48:A:GLU:CA	1:48:A:GLU:C	1:49:A:LYS:N	18	3.29
(1,50)	1:57:A:ASP:C	1:58:A:MET:N	1:58:A:MET:CA	1:58:A:MET:C	18	3.29
(1,9)	1:9:A:TYR:C	1:10:A:LYS:N	1:10:A:LYS:CA	1:10:A:LYS:C	19	3.28
(1,64)	1:8:A:LYS:N	1:8:A:LYS:CA	1:8:A:LYS:C	1:9:A:TYR:N	10	3.27
(1,107)	1:58:A:MET:N	1:58:A:MET:CA	1:58:A:MET:C	1:59:A:LEU:N	10	3.26
(1,76)	1:20:A:LYS:N	1:20:A:LYS:CA	1:20:A:LYS:C	1:21:A:ILE:N	18	3.26
(1,33)	1:37:A:ASP:C	1:38:A:ASN:N	1:38:A:ASN:CA	1:38:A:ASN:C	15	3.26
(1,88)	1:35:A:TYR:N	1:35:A:TYR:CA	1:35:A:TYR:C	1:36:A:ASP:N	9	3.25
(1,17)	1:17:A:ASP:C	1:18:A:THR:N	1:18:A:THR:CA	1:18:A:THR:C	18	3.25
(1,4)	1:4:A:LYS:C	1:5:A:VAL:N	1:5:A:VAL:CA	1:5:A:VAL:C	1	3.24
(1,54)	1:61:A:ARG:C	1:62:A:ALA:N	1:62:A:ALA:CA	1:62:A:ALA:C	19	3.23
(1,11)	1:11:A:GLY:C	1:12:A:GLU:N	1:12:A:GLU:CA	1:12:A:GLU:C	7	3.23
(1,97)	1:48:A:GLU:N	1:48:A:GLU:CA	1:48:A:GLU:C	1:49:A:LYS:N	15	3.19
(1,107)	1:58:A:MET:N	1:58:A:MET:CA	1:58:A:MET:C	1:59:A:LEU:N	19	3.17
(1,53)	1:60:A:ALA:C	1:61:A:ARG:N	1:61:A:ARG:CA	1:61:A:ARG:C	9	3.17

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,101)	1:52:A:PRO:N	1:52:A:PRO:CA	1:52:A:PRO:C	1:53:A:LYS:N	16	3.14
(1,90)	1:38:A:ASN:N	1:38:A:ASN:CA	1:38:A:ASN:C	1:39:A:GLY:N	18	3.13
(1,55)	1:62:A:ALA:C	1:63:A:GLU:N	1:63:A:GLU:CA	1:63:A:GLU:C	20	3.08
(1,1)	1:1:A:GLY:C	1:2:A:PRO:N	1:2:A:PRO:CA	1:2:A:PRO:C	9	3.08
(1,40)	1:47:A:PRO:C	1:48:A:GLU:N	1:48:A:GLU:CA	1:48:A:GLU:C	6	3.07
(1,6)	1:6:A:LYS:C	1:7:A:PHE:N	1:7:A:PHE:CA	1:7:A:PHE:C	17	3.07
(1,78)	1:22:A:THR:N	1:22:A:THR:CA	1:22:A:THR:C	1:23:A:HIS:N	13	3.06
(1,40)	1:47:A:PRO:C	1:48:A:GLU:N	1:48:A:GLU:CA	1:48:A:GLU:C	13	3.06
(1,61)	1:5:A:VAL:N	1:5:A:VAL:CA	1:5:A:VAL:C	1:6:A:LYS:N	1	3.05
(1,1)	1:1:A:GLY:C	1:2:A:PRO:N	1:2:A:PRO:CA	1:2:A:PRO:C	15	3.05
(1,35)	1:40:A:LYS:C	1:41:A:THR:N	1:41:A:THR:CA	1:41:A:THR:C	16	3.03
(1,24)	1:24:A:VAL:C	1:25:A:PHE:N	1:25:A:PHE:CA	1:25:A:PHE:C	18	3.02
(1,51)	1:58:A:MET:C	1:59:A:LEU:N	1:59:A:LEU:CA	1:59:A:LEU:C	8	3.0
(1,78)	1:22:A:THR:N	1:22:A:THR:CA	1:22:A:THR:C	1:23:A:HIS:N	19	2.99
(1,77)	1:21:A:ILE:N	1:21:A:ILE:CA	1:21:A:ILE:C	1:22:A:THR:N	4	2.98
(1,58)	1:2:A:PRO:N	1:2:A:PRO:CA	1:2:A:PRO:C	1:3:A:VAL:N	6	2.97
(1,51)	1:58:A:MET:C	1:59:A:LEU:N	1:59:A:LEU:CA	1:59:A:LEU:C	11	2.97
(1,112)	1:63:A:GLU:N	1:63:A:GLU:CA	1:63:A:GLU:C	1:64:A:ARG:N	13	2.96
(1,105)	1:56:A:LEU:N	1:56:A:LEU:CA	1:56:A:LEU:C	1:57:A:ASP:N	8	2.96
(1,107)	1:58:A:MET:N	1:58:A:MET:CA	1:58:A:MET:C	1:59:A:LEU:N	14	2.95
(1,47)	1:54:A:GLU:C	1:55:A:LEU:N	1:55:A:LEU:CA	1:55:A:LEU:C	19	2.95
(1,72)	1:16:A:VAL:N	1:16:A:VAL:CA	1:16:A:VAL:C	1:17:A:ASP:N	14	2.94
(1,1)	1:1:A:GLY:C	1:2:A:PRO:N	1:2:A:PRO:CA	1:2:A:PRO:C	3	2.94
(1,68)	1:12:A:GLU:N	1:12:A:GLU:CA	1:12:A:GLU:C	1:13:A:GLU:N	11	2.93
(1,52)	1:59:A:LEU:C	1:60:A:ALA:N	1:60:A:ALA:CA	1:60:A:ALA:C	11	2.93
(1,60)	1:4:A:LYS:N	1:4:A:LYS:CA	1:4:A:LYS:C	1:5:A:VAL:N	7	2.92
(1,29)	1:32:A:VAL:C	1:33:A:PHE:N	1:33:A:PHE:CA	1:33:A:PHE:C	20	2.91
(1,109)	1:60:A:ALA:N	1:60:A:ALA:CA	1:60:A:ALA:C	1:61:A:ARG:N	8	2.89
(1,106)	1:57:A:ASP:N	1:57:A:ASP:CA	1:57:A:ASP:C	1:58:A:MET:N	7	2.89
(1,89)	1:36:A:ASP:N	1:36:A:ASP:CA	1:36:A:ASP:C	1:37:A:ASP:N	15	2.88
(1,106)	1:57:A:ASP:N	1:57:A:ASP:CA	1:57:A:ASP:C	1:58:A:MET:N	5	2.87
(1,93)	1:43:A:HIS:N	1:43:A:HIS:CA	1:43:A:HIS:C	1:44:A:GLY:N	12	2.87
(1,55)	1:62:A:ALA:C	1:63:A:GLU:N	1:63:A:GLU:CA	1:63:A:GLU:C	13	2.87
(1,61)	1:5:A:VAL:N	1:5:A:VAL:CA	1:5:A:VAL:C	1:6:A:LYS:N	19	2.86
(1,22)	1:22:A:THR:C	1:23:A:HIS:N	1:23:A:HIS:CA	1:23:A:HIS:C	14	2.86
(1,8)	1:8:A:LYS:C	1:9:A:TYR:N	1:9:A:TYR:CA	1:9:A:TYR:C	19	2.84
(1,42)	1:49:A:LYS:C	1:50:A:ASP:N	1:50:A:ASP:CA	1:50:A:ASP:C	11	2.81
(1,60)	1:4:A:LYS:N	1:4:A:LYS:CA	1:4:A:LYS:C	1:5:A:VAL:N	17	2.8
(1,75)	1:19:A:SER:N	1:19:A:SER:CA	1:19:A:SER:C	1:20:A:LYS:N	10	2.78
(1,108)	1:59:A:LEU:N	1:59:A:LEU:CA	1:59:A:LEU:C	1:60:A:ALA:N	7	2.77
(1,51)	1:58:A:MET:C	1:59:A:LEU:N	1:59:A:LEU:CA	1:59:A:LEU:C	9	2.77
(1,67)	1:11:A:GLY:N	1:11:A:GLY:CA	1:11:A:GLY:C	1:12:A:GLU:N	7	2.75
(1,65)	1:9:A:TYR:N	1:9:A:TYR:CA	1:9:A:TYR:C	1:10:A:LYS:N	8	2.75
(1,59)	1:3:A:VAL:N	1:3:A:VAL:CA	1:3:A:VAL:C	1:4:A:LYS:N	5	2.75
(1,109)	1:60:A:ALA:N	1:60:A:ALA:CA	1:60:A:ALA:C	1:61:A:ARG:N	20	2.74
(1,10)	1:10:A:LYS:C	1:11:A:GLY:N	1:11:A:GLY:CA	1:11:A:GLY:C	5	2.73
(1,102)	1:53:A:LYS:N	1:53:A:LYS:CA	1:53:A:LYS:C	1:54:A:GLU:N	15	2.72
(1,2)	1:2:A:PRO:C	1:3:A:VAL:N	1:3:A:VAL:CA	1:3:A:VAL:C	11	2.71
(1,49)	1:56:A:LEU:C	1:57:A:ASP:N	1:57:A:ASP:CA	1:57:A:ASP:C	5	2.7
(1,84)	1:31:A:VAL:N	1:31:A:VAL:CA	1:31:A:VAL:C	1:32:A:VAL:N	16	2.69
(1,58)	1:2:A:PRO:N	1:2:A:PRO:CA	1:2:A:PRO:C	1:3:A:VAL:N	16	2.69

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,95)	1:46:A:VAL:N	1:46:A:VAL:CA	1:46:A:VAL:C	1:47:A:PRO:N	15	2.68
(1,110)	1:61:A:ARG:N	1:61:A:ARG:CA	1:61:A:ARG:C	1:62:A:ALA:N	14	2.67
(1,84)	1:31:A:VAL:N	1:31:A:VAL:CA	1:31:A:VAL:C	1:32:A:VAL:N	7	2.66
(1,66)	1:10:A:LYS:N	1:10:A:LYS:CA	1:10:A:LYS:C	1:11:A:GLY:N	8	2.65
(1,15)	1:15:A:GLU:C	1:16:A:VAL:N	1:16:A:VAL:CA	1:16:A:VAL:C	16	2.65
(1,107)	1:58:A:MET:N	1:58:A:MET:CA	1:58:A:MET:C	1:59:A:LEU:N	1	2.64
(1,102)	1:53:A:LYS:N	1:53:A:LYS:CA	1:53:A:LYS:C	1:54:A:GLU:N	5	2.64
(1,61)	1:5:A:VAL:N	1:5:A:VAL:CA	1:5:A:VAL:C	1:6:A:LYS:N	18	2.61
(1,78)	1:22:A:THR:N	1:22:A:THR:CA	1:22:A:THR:C	1:23:A:HIS:N	1	2.59
(1,29)	1:32:A:VAL:C	1:33:A:PHE:N	1:33:A:PHE:CA	1:33:A:PHE:C	14	2.59
(1,103)	1:54:A:GLU:N	1:54:A:GLU:CA	1:54:A:GLU:C	1:55:A:LEU:N	2	2.58
(1,90)	1:38:A:ASN:N	1:38:A:ASN:CA	1:38:A:ASN:C	1:39:A:GLY:N	13	2.58
(1,58)	1:2:A:PRO:N	1:2:A:PRO:CA	1:2:A:PRO:C	1:3:A:VAL:N	1	2.57
(1,76)	1:20:A:LYS:N	1:20:A:LYS:CA	1:20:A:LYS:C	1:21:A:ILE:N	4	2.55
(1,66)	1:10:A:LYS:N	1:10:A:LYS:CA	1:10:A:LYS:C	1:11:A:GLY:N	16	2.54
(1,23)	1:23:A:HIS:C	1:24:A:VAL:N	1:24:A:VAL:CA	1:24:A:VAL:C	4	2.54
(1,95)	1:46:A:VAL:N	1:46:A:VAL:CA	1:46:A:VAL:C	1:47:A:PRO:N	4	2.53
(1,48)	1:55:A:LEU:C	1:56:A:LEU:N	1:56:A:LEU:CA	1:56:A:LEU:C	15	2.53
(1,87)	1:34:A:TYR:N	1:34:A:TYR:CA	1:34:A:TYR:C	1:35:A:TYR:N	5	2.52
(1,108)	1:59:A:LEU:N	1:59:A:LEU:CA	1:59:A:LEU:C	1:60:A:ALA:N	20	2.51
(1,112)	1:63:A:GLU:N	1:63:A:GLU:CA	1:63:A:GLU:C	1:64:A:ARG:N	17	2.5
(1,56)	1:63:A:GLU:C	1:64:A:ARG:N	1:64:A:ARG:CA	1:64:A:ARG:C	1	2.48
(1,33)	1:37:A:ASP:C	1:38:A:ASN:N	1:38:A:ASN:CA	1:38:A:ASN:C	3	2.46
(1,112)	1:63:A:GLU:N	1:63:A:GLU:CA	1:63:A:GLU:C	1:64:A:ARG:N	18	2.45
(1,9)	1:9:A:TYR:C	1:10:A:LYS:N	1:10:A:LYS:CA	1:10:A:LYS:C	11	2.43
(1,84)	1:31:A:VAL:N	1:31:A:VAL:CA	1:31:A:VAL:C	1:32:A:VAL:N	10	2.41
(1,55)	1:62:A:ALA:C	1:63:A:GLU:N	1:63:A:GLU:CA	1:63:A:GLU:C	17	2.41
(1,40)	1:47:A:PRO:C	1:48:A:GLU:N	1:48:A:GLU:CA	1:48:A:GLU:C	15	2.41
(1,72)	1:16:A:VAL:N	1:16:A:VAL:CA	1:16:A:VAL:C	1:17:A:ASP:N	13	2.39
(1,48)	1:55:A:LEU:C	1:56:A:LEU:N	1:56:A:LEU:CA	1:56:A:LEU:C	4	2.39
(1,38)	1:45:A:LEU:C	1:46:A:VAL:N	1:46:A:VAL:CA	1:46:A:VAL:C	16	2.39
(1,35)	1:40:A:LYS:C	1:41:A:THR:N	1:41:A:THR:CA	1:41:A:THR:C	17	2.39
(1,40)	1:47:A:PRO:C	1:48:A:GLU:N	1:48:A:GLU:CA	1:48:A:GLU:C	3	2.38
(1,36)	1:42:A:GLY:C	1:43:A:HIS:N	1:43:A:HIS:CA	1:43:A:HIS:C	15	2.36
(1,76)	1:20:A:LYS:N	1:20:A:LYS:CA	1:20:A:LYS:C	1:21:A:ILE:N	15	2.33
(1,109)	1:60:A:ALA:N	1:60:A:ALA:CA	1:60:A:ALA:C	1:61:A:ARG:N	13	2.31
(1,43)	1:50:A:ASP:C	1:51:A:ALA:N	1:51:A:ALA:CA	1:51:A:ALA:C	19	2.29
(1,72)	1:16:A:VAL:N	1:16:A:VAL:CA	1:16:A:VAL:C	1:17:A:ASP:N	16	2.28
(1,51)	1:58:A:MET:C	1:59:A:LEU:N	1:59:A:LEU:CA	1:59:A:LEU:C	18	2.28
(1,20)	1:20:A:LYS:C	1:21:A:ILE:N	1:21:A:ILE:CA	1:21:A:ILE:C	19	2.28
(1,89)	1:36:A:ASP:N	1:36:A:ASP:CA	1:36:A:ASP:C	1:37:A:ASP:N	4	2.27
(1,61)	1:5:A:VAL:N	1:5:A:VAL:CA	1:5:A:VAL:C	1:6:A:LYS:N	2	2.27
(1,94)	1:45:A:LEU:N	1:45:A:LEU:CA	1:45:A:LEU:C	1:46:A:VAL:N	16	2.26
(1,108)	1:59:A:LEU:N	1:59:A:LEU:CA	1:59:A:LEU:C	1:60:A:ALA:N	17	2.24
(1,61)	1:5:A:VAL:N	1:5:A:VAL:CA	1:5:A:VAL:C	1:6:A:LYS:N	10	2.23
(1,90)	1:38:A:ASN:N	1:38:A:ASN:CA	1:38:A:ASN:C	1:39:A:GLY:N	10	2.21
(1,106)	1:57:A:ASP:N	1:57:A:ASP:CA	1:57:A:ASP:C	1:58:A:MET:N	10	2.2
(1,109)	1:60:A:ALA:N	1:60:A:ALA:CA	1:60:A:ALA:C	1:61:A:ARG:N	6	2.18
(1,13)	1:13:A:GLU:C	1:14:A:LYS:N	1:14:A:LYS:CA	1:14:A:LYS:C	4	2.18
(1,108)	1:59:A:LEU:N	1:59:A:LEU:CA	1:59:A:LEU:C	1:60:A:ALA:N	14	2.17
(1,46)	1:53:A:LYS:C	1:54:A:GLU:N	1:54:A:GLU:CA	1:54:A:GLU:C	5	2.17

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,50)	1:57:A:ASP:C	1:58:A:MET:N	1:58:A:MET:CA	1:58:A:MET:C	20	2.16
(1,9)	1:9:A:TYR:C	1:10:A:LYS:N	1:10:A:LYS:CA	1:10:A:LYS:C	10	2.15
(1,109)	1:60:A:ALA:N	1:60:A:ALA:CA	1:60:A:ALA:C	1:61:A:ARG:N	17	2.13
(1,95)	1:46:A:VAL:N	1:46:A:VAL:CA	1:46:A:VAL:C	1:47:A:PRO:N	13	2.11
(1,33)	1:37:A:ASP:C	1:38:A:ASN:N	1:38:A:ASN:CA	1:38:A:ASN:C	17	2.11
(1,47)	1:54:A:GLU:C	1:55:A:LEU:N	1:55:A:LEU:CA	1:55:A:LEU:C	2	2.09
(1,112)	1:63:A:GLU:N	1:63:A:GLU:CA	1:63:A:GLU:C	1:64:A:ARG:N	3	2.08
(1,108)	1:59:A:LEU:N	1:59:A:LEU:CA	1:59:A:LEU:C	1:60:A:ALA:N	13	2.08
(1,46)	1:53:A:LYS:C	1:54:A:GLU:N	1:54:A:GLU:CA	1:54:A:GLU:C	14	2.08
(1,24)	1:24:A:VAL:C	1:25:A:PHE:N	1:25:A:PHE:CA	1:25:A:PHE:C	6	2.08
(1,60)	1:4:A:LYS:N	1:4:A:LYS:CA	1:4:A:LYS:C	1:5:A:VAL:N	13	2.06
(1,50)	1:57:A:ASP:C	1:58:A:MET:N	1:58:A:MET:CA	1:58:A:MET:C	4	2.04
(1,23)	1:23:A:HIS:C	1:24:A:VAL:N	1:24:A:VAL:CA	1:24:A:VAL:C	16	2.02
(1,107)	1:58:A:MET:N	1:58:A:MET:CA	1:58:A:MET:C	1:59:A:LEU:N	20	1.99
(1,49)	1:56:A:LEU:C	1:57:A:ASP:N	1:57:A:ASP:CA	1:57:A:ASP:C	19	1.99
(1,64)	1:8:A:LYS:N	1:8:A:LYS:CA	1:8:A:LYS:C	1:9:A:TYR:N	17	1.98
(1,75)	1:19:A:SER:N	1:19:A:SER:CA	1:19:A:SER:C	1:20:A:LYS:N	20	1.94
(1,64)	1:8:A:LYS:N	1:8:A:LYS:CA	1:8:A:LYS:C	1:9:A:TYR:N	13	1.92
(1,47)	1:54:A:GLU:C	1:55:A:LEU:N	1:55:A:LEU:CA	1:55:A:LEU:C	3	1.9
(1,34)	1:39:A:GLY:C	1:40:A:LYS:N	1:40:A:LYS:CA	1:40:A:LYS:C	2	1.9
(1,22)	1:22:A:THR:C	1:23:A:HIS:N	1:23:A:HIS:CA	1:23:A:HIS:C	15	1.9
(1,105)	1:56:A:LEU:N	1:56:A:LEU:CA	1:56:A:LEU:C	1:57:A:ASP:N	7	1.89
(1,58)	1:2:A:PRO:N	1:2:A:PRO:CA	1:2:A:PRO:C	1:3:A:VAL:N	15	1.88
(1,48)	1:55:A:LEU:C	1:56:A:LEU:N	1:56:A:LEU:CA	1:56:A:LEU:C	8	1.87
(1,50)	1:57:A:ASP:C	1:58:A:MET:N	1:58:A:MET:CA	1:58:A:MET:C	15	1.86
(1,107)	1:58:A:MET:N	1:58:A:MET:CA	1:58:A:MET:C	1:59:A:LEU:N	8	1.85
(1,80)	1:24:A:VAL:N	1:24:A:VAL:CA	1:24:A:VAL:C	1:25:A:PHE:N	7	1.85
(1,61)	1:5:A:VAL:N	1:5:A:VAL:CA	1:5:A:VAL:C	1:6:A:LYS:N	14	1.85
(1,101)	1:52:A:PRO:N	1:52:A:PRO:CA	1:52:A:PRO:C	1:53:A:LYS:N	6	1.84
(1,39)	1:46:A:VAL:C	1:47:A:PRO:N	1:47:A:PRO:CA	1:47:A:PRO:C	1	1.82
(1,77)	1:21:A:ILE:N	1:21:A:ILE:CA	1:21:A:ILE:C	1:22:A:THR:N	19	1.81
(1,48)	1:55:A:LEU:C	1:56:A:LEU:N	1:56:A:LEU:CA	1:56:A:LEU:C	3	1.8
(1,28)	1:31:A:VAL:C	1:32:A:VAL:N	1:32:A:VAL:CA	1:32:A:VAL:C	1	1.8
(1,45)	1:52:A:PRO:C	1:53:A:LYS:N	1:53:A:LYS:CA	1:53:A:LYS:C	16	1.79
(1,39)	1:46:A:VAL:C	1:47:A:PRO:N	1:47:A:PRO:CA	1:47:A:PRO:C	12	1.77
(1,109)	1:60:A:ALA:N	1:60:A:ALA:CA	1:60:A:ALA:C	1:61:A:ARG:N	7	1.74
(1,105)	1:56:A:LEU:N	1:56:A:LEU:CA	1:56:A:LEU:C	1:57:A:ASP:N	19	1.73
(1,72)	1:16:A:VAL:N	1:16:A:VAL:CA	1:16:A:VAL:C	1:17:A:ASP:N	6	1.73
(1,84)	1:31:A:VAL:N	1:31:A:VAL:CA	1:31:A:VAL:C	1:32:A:VAL:N	15	1.71
(1,76)	1:20:A:LYS:N	1:20:A:LYS:CA	1:20:A:LYS:C	1:21:A:ILE:N	12	1.71
(1,108)	1:59:A:LEU:N	1:59:A:LEU:CA	1:59:A:LEU:C	1:60:A:ALA:N	6	1.67
(1,44)	1:51:A:ALA:C	1:52:A:PRO:N	1:52:A:PRO:CA	1:52:A:PRO:C	12	1.67
(1,28)	1:31:A:VAL:C	1:32:A:VAL:N	1:32:A:VAL:CA	1:32:A:VAL:C	19	1.67
(1,14)	1:14:A:LYS:C	1:15:A:GLU:N	1:15:A:GLU:CA	1:15:A:GLU:C	17	1.67
(1,60)	1:4:A:LYS:N	1:4:A:LYS:CA	1:4:A:LYS:C	1:5:A:VAL:N	12	1.66
(1,21)	1:21:A:ILE:C	1:22:A:THR:N	1:22:A:THR:CA	1:22:A:THR:C	11	1.66
(1,20)	1:20:A:LYS:C	1:21:A:ILE:N	1:21:A:ILE:CA	1:21:A:ILE:C	13	1.66
(1,112)	1:63:A:GLU:N	1:63:A:GLU:CA	1:63:A:GLU:C	1:64:A:ARG:N	14	1.65
(1,109)	1:60:A:ALA:N	1:60:A:ALA:CA	1:60:A:ALA:C	1:61:A:ARG:N	18	1.65
(1,55)	1:62:A:ALA:C	1:63:A:GLU:N	1:63:A:GLU:CA	1:63:A:GLU:C	2	1.64
(1,74)	1:18:A:THR:N	1:18:A:THR:CA	1:18:A:THR:C	1:19:A:SER:N	15	1.63

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,34)	1:39:A:GLY:C	1:40:A:LYS:N	1:40:A:LYS:CA	1:40:A:LYS:C	12	1.63
(1,108)	1:59:A:LEU:N	1:59:A:LEU:CA	1:59:A:LEU:C	1:60:A:ALA:N	4	1.61
(1,67)	1:11:A:GLY:N	1:11:A:GLY:CA	1:11:A:GLY:C	1:12:A:GLU:N	10	1.61
(1,1)	1:1:A:GLY:C	1:2:A:PRO:N	1:2:A:PRO:CA	1:2:A:PRO:C	11	1.6
(1,102)	1:53:A:LYS:N	1:53:A:LYS:CA	1:53:A:LYS:C	1:54:A:GLU:N	19	1.59
(1,59)	1:3:A:VAL:N	1:3:A:VAL:CA	1:3:A:VAL:C	1:4:A:LYS:N	15	1.59
(1,102)	1:53:A:LYS:N	1:53:A:LYS:CA	1:53:A:LYS:C	1:54:A:GLU:N	18	1.55
(1,96)	1:47:A:PRO:N	1:47:A:PRO:CA	1:47:A:PRO:C	1:48:A:GLU:N	16	1.55
(1,58)	1:2:A:PRO:N	1:2:A:PRO:CA	1:2:A:PRO:C	1:3:A:VAL:N	14	1.55
(1,66)	1:10:A:LYS:N	1:10:A:LYS:CA	1:10:A:LYS:C	1:11:A:GLY:N	3	1.54
(1,18)	1:18:A:THR:C	1:19:A:SER:N	1:19:A:SER:CA	1:19:A:SER:C	4	1.54
(1,46)	1:53:A:LYS:C	1:54:A:GLU:N	1:54:A:GLU:CA	1:54:A:GLU:C	17	1.51
(1,84)	1:31:A:VAL:N	1:31:A:VAL:CA	1:31:A:VAL:C	1:32:A:VAL:N	6	1.5
(1,6)	1:6:A:LYS:C	1:7:A:PHE:N	1:7:A:PHE:CA	1:7:A:PHE:C	1	1.5
(1,40)	1:47:A:PRO:C	1:48:A:GLU:N	1:48:A:GLU:CA	1:48:A:GLU:C	10	1.49
(1,59)	1:3:A:VAL:N	1:3:A:VAL:CA	1:3:A:VAL:C	1:4:A:LYS:N	11	1.48
(1,42)	1:49:A:LYS:C	1:50:A:ASP:N	1:50:A:ASP:CA	1:50:A:ASP:C	6	1.47
(1,73)	1:17:A:ASP:N	1:17:A:ASP:CA	1:17:A:ASP:C	1:18:A:THR:N	8	1.43
(1,77)	1:21:A:ILE:N	1:21:A:ILE:CA	1:21:A:ILE:C	1:22:A:THR:N	5	1.42
(1,103)	1:54:A:GLU:N	1:54:A:GLU:CA	1:54:A:GLU:C	1:55:A:LEU:N	15	1.41
(1,9)	1:9:A:TYR:C	1:10:A:LYS:N	1:10:A:LYS:CA	1:10:A:LYS:C	13	1.4
(1,68)	1:12:A:GLU:N	1:12:A:GLU:CA	1:12:A:GLU:C	1:13:A:GLU:N	5	1.37
(1,84)	1:31:A:VAL:N	1:31:A:VAL:CA	1:31:A:VAL:C	1:32:A:VAL:N	2	1.34
(1,15)	1:15:A:GLU:C	1:16:A:VAL:N	1:16:A:VAL:CA	1:16:A:VAL:C	3	1.34
(1,7)	1:7:A:PHE:C	1:8:A:LYS:N	1:8:A:LYS:CA	1:8:A:LYS:C	8	1.31
(1,90)	1:38:A:ASN:N	1:38:A:ASN:CA	1:38:A:ASN:C	1:39:A:GLY:N	19	1.3
(1,48)	1:55:A:LEU:C	1:56:A:LEU:N	1:56:A:LEU:CA	1:56:A:LEU:C	10	1.29
(1,109)	1:60:A:ALA:N	1:60:A:ALA:CA	1:60:A:ALA:C	1:61:A:ARG:N	10	1.28
(1,90)	1:38:A:ASN:N	1:38:A:ASN:CA	1:38:A:ASN:C	1:39:A:GLY:N	1	1.28
(1,72)	1:16:A:VAL:N	1:16:A:VAL:CA	1:16:A:VAL:C	1:17:A:ASP:N	19	1.25
(1,31)	1:34:A:TYR:C	1:35:A:TYR:N	1:35:A:TYR:CA	1:35:A:TYR:C	19	1.25
(1,40)	1:47:A:PRO:C	1:48:A:GLU:N	1:48:A:GLU:CA	1:48:A:GLU:C	1	1.24
(1,43)	1:50:A:ASP:C	1:51:A:ALA:N	1:51:A:ALA:CA	1:51:A:ALA:C	13	1.2
(1,17)	1:17:A:ASP:C	1:18:A:THR:N	1:18:A:THR:CA	1:18:A:THR:C	7	1.19
(1,114)	1:65:A:GLU:N	1:65:A:GLU:CA	1:65:A:GLU:C	1:66:A:LYS:N	15	1.17
(1,58)	1:2:A:PRO:N	1:2:A:PRO:CA	1:2:A:PRO:C	1:3:A:VAL:N	18	1.17
(1,21)	1:21:A:ILE:C	1:22:A:THR:N	1:22:A:THR:CA	1:22:A:THR:C	4	1.17
(1,84)	1:31:A:VAL:N	1:31:A:VAL:CA	1:31:A:VAL:C	1:32:A:VAL:N	14	1.15
(1,105)	1:56:A:LEU:N	1:56:A:LEU:CA	1:56:A:LEU:C	1:57:A:ASP:N	6	1.14
(1,55)	1:62:A:ALA:C	1:63:A:GLU:N	1:63:A:GLU:CA	1:63:A:GLU:C	1	1.14
(1,49)	1:56:A:LEU:C	1:57:A:ASP:N	1:57:A:ASP:CA	1:57:A:ASP:C	18	1.11
(1,19)	1:19:A:SER:C	1:20:A:LYS:N	1:20:A:LYS:CA	1:20:A:LYS:C	17	1.09
(1,9)	1:9:A:TYR:C	1:10:A:LYS:N	1:10:A:LYS:CA	1:10:A:LYS:C	7	1.09
(1,35)	1:40:A:LYS:C	1:41:A:THR:N	1:41:A:THR:CA	1:41:A:THR:C	15	1.07
(1,101)	1:52:A:PRO:N	1:52:A:PRO:CA	1:52:A:PRO:C	1:53:A:LYS:N	10	1.06
(1,111)	1:62:A:ALA:N	1:62:A:ALA:CA	1:62:A:ALA:C	1:63:A:GLU:N	13	1.05
(1,96)	1:47:A:PRO:N	1:47:A:PRO:CA	1:47:A:PRO:C	1:48:A:GLU:N	2	1.04
(1,45)	1:52:A:PRO:C	1:53:A:LYS:N	1:53:A:LYS:CA	1:53:A:LYS:C	1	1.04
(1,50)	1:57:A:ASP:C	1:58:A:MET:N	1:58:A:MET:CA	1:58:A:MET:C	13	1.03
(1,38)	1:45:A:LEU:C	1:46:A:VAL:N	1:46:A:VAL:CA	1:46:A:VAL:C	19	1.03
(1,70)	1:14:A:LYS:N	1:14:A:LYS:CA	1:14:A:LYS:C	1:15:A:GLU:N	10	1.02

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,65)	1:9:A:TYR:N	1:9:A:TYR:CA	1:9:A:TYR:C	1:10:A:LYS:N	13	1.02
(1,48)	1:55:A:LEU:C	1:56:A:LEU:N	1:56:A:LEU:CA	1:56:A:LEU:C	6	1.02
(1,42)	1:49:A:LYS:C	1:50:A:ASP:N	1:50:A:ASP:CA	1:50:A:ASP:C	5	1.01
(1,39)	1:46:A:VAL:C	1:47:A:PRO:N	1:47:A:PRO:CA	1:47:A:PRO:C	11	1.0