



Full wwPDB NMR Structure Validation Report i

Jun 3, 2023 – 10:30 AM EDT

PDB ID : 2AYX
BMRB ID : 6810
Title : Solution structure of the E.coli RcsC C-terminus (residues 700-949) containing linker region and phosphoreceiver domain
Authors : Rogov, V.V.; Rogova, N.Y.; Bernhard, F.; Koglin, A.; Lohr, F.; Dotsch, V.
Deposited on : 2005-09-09

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 i symbol.

The types of validation reports are described at
<http://www.wwpdb.org/validation/2017/FAQs#types>.

The following versions of software and data (see [references](#) ①) were used in the production of this report:

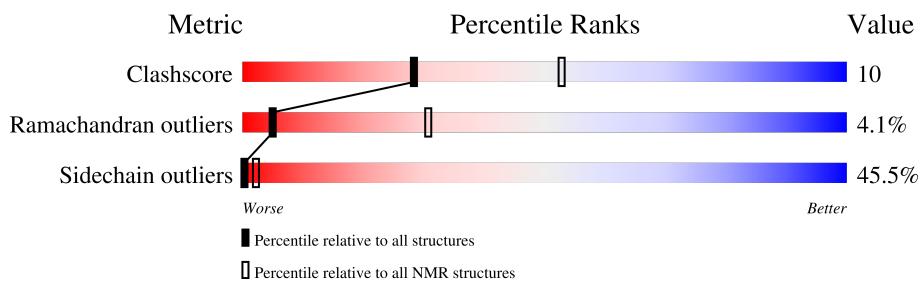
MolProbitiy : 4.02b-467
Percentile statistics : 20191225.v01 (using entries in the PDB archive December 25th 2019)
wwPDB-RCI : v_1n_11_5_13_A (Berjanski et al., 2005)
PANAV : Wang et al. (2010)
wwPDB-ShiftChecker : v1.2
BMRB Restraints Analysis : v1.2
Ideal geometry (proteins) : Engh & Huber (2001)
Ideal geometry (DNA, RNA) : Parkinson et al. (1996)
Validation Pipeline (wwPDB-VP) : 2.33

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 90%.

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	158937	12864
Ramachandran outliers	154571	11451
Sidechain outliers	154315	11428

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 <=5%



2 Ensemble composition and analysis i

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

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:705-A:800 (96)	0.91	12
2	A:824-A:878, A:883-A:948 (121)	1.18	2

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

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

The models can be grouped into 5 clusters. No single-model clusters were found.

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

3 Entry composition [\(i\)](#)

There is only 1 type of molecule in this entry. The entry contains 3930 atoms, of which 1978 are hydrogens and 0 are deuteriums.

- Molecule 1 is a protein called Sensor kinase protein rcsC.

Mol	Chain	Residues	Atoms						Trace
			Total	C	H	N	O	S	
1	A	254	3930	1213	1978	346	380	13	0

There are 4 discrepancies between the modelled and reference sequences:

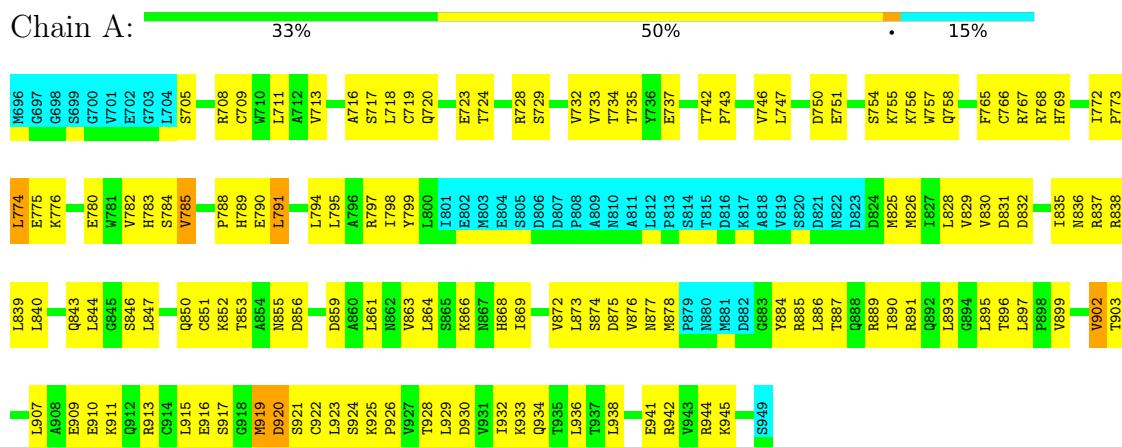
Chain	Residue	Modelled	Actual	Comment	Reference
A	696	MET	-	cloning artifact	UNP P14376
A	697	GLY	-	cloning artifact	UNP P14376
A	698	GLY	-	cloning artifact	UNP P14376
A	699	SER	-	cloning artifact	UNP P14376

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: Sensor kinase protein rcsC

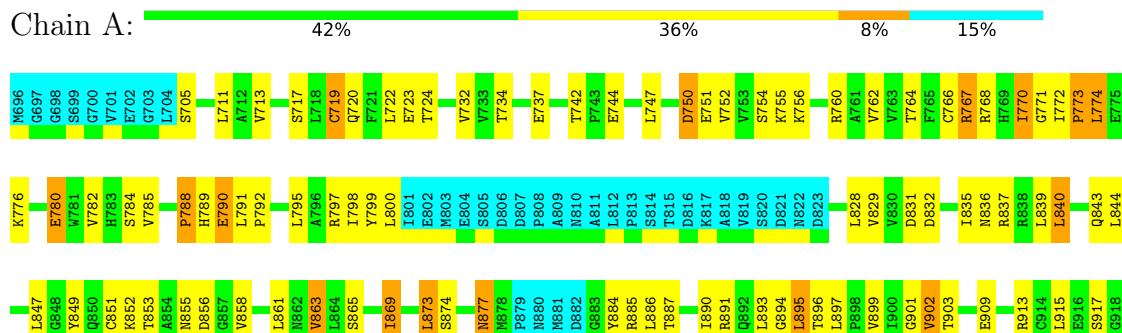


4.2 Scores per residue for each member of the ensemble

Colouring as in section 4.1 above.

4.2.1 Score per residue for model 1

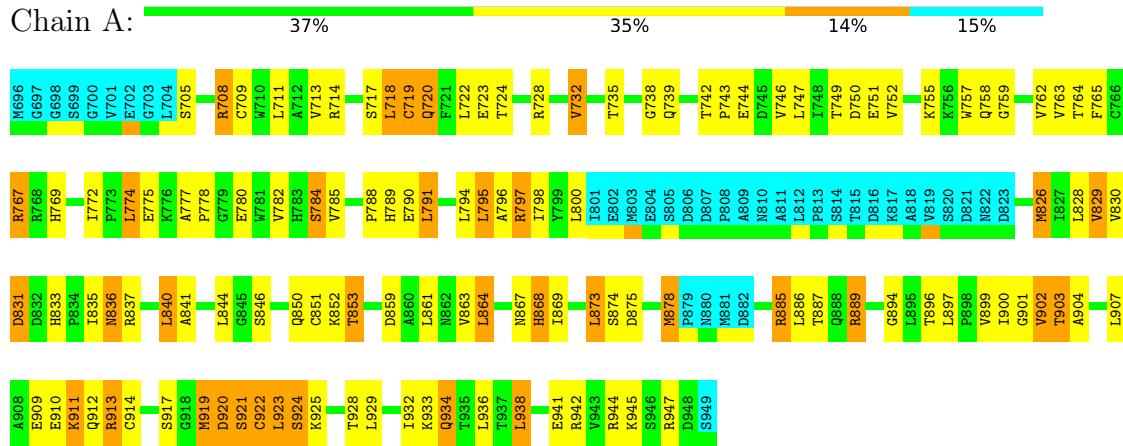
- Molecule 1: Sensor kinase protein rcsC





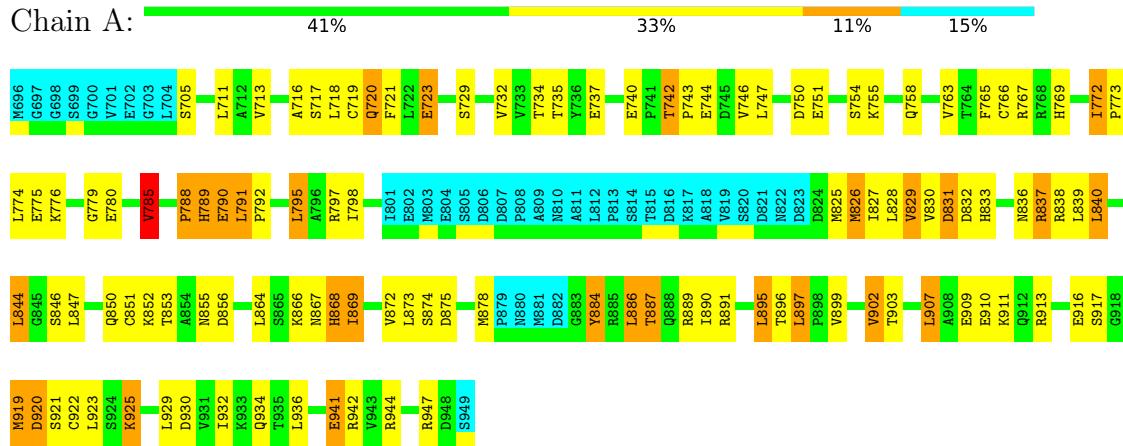
4.2.2 Score per residue for model 2 (medoid)

- Molecule 1: Sensor kinase protein rcsC



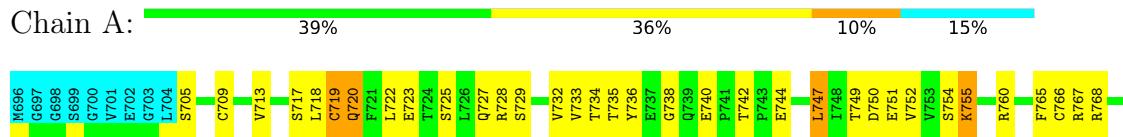
4.2.3 Score per residue for model 3

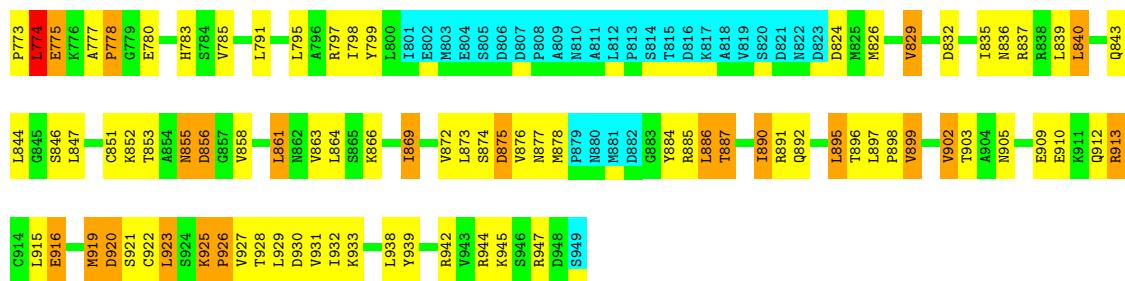
- Molecule 1: Sensor kinase protein rcsC



4.2.4 Score per residue for model 4

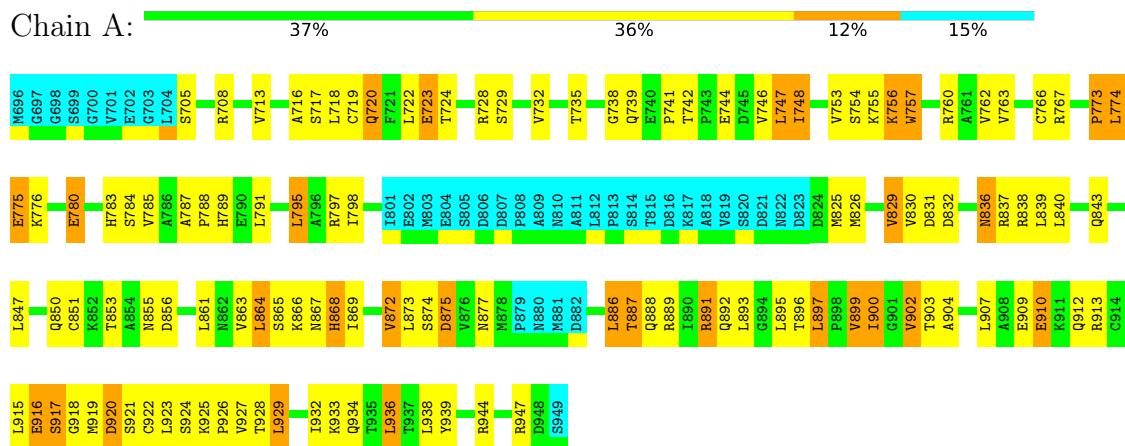
- Molecule 1: Sensor kinase protein rcsC





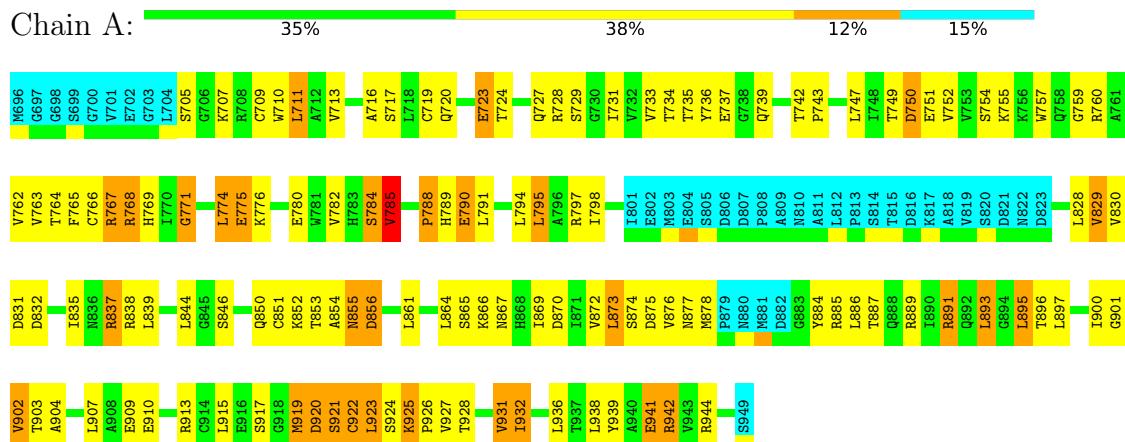
4.2.5 Score per residue for model 5

- Molecule 1: Sensor kinase protein rcsC



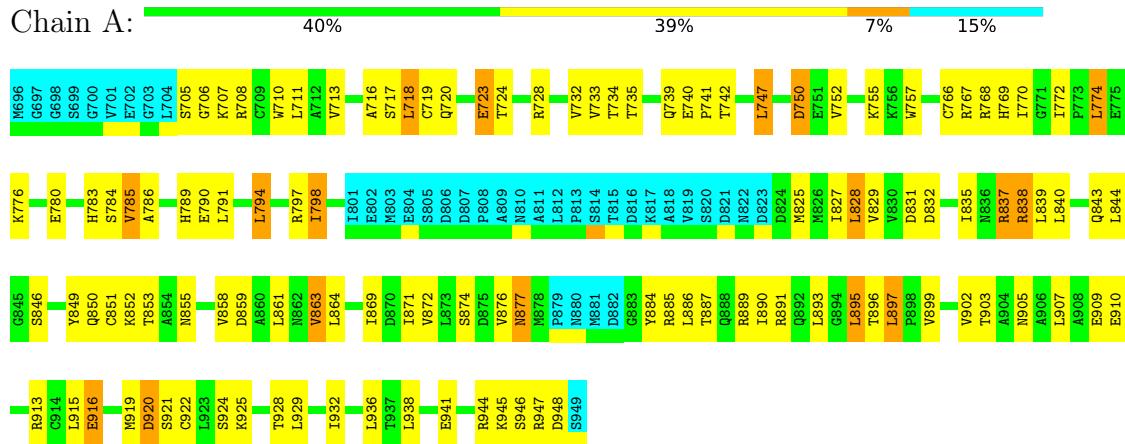
4.2.6 Score per residue for model 6

- Molecule 1: Sensor kinase protein rcsC



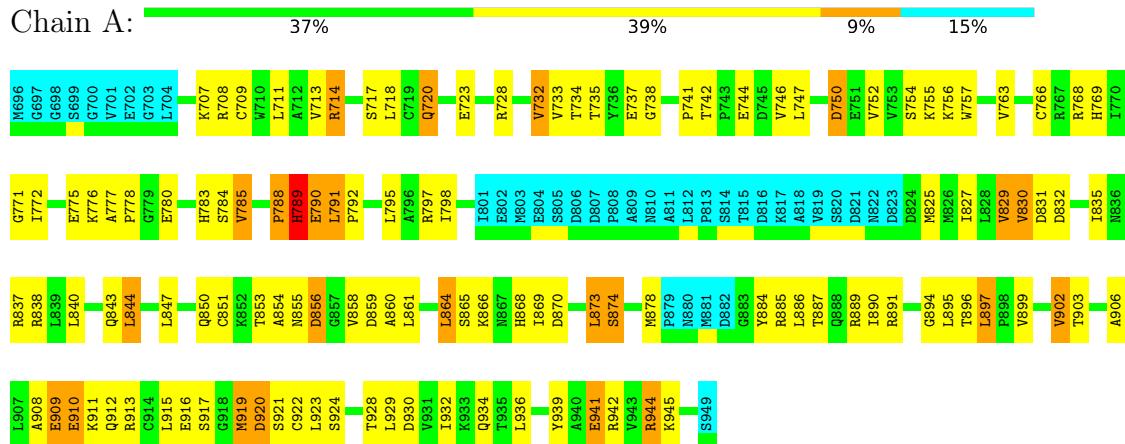
4.2.7 Score per residue for model 7

- Molecule 1: Sensor kinase protein rcsC



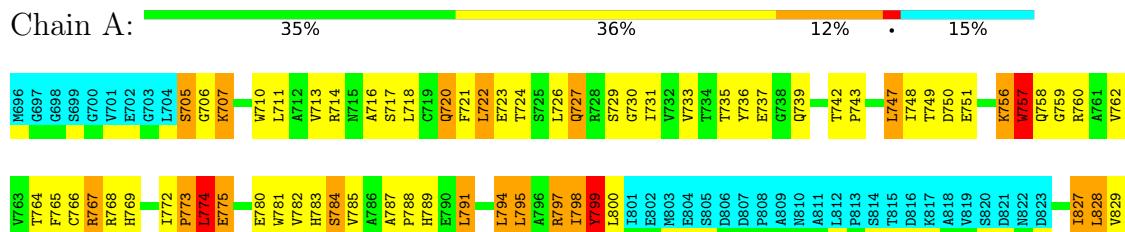
4.2.8 Score per residue for model 8

- Molecule 1: Sensor kinase protein rcsC



4.2.9 Score per residue for model 9

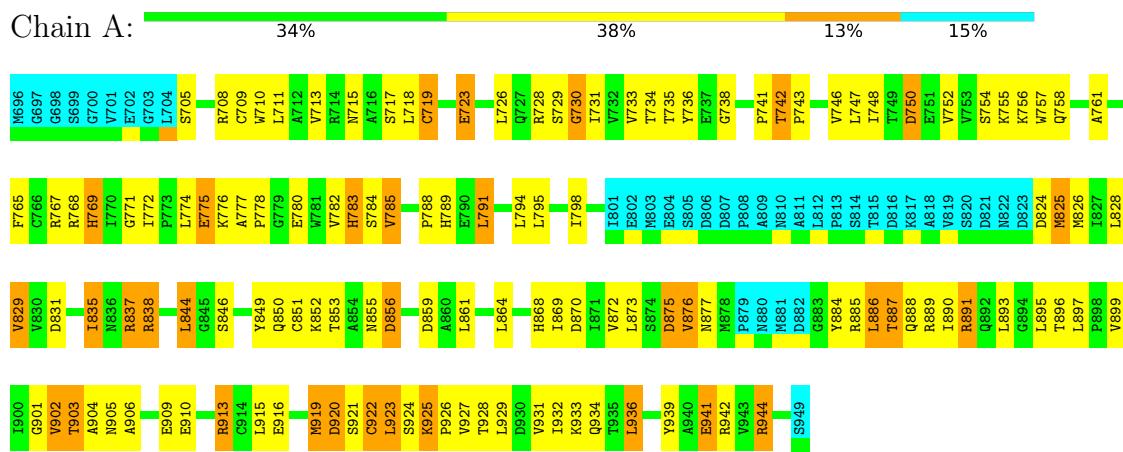
- Molecule 1: Sensor kinase protein rcsC





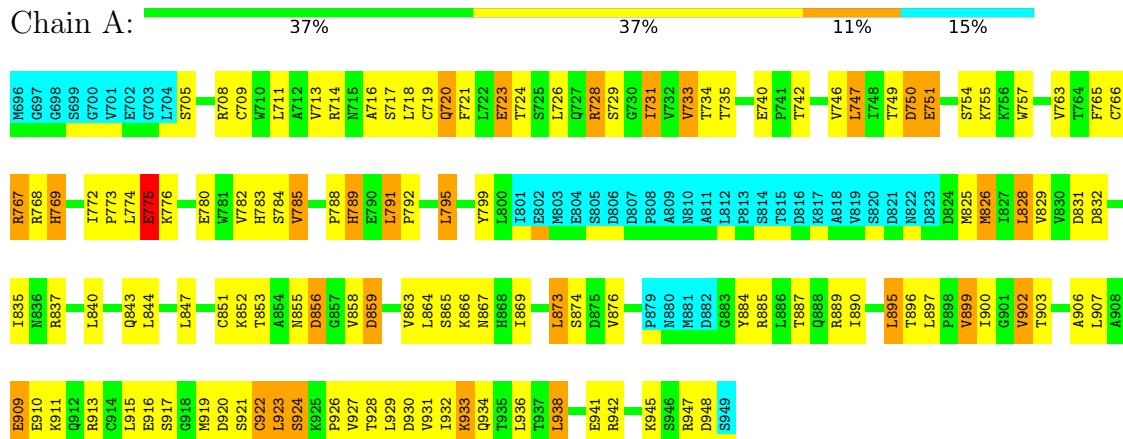
4.2.10 Score per residue for model 10

- Molecule 1: Sensor kinase protein rcsC



4.2.11 Score per residue for model 11

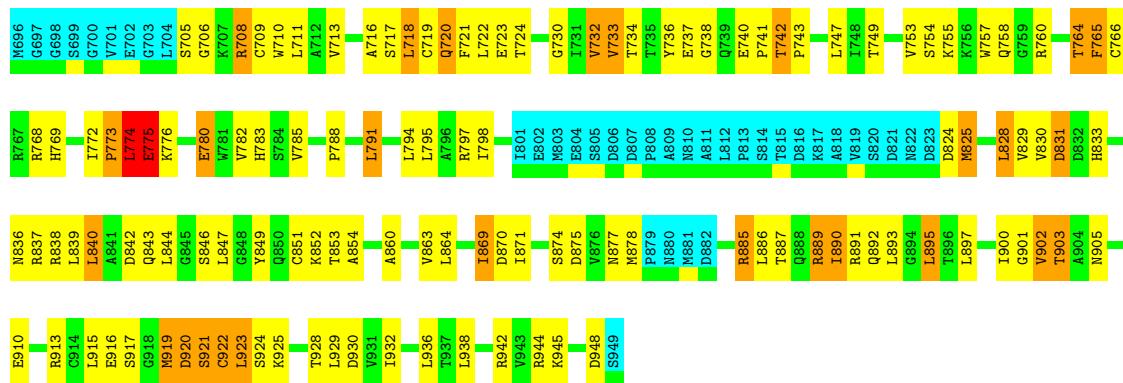
- Molecule 1: Sensor kinase protein rcsC



4.2.12 Score per residue for model 12

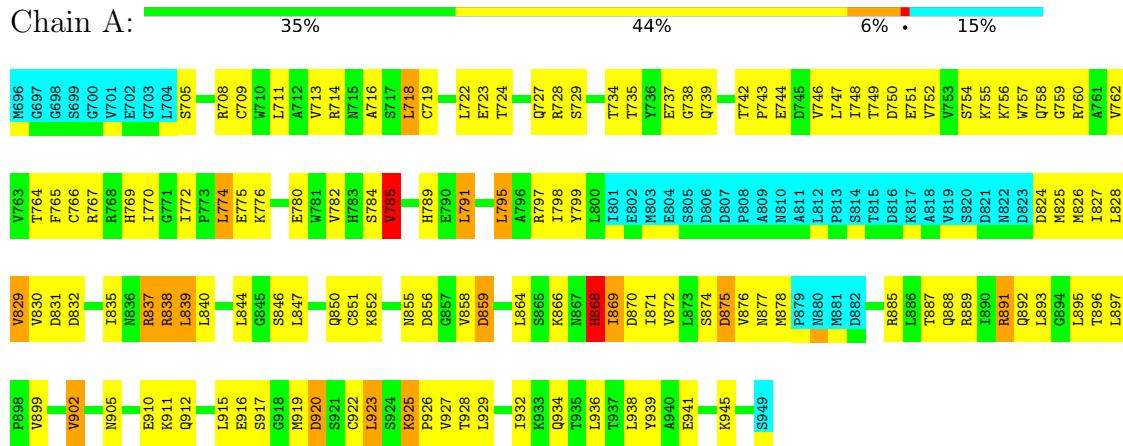
- Molecule 1: Sensor kinase protein rcsC





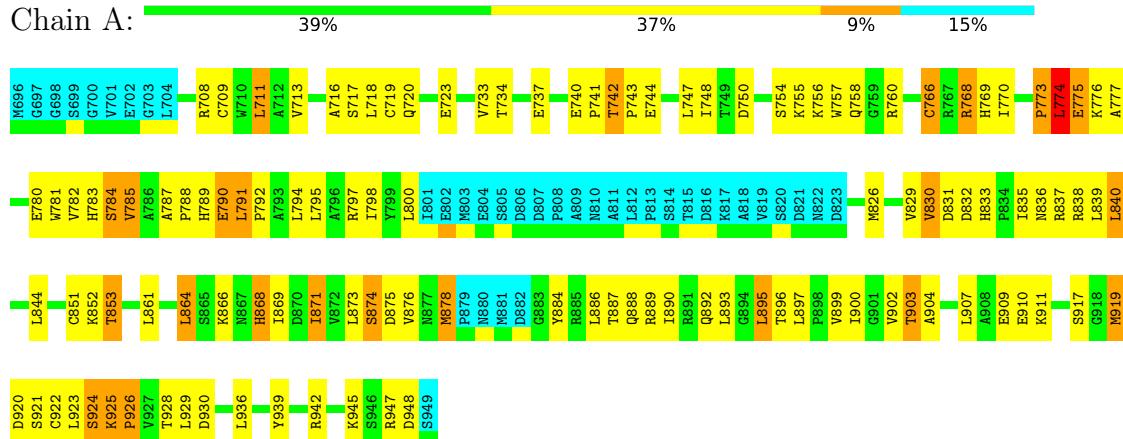
4.2.13 Score per residue for model 13

- Molecule 1: Sensor kinase protein rcsC



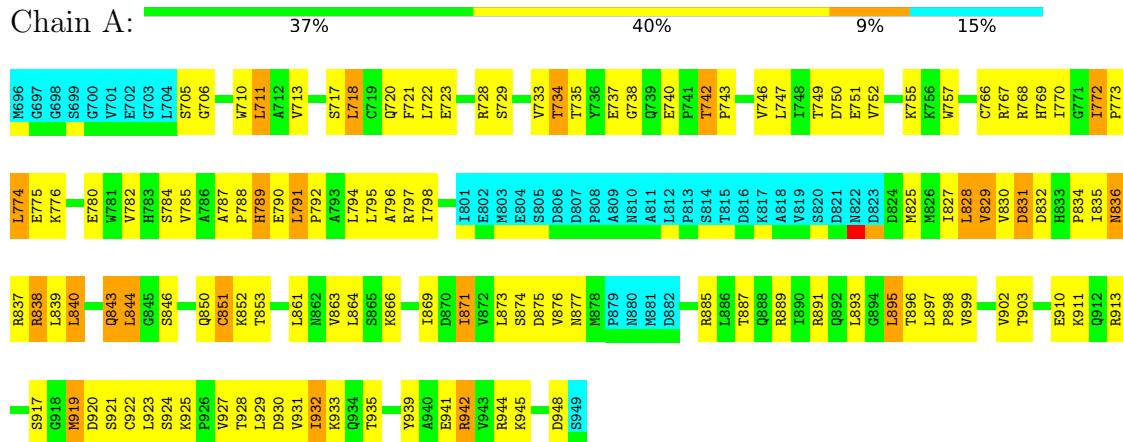
4.2.14 Score per residue for model 14

- Molecule 1: Sensor kinase protein rcsC



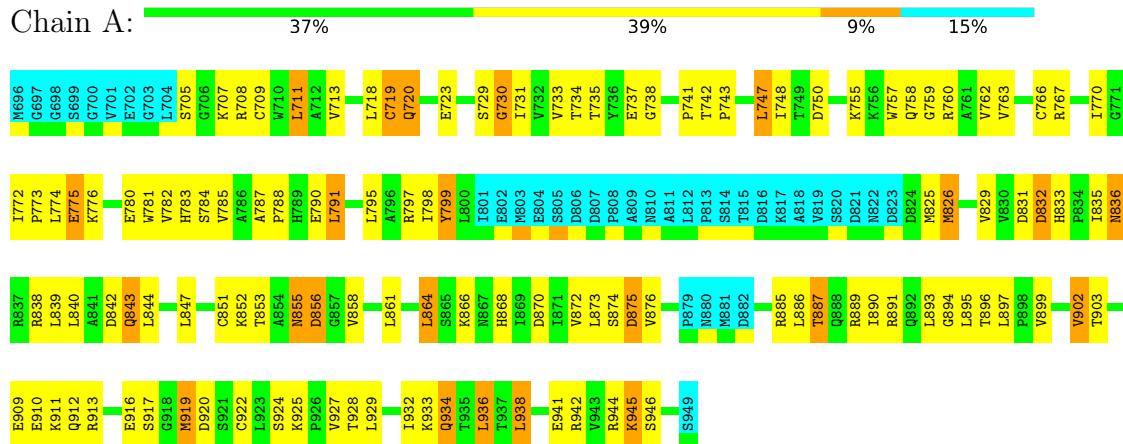
4.2.15 Score per residue for model 15

- Molecule 1: Sensor kinase protein rcsC



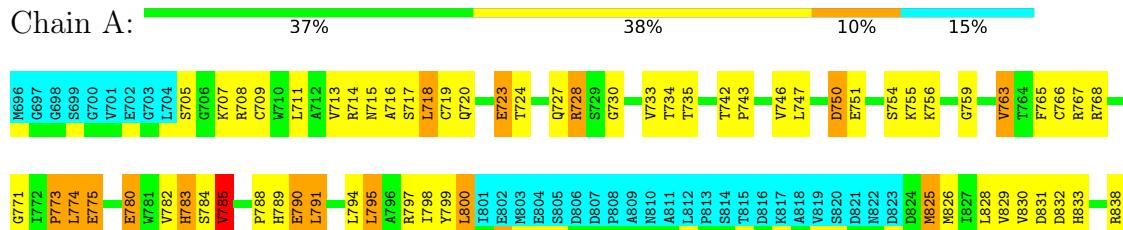
4.2.16 Score per residue for model 16

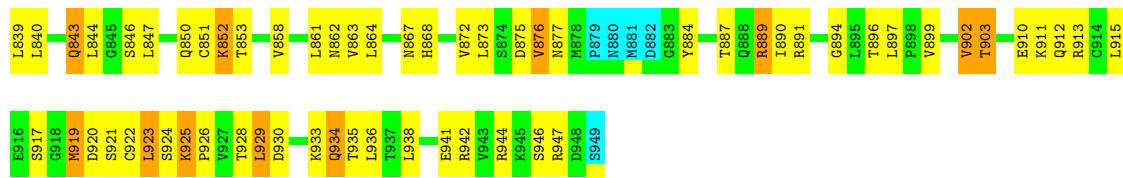
- Molecule 1: Sensor kinase protein rcsC



4.2.17 Score per residue for model 17

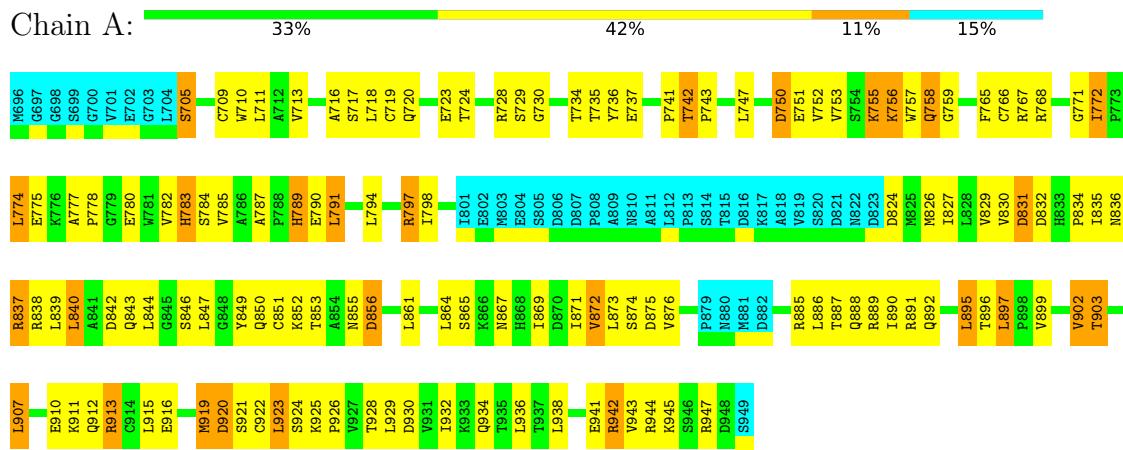
- Molecule 1: Sensor kinase protein rcsC





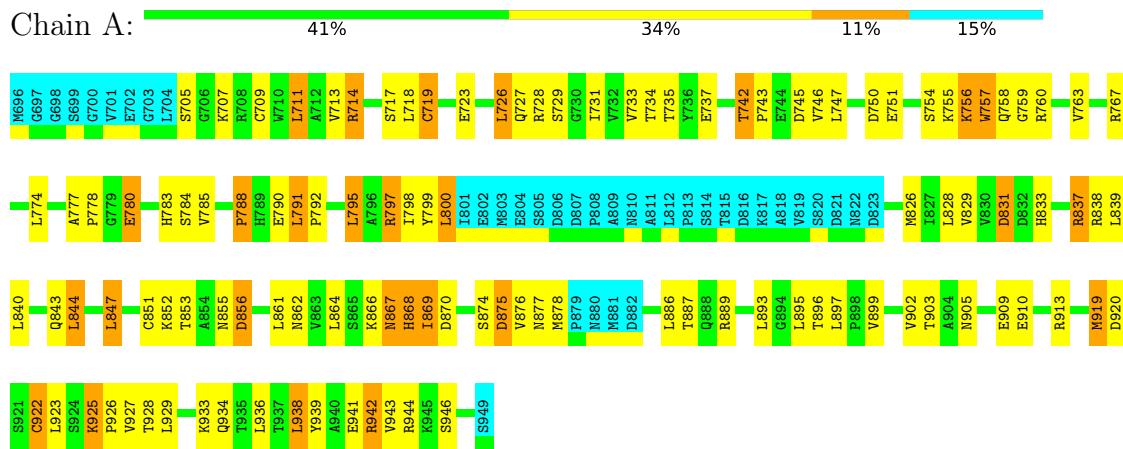
4.2.18 Score per residue for model 18

- Molecule 1: Sensor kinase protein rcsC



4.2.19 Score per residue for model 19

- Molecule 1: Sensor kinase protein rcsC



4.2.20 Score per residue for model 20

- Molecule 1: Sensor kinase protein rcsC





5 Refinement protocol and experimental data overview i

The models were refined using the following method: *Energy minimization*.

Of the 30 calculated structures, 20 were deposited, based on the following criterion: *structures with the lowest energy*.

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

Software name	Classification	Version
DYANA	structure solution	1.5
CNS	refinement	1.1

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	3026
Number of shifts mapped to atoms	3026
Number of unparsed shifts	0
Number of shifts with mapping errors	0
Number of shifts with mapping warnings	0
Assignment completeness (well-defined parts)	90%

6 Model quality i

6.1 Standard geometry i

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

Mol	Chain	Bond lengths		Bond angles	
		RMSZ	#Z>5	RMSZ	#Z>5
1	A	0.29±0.02	0±0/1719 (0.0± 0.0%)	0.40±0.01	0±0/2335 (0.0± 0.0%)
All	All	0.29	1/34380 (0.0%)	0.40	0/46700 (0.0%)

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

Mol	Chain	Chirality	Planarity
1	A	0.0±0.0	0.1±0.2
All	All	0	1

All unique bond outliers are listed below.

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)	Models	
								Worst	Total
1	A	799	TYR	CE2-CZ	6.80	1.47	1.38	9	1

There are no bond-angle outliers.

There are no chirality outliers.

All unique planar outliers are listed below.

Mol	Chain	Res	Type	Group	Models (Total)
1	A	799	TYR	Sidechain	1

6.2 Too-close contacts i

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

Mol	Chain	Non-H	H(model)	H(added)	Clashes
1	A	1692	1745	1740	36±7
All	All	33840	34900	34800	721

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 11.

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

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:831:ASP:HB3	1:A:837:ARG:HB2	0.88	1.46	20	8
1:A:772:ILE:HG13	1:A:773:PRO:HD2	0.88	1.44	1	2
1:A:832:ASP:HB3	1:A:876:VAL:HB	0.85	1.45	16	1
1:A:743:PRO:HA	1:A:759:GLY:HA2	0.84	1.49	9	8
1:A:843:GLN:HG2	1:A:929:LEU:HD23	0.81	1.53	12	3
1:A:751:GLU:HG2	1:A:752:VAL:H	0.80	1.37	6	1
1:A:902:VAL:HB	1:A:923:LEU:HB2	0.80	1.53	8	3
1:A:827:ILE:HB	1:A:844:LEU:HD21	0.78	1.55	8	3
1:A:713:VAL:HA	1:A:750:ASP:HB2	0.78	1.54	19	6
1:A:711:LEU:HD21	1:A:733:VAL:HG13	0.76	1.57	19	1
1:A:843:GLN:HG2	1:A:929:LEU:HD12	0.76	1.56	8	1
1:A:751:GLU:HG2	1:A:767:ARG:HH21	0.75	1.41	9	2
1:A:891:ARG:HA	1:A:895:LEU:HB2	0.74	1.59	1	2
1:A:902:VAL:HB	1:A:923:LEU:HB3	0.74	1.57	18	1
1:A:752:VAL:HG21	1:A:770:ILE:HB	0.74	1.60	13	1
1:A:764:THR:HB	1:A:782:VAL:HG12	0.72	1.59	20	5
1:A:899:VAL:HB	1:A:919:MET:HA	0.71	1.59	1	12
1:A:829:VAL:HB	1:A:837:ARG:HD2	0.71	1.60	6	2
1:A:723:GLU:HA	1:A:733:VAL:HG21	0.70	1.60	6	1
1:A:828:LEU:HD23	1:A:869:ILE:HG12	0.70	1.62	7	1
1:A:877:ASN:HB2	1:A:925:LYS:HE3	0.70	1.62	12	1
1:A:887:THR:HG21	1:A:919:MET:HG2	0.70	1.63	3	1
1:A:713:VAL:HB	1:A:719:CYS:SG	0.69	2.27	19	3
1:A:765:PHE:HZ	1:A:791:LEU:HG	0.69	1.47	9	3
1:A:752:VAL:HG22	1:A:772:ILE:HB	0.69	1.64	10	1
1:A:765:PHE:CZ	1:A:791:LEU:HG	0.69	2.22	9	5
1:A:723:GLU:HB2	1:A:733:VAL:HG11	0.68	1.64	8	2
1:A:774:LEU:HA	1:A:782:VAL:HG13	0.68	1.65	14	5
1:A:899:VAL:HG13	1:A:919:MET:HA	0.68	1.65	4	5
1:A:777:ALA:HB1	1:A:778:PRO:HD2	0.67	1.66	10	6
1:A:861:LEU:HG	1:A:890:ILE:HA	0.67	1.65	7	1
1:A:726:LEU:HD23	1:A:731:ILE:HD12	0.67	1.65	19	1
1:A:902:VAL:HB	1:A:923:LEU:HD12	0.67	1.66	4	7
1:A:746:VAL:HG21	1:A:795:LEU:HD11	0.67	1.66	2	8

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:872:VAL:HB	1:A:899:VAL:HB	0.67	1.66	9	2
1:A:765:PHE:HE1	1:A:785:VAL:HG23	0.66	1.51	20	4
1:A:843:GLN:HG3	1:A:929:LEU:HD23	0.66	1.67	15	4
1:A:723:GLU:HA	1:A:733:VAL:HG11	0.66	1.66	11	2
1:A:788:PRO:HD2	1:A:790:GLU:OE1	0.66	1.91	8	6
1:A:861:LEU:HD23	1:A:890:ILE:HG13	0.65	1.69	7	1
1:A:713:VAL:HG13	1:A:750:ASP:HB3	0.65	1.68	1	9
1:A:713:VAL:HA	1:A:750:ASP:CB	0.65	2.21	13	5
1:A:767:ARG:HA	1:A:784:SER:HB3	0.64	1.69	2	1
1:A:742:THR:HG22	1:A:743:PRO:HD2	0.64	1.68	12	6
1:A:831:ASP:HB2	1:A:837:ARG:NE	0.64	2.08	6	2
1:A:919:MET:O	1:A:920:ASP:HB2	0.64	1.92	18	13
1:A:913:ARG:HD2	1:A:922:CYS:HB2	0.64	1.70	11	1
1:A:913:ARG:HA	1:A:919:MET:HE1	0.64	1.67	4	1
1:A:705:SER:HA	1:A:730:GLY:O	0.64	1.93	18	3
1:A:720:GLN:HA	1:A:723:GLU:HG2	0.63	1.69	16	8
1:A:785:VAL:HG13	1:A:787:ALA:H	0.63	1.54	14	4
1:A:752:VAL:HG13	1:A:772:ILE:HG13	0.63	1.70	18	2
1:A:904:ALA:HA	1:A:925:LYS:HB2	0.63	1.71	14	2
1:A:716:ALA:HA	1:A:719:CYS:SG	0.63	2.34	13	9
1:A:861:LEU:HD21	1:A:890:ILE:HA	0.63	1.70	18	2
1:A:762:VAL:HG13	1:A:780:GLU:HG2	0.62	1.69	1	1
1:A:861:LEU:HD13	1:A:890:ILE:HA	0.62	1.69	1	1
1:A:885:ARG:O	1:A:889:ARG:HB2	0.62	1.94	12	2
1:A:751:GLU:HG2	1:A:752:VAL:N	0.62	2.09	6	1
1:A:788:PRO:HG2	1:A:790:GLU:HG2	0.62	1.69	2	1
1:A:902:VAL:HG12	1:A:925:LYS:HA	0.62	1.71	19	1
1:A:831:ASP:HB2	1:A:875:ASP:HB3	0.61	1.72	12	4
1:A:873:LEU:HD11	1:A:936:LEU:HD11	0.61	1.71	16	1
1:A:899:VAL:HG22	1:A:919:MET:HB3	0.61	1.73	4	1
1:A:710:TRP:HB3	1:A:736:TYR:HB2	0.61	1.73	6	5
1:A:902:VAL:HG22	1:A:925:LYS:HE2	0.61	1.73	17	1
1:A:713:VAL:HB	1:A:719:CYS:HB3	0.61	1.73	5	3
1:A:841:ALA:HB2	1:A:853:THR:HG21	0.60	1.72	2	1
1:A:773:PRO:O	1:A:774:LEU:HB3	0.60	1.97	12	5
1:A:831:ASP:HA	1:A:875:ASP:HB2	0.60	1.72	16	2
1:A:764:THR:HG21	1:A:772:ILE:HG13	0.60	1.72	9	2
1:A:901:GLY:HA3	1:A:919:MET:SD	0.60	2.37	10	1
1:A:830:VAL:HG23	1:A:874:SER:HA	0.60	1.73	14	1
1:A:748:ILE:HG23	1:A:763:VAL:HB	0.59	1.73	5	1
1:A:861:LEU:HD21	1:A:893:LEU:HD12	0.59	1.73	1	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:713:VAL:HG13	1:A:750:ASP:HB2	0.59	1.75	4	3
1:A:872:VAL:HG23	1:A:897:LEU:HD11	0.58	1.73	16	4
1:A:828:LEU:HB3	1:A:872:VAL:HG22	0.58	1.75	13	2
1:A:924:SER:HB2	1:A:926:PRO:HD2	0.58	1.75	14	2
1:A:837:ARG:NH2	1:A:840:LEU:HD11	0.58	2.13	13	1
1:A:831:ASP:HA	1:A:875:ASP:O	0.58	1.97	3	7
1:A:888:GLN:HA	1:A:891:ARG:HD3	0.58	1.74	13	2
1:A:726:LEU:HB3	1:A:731:ILE:HB	0.58	1.75	10	1
1:A:855:ASN:O	1:A:856:ASP:HB2	0.57	1.99	19	8
1:A:910:GLU:HA	1:A:913:ARG:NH1	0.57	2.14	11	1
1:A:829:VAL:HG12	1:A:873:LEU:HD12	0.57	1.75	17	1
1:A:901:GLY:O	1:A:922:CYS:HA	0.57	1.98	10	6
1:A:875:ASP:CG	1:A:925:LYS:HZ3	0.57	2.02	3	1
1:A:830:VAL:HG22	1:A:854:ALA:HB3	0.57	1.76	20	3
1:A:708:ARG:HA	1:A:732:VAL:HG23	0.57	1.76	20	2
1:A:829:VAL:HG23	1:A:840:LEU:HD12	0.57	1.77	15	1
1:A:843:GLN:HB3	1:A:932:ILE:HG21	0.57	1.75	15	1
1:A:742:THR:HB	1:A:745:ASP:HB2	0.57	1.76	19	1
1:A:765:PHE:CE1	1:A:785:VAL:HG23	0.57	2.35	20	5
1:A:831:ASP:HB2	1:A:837:ARG:NH1	0.57	2.14	13	1
1:A:707:LYS:NZ	1:A:745:ASP:HA	0.56	2.15	19	1
1:A:886:LEU:HG	1:A:887:THR:N	0.56	2.16	10	4
1:A:875:ASP:OD1	1:A:925:LYS:HG2	0.56	2.01	10	2
1:A:856:ASP:HB3	1:A:859:ASP:HB2	0.56	1.78	20	6
1:A:899:VAL:HG22	1:A:919:MET:HG2	0.56	1.76	11	1
1:A:913:ARG:HB2	1:A:922:CYS:SG	0.56	2.41	12	2
1:A:837:ARG:HH21	1:A:840:LEU:HD11	0.56	1.59	13	1
1:A:826:MET:HG3	1:A:869:ILE:HA	0.56	1.77	4	2
1:A:906:ALA:HB3	1:A:909:GLU:HB3	0.56	1.76	11	1
1:A:828:LEU:HB2	1:A:869:ILE:HG12	0.55	1.77	13	2
1:A:864:LEU:HD21	1:A:897:LEU:HD11	0.55	1.78	9	3
1:A:877:ASN:HB2	1:A:925:LYS:HE2	0.55	1.78	1	1
1:A:831:ASP:OD1	1:A:837:ARG:HB2	0.55	2.00	19	2
1:A:831:ASP:HA	1:A:875:ASP:HB3	0.55	1.78	14	1
1:A:756:LYS:O	1:A:757:TRP:HB2	0.55	2.02	19	3
1:A:752:VAL:HG22	1:A:772:ILE:HG12	0.55	1.77	13	2
1:A:941:GLU:O	1:A:945:LYS:HG2	0.55	2.02	7	1
1:A:775:GLU:HA	1:A:780:GLU:O	0.54	2.02	14	9
1:A:864:LEU:HD23	1:A:869:ILE:HD12	0.54	1.77	2	1
1:A:895:LEU:O	1:A:895:LEU:HG	0.54	2.02	18	7
1:A:867:ASN:O	1:A:868:HIS:HB2	0.54	2.02	19	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:836:ASN:O	1:A:840:LEU:HG	0.54	2.03	2	9
1:A:716:ALA:O	1:A:720:GLN:HB2	0.54	2.02	12	5
1:A:831:ASP:HB2	1:A:837:ARG:HE	0.54	1.60	10	1
1:A:757:TRP:HB2	1:A:762:VAL:HB	0.54	1.79	5	1
1:A:775:GLU:HG3	1:A:781:TRP:HA	0.54	1.79	16	2
1:A:831:ASP:HB3	1:A:837:ARG:CB	0.54	2.29	20	1
1:A:713:VAL:HA	1:A:750:ASP:HB3	0.54	1.79	15	3
1:A:942:ARG:HG3	1:A:943:VAL:N	0.54	2.17	19	2
1:A:743:PRO:HA	1:A:759:GLY:CA	0.54	2.30	9	1
1:A:833:HIS:HB2	1:A:836:ASN:ND2	0.54	2.18	16	1
1:A:938:LEU:O	1:A:941:GLU:HG2	0.54	2.03	20	1
1:A:900:ILE:HG23	1:A:921:SER:HB2	0.54	1.80	20	5
1:A:788:PRO:HB2	1:A:790:GLU:OE2	0.53	2.03	19	1
1:A:844:LEU:HD13	1:A:851:CYS:HB3	0.53	1.80	20	1
1:A:909:GLU:HB3	1:A:922:CYS:HB2	0.53	1.80	10	1
1:A:912:GLN:O	1:A:916:GLU:HG2	0.53	2.03	13	1
1:A:898:PRO:HB2	1:A:939:TYR:HE2	0.53	1.64	4	1
1:A:864:LEU:HD13	1:A:897:LEU:HD21	0.53	1.81	7	1
1:A:932:ILE:O	1:A:936:LEU:HB2	0.53	2.03	6	2
1:A:724:THR:O	1:A:728:ARG:HG3	0.53	2.04	13	2
1:A:708:ARG:HG3	1:A:732:VAL:HB	0.53	1.81	8	1
1:A:873:LEU:HD11	1:A:936:LEU:HD12	0.53	1.80	10	1
1:A:832:ASP:CB	1:A:876:VAL:HB	0.52	2.28	16	1
1:A:723:GLU:HG3	1:A:724:THR:N	0.52	2.17	18	7
1:A:763:VAL:HG11	1:A:791:LEU:HD21	0.52	1.80	8	6
1:A:904:ALA:HB2	1:A:925:LYS:HB2	0.52	1.79	2	2
1:A:837:ARG:NE	1:A:837:ARG:HA	0.52	2.19	6	2
1:A:724:THR:HA	1:A:727:GLN:HG2	0.52	1.80	9	1
1:A:709:CYS:SG	1:A:726:LEU:HD22	0.52	2.45	19	1
1:A:767:ARG:HB3	1:A:784:SER:HB3	0.52	1.82	9	1
1:A:927:VAL:HG13	1:A:931:VAL:HB	0.52	1.81	10	2
1:A:828:LEU:HD22	1:A:869:ILE:HD13	0.52	1.81	9	1
1:A:797:ARG:HA	1:A:800:LEU:HD23	0.52	1.82	17	1
1:A:775:GLU:HG3	1:A:780:GLU:O	0.52	2.05	16	7
1:A:705:SER:O	1:A:846:SER:HA	0.51	2.05	9	1
1:A:723:GLU:HB2	1:A:733:VAL:HG21	0.51	1.82	10	1
1:A:890:ILE:HG12	1:A:895:LEU:HG	0.51	1.82	1	1
1:A:708:ARG:HG2	1:A:732:VAL:HG13	0.51	1.80	2	1
1:A:910:GLU:HG2	1:A:911:LYS:N	0.51	2.20	2	2
1:A:875:ASP:HA	1:A:902:VAL:O	0.51	2.06	15	2
1:A:939:TYR:HA	1:A:942:ARG:HB2	0.51	1.81	15	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:868:HIS:O	1:A:869:ILE:HB	0.51	2.05	19	2
1:A:713:VAL:HB	1:A:719:CYS:HB2	0.51	1.81	1	4
1:A:741:PRO:HA	1:A:757:TRP:CH2	0.51	2.41	20	5
1:A:827:ILE:HD12	1:A:871:ILE:HB	0.51	1.83	18	2
1:A:785:VAL:HG12	1:A:787:ALA:H	0.51	1.66	9	1
1:A:723:GLU:HG2	1:A:724:THR:N	0.50	2.21	17	1
1:A:831:ASP:CB	1:A:837:ARG:HG2	0.50	2.36	13	1
1:A:886:LEU:O	1:A:890:ILE:HG13	0.50	2.06	10	1
1:A:860:ALA:O	1:A:864:LEU:HG	0.50	2.07	12	1
1:A:765:PHE:HE2	1:A:791:LEU:HD22	0.50	1.66	13	1
1:A:890:ILE:HG23	1:A:895:LEU:HD13	0.50	1.83	14	1
1:A:714:ARG:HH12	1:A:751:GLU:HG3	0.50	1.66	19	1
1:A:829:VAL:HG13	1:A:873:LEU:HD12	0.50	1.82	2	1
1:A:752:VAL:HG23	1:A:771:GLY:HA3	0.50	1.82	6	1
1:A:830:VAL:HA	1:A:854:ALA:O	0.50	2.06	12	2
1:A:833:HIS:HB2	1:A:836:ASN:HD21	0.50	1.66	16	1
1:A:765:PHE:HA	1:A:783:HIS:O	0.50	2.05	10	4
1:A:767:ARG:NE	1:A:767:ARG:HA	0.50	2.22	1	1
1:A:828:LEU:HB3	1:A:869:ILE:HD13	0.50	1.84	12	1
1:A:707:LYS:NZ	1:A:799:TYR:OH	0.50	2.44	9	1
1:A:752:VAL:HG13	1:A:772:ILE:HG12	0.50	1.83	10	1
1:A:829:VAL:HB	1:A:837:ARG:CZ	0.50	2.37	13	1
1:A:830:VAL:HG13	1:A:854:ALA:HB3	0.50	1.83	8	1
1:A:875:ASP:HA	1:A:902:VAL:HG13	0.50	1.82	12	1
1:A:941:GLU:O	1:A:945:LYS:HB3	0.50	2.07	16	1
1:A:934:GLN:O	1:A:938:LEU:HB2	0.50	2.06	20	5
1:A:828:LEU:HD12	1:A:852:LYS:HB3	0.50	1.84	17	1
1:A:777:ALA:HB3	1:A:780:GLU:HB2	0.49	1.84	19	3
1:A:831:ASP:OD2	1:A:836:ASN:HB3	0.49	2.07	5	1
1:A:906:ALA:HB3	1:A:909:GLU:HG3	0.49	1.84	8	1
1:A:774:LEU:O	1:A:780:GLU:HB3	0.49	2.08	4	3
1:A:906:ALA:O	1:A:907:LEU:HB2	0.49	2.06	9	1
1:A:791:LEU:N	1:A:792:PRO:HD2	0.49	2.22	1	8
1:A:829:VAL:HG12	1:A:873:LEU:HD11	0.49	1.84	6	3
1:A:774:LEU:HA	1:A:782:VAL:HB	0.49	1.85	9	1
1:A:832:ASP:HB3	1:A:877:ASN:HB3	0.49	1.83	7	1
1:A:938:LEU:O	1:A:942:ARG:HG2	0.49	2.07	20	1
1:A:875:ASP:HB2	1:A:925:LYS:HE2	0.49	1.85	5	1
1:A:751:GLU:HG2	1:A:752:VAL:HG12	0.49	1.84	6	1
1:A:899:VAL:HB	1:A:919:MET:CA	0.49	2.38	3	3
1:A:781:TRP:HZ3	1:A:794:LEU:HD13	0.49	1.67	20	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:751:GLU:HG3	1:A:752:VAL:H	0.48	1.68	1	2
1:A:925:LYS:N	1:A:926:PRO:HD2	0.48	2.23	4	5
1:A:826:MET:HB2	1:A:869:ILE:HA	0.48	1.85	3	1
1:A:742:THR:CG2	1:A:743:PRO:HD2	0.48	2.38	12	1
1:A:843:GLN:HG2	1:A:932:ILE:HG21	0.48	1.86	20	1
1:A:770:ILE:HG22	1:A:771:GLY:H	0.48	1.68	1	1
1:A:741:PRO:HA	1:A:757:TRP:CZ3	0.48	2.44	16	2
1:A:908:ALA:O	1:A:912:GLN:HB2	0.48	2.08	8	1
1:A:726:LEU:HD22	1:A:731:ILE:HD12	0.48	1.85	11	1
1:A:741:PRO:HB3	1:A:757:TRP:CH2	0.48	2.43	12	1
1:A:875:ASP:HA	1:A:902:VAL:HG22	0.48	1.84	16	1
1:A:927:VAL:HG13	1:A:931:VAL:HG12	0.48	1.86	6	1
1:A:912:GLN:O	1:A:916:GLU:HG3	0.48	2.09	18	1
1:A:941:GLU:HG3	1:A:942:ARG:N	0.48	2.24	6	3
1:A:766:CYS:O	1:A:784:SER:HA	0.48	2.09	14	2
1:A:772:ILE:HG12	1:A:773:PRO:HD2	0.48	1.84	3	1
1:A:747:LEU:HB2	1:A:757:TRP:CD2	0.47	2.44	5	3
1:A:720:GLN:O	1:A:723:GLU:HG3	0.47	2.09	5	1
1:A:864:LEU:HG	1:A:895:LEU:HD11	0.47	1.87	14	1
1:A:913:ARG:HA	1:A:916:GLU:OE2	0.47	2.10	18	1
1:A:749:THR:HG21	1:A:753:VAL:HB	0.47	1.87	12	1
1:A:903:THR:HG21	1:A:909:GLU:HG2	0.47	1.85	14	1
1:A:765:PHE:CE2	1:A:791:LEU:HD22	0.47	2.44	13	3
1:A:837:ARG:HA	1:A:837:ARG:NE	0.47	2.23	13	1
1:A:863:VAL:HG13	1:A:869:ILE:HD13	0.47	1.86	1	2
1:A:855:ASN:O	1:A:856:ASP:HB3	0.47	2.09	16	1
1:A:726:LEU:HD11	1:A:795:LEU:HD12	0.47	1.87	9	1
1:A:941:GLU:O	1:A:944:ARG:HG3	0.47	2.10	10	1
1:A:746:VAL:HG21	1:A:795:LEU:HD21	0.47	1.86	11	1
1:A:873:LEU:HD22	1:A:900:ILE:HD12	0.47	1.87	11	1
1:A:828:LEU:HD11	1:A:863:VAL:HG13	0.47	1.87	15	1
1:A:724:THR:O	1:A:728:ARG:HB2	0.47	2.10	17	1
1:A:757:TRP:HB3	1:A:762:VAL:HB	0.47	1.86	2	1
1:A:906:ALA:HB3	1:A:909:GLU:CG	0.47	2.40	8	1
1:A:904:ALA:HB2	1:A:925:LYS:HG3	0.47	1.84	10	1
1:A:741:PRO:HG2	1:A:758:GLN:HB2	0.47	1.87	12	1
1:A:707:LYS:HB2	1:A:731:ILE:HG12	0.47	1.87	16	1
1:A:886:LEU:HD13	1:A:887:THR:N	0.47	2.24	9	1
1:A:903:THR:HB	1:A:906:ALA:HB2	0.47	1.86	10	1
1:A:829:VAL:HB	1:A:837:ARG:CD	0.46	2.40	10	2
1:A:708:ARG:HG2	1:A:732:VAL:HG23	0.46	1.87	12	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:765:PHE:CZ	1:A:791:LEU:HD13	0.46	2.46	13	1
1:A:863:VAL:HA	1:A:866:LYS:HB2	0.46	1.87	15	1
1:A:877:ASN:ND2	1:A:904:ALA:HB3	0.46	2.24	5	1
1:A:829:VAL:HB	1:A:873:LEU:HD12	0.46	1.87	1	1
1:A:826:MET:HG2	1:A:868:HIS:O	0.46	2.11	2	1
1:A:887:THR:O	1:A:890:ILE:HG22	0.46	2.10	3	1
1:A:887:THR:HB	1:A:916:GLU:OE1	0.46	2.10	4	1
1:A:752:VAL:CG2	1:A:769:HIS:HA	0.46	2.40	10	1
1:A:844:LEU:HA	1:A:847:LEU:HD23	0.46	1.87	19	1
1:A:718:LEU:HD21	1:A:765:PHE:CD2	0.46	2.45	20	1
1:A:741:PRO:HB2	1:A:758:GLN:O	0.46	2.10	18	1
1:A:757:TRP:CB	1:A:762:VAL:HB	0.46	2.40	5	1
1:A:899:VAL:HB	1:A:919:MET:HB3	0.46	1.87	7	1
1:A:891:ARG:HA	1:A:895:LEU:HD23	0.46	1.86	6	2
1:A:930:ASP:O	1:A:934:GLN:HG2	0.46	2.11	8	1
1:A:707:LYS:CE	1:A:799:TYR:OH	0.46	2.64	9	1
1:A:747:LEU:HB3	1:A:762:VAL:HG23	0.46	1.87	9	2
1:A:711:LEU:HD11	1:A:719:CYS:SG	0.46	2.51	16	1
1:A:831:ASP:OD2	1:A:837:ARG:HB2	0.46	2.11	12	2
1:A:714:ARG:HD2	1:A:750:ASP:OD2	0.46	2.11	8	1
1:A:757:TRP:HA	1:A:757:TRP:CE3	0.46	2.45	9	1
1:A:887:THR:HB	1:A:916:GLU:HB3	0.46	1.88	16	1
1:A:837:ARG:NH2	1:A:853:THR:HB	0.46	2.26	2	1
1:A:781:TRP:CZ3	1:A:794:LEU:HD11	0.46	2.46	9	1
1:A:705:SER:HA	1:A:730:GLY:HA3	0.46	1.87	10	1
1:A:752:VAL:HG11	1:A:771:GLY:H	0.46	1.71	10	1
1:A:864:LEU:HG	1:A:890:ILE:HD11	0.46	1.87	16	1
1:A:747:LEU:HD22	1:A:749:THR:HG23	0.45	1.86	4	1
1:A:724:THR:HA	1:A:727:GLN:CG	0.45	2.40	6	1
1:A:886:LEU:HD13	1:A:887:THR:H	0.45	1.71	9	1
1:A:831:ASP:HB2	1:A:875:ASP:HB2	0.45	1.88	19	1
1:A:765:PHE:CE1	1:A:785:VAL:HB	0.45	2.46	9	1
1:A:934:GLN:HG3	1:A:935:THR:N	0.45	2.26	17	1
1:A:887:THR:HG21	1:A:916:GLU:HB2	0.45	1.88	7	1
1:A:828:LEU:HB2	1:A:869:ILE:HG21	0.45	1.87	6	3
1:A:888:GLN:O	1:A:891:ARG:HG2	0.45	2.11	10	1
1:A:837:ARG:HG3	1:A:853:THR:HG22	0.45	1.88	14	1
1:A:876:VAL:HB	1:A:903:THR:HG23	0.45	1.88	17	1
1:A:787:ALA:N	1:A:788:PRO:HD3	0.45	2.26	9	2
1:A:825:MET:O	1:A:850:GLN:HB2	0.45	2.12	17	2
1:A:774:LEU:HB2	1:A:782:VAL:HG22	0.45	1.88	16	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:774:LEU:HB3	1:A:782:VAL:HG22	0.45	1.89	15	2
1:A:718:LEU:HD11	1:A:786:ALA:HA	0.45	1.88	7	1
1:A:829:VAL:HB	1:A:853:THR:HG23	0.45	1.88	2	1
1:A:923:LEU:HD11	1:A:935:THR:HG21	0.45	1.87	15	1
1:A:831:ASP:HB3	1:A:837:ARG:HG3	0.45	1.88	18	1
1:A:897:LEU:HD22	1:A:897:LEU:N	0.44	2.26	7	1
1:A:711:LEU:O	1:A:711:LEU:HG	0.44	2.12	15	2
1:A:752:VAL:HG22	1:A:771:GLY:H	0.44	1.73	8	1
1:A:891:ARG:HB3	1:A:918:GLY:HA2	0.44	1.88	5	1
1:A:747:LEU:HD12	1:A:757:TRP:CE3	0.44	2.48	9	1
1:A:869:ILE:O	1:A:897:LEU:HD12	0.44	2.12	7	1
1:A:843:GLN:HG3	1:A:929:LEU:CD2	0.44	2.43	16	1
1:A:902:VAL:HA	1:A:923:LEU:O	0.44	2.13	17	2
1:A:829:VAL:HG21	1:A:840:LEU:HD11	0.43	1.90	5	1
1:A:710:TRP:CZ3	1:A:739:GLN:HG3	0.43	2.48	7	1
1:A:713:VAL:HG11	1:A:718:LEU:HB3	0.43	1.88	13	2
1:A:890:ILE:HG12	1:A:895:LEU:HD13	0.43	1.88	12	1
1:A:789:HIS:HA	1:A:792:PRO:HG2	0.43	1.90	15	1
1:A:871:ILE:HG12	1:A:939:TYR:HD2	0.43	1.73	14	1
1:A:788:PRO:O	1:A:789:HIS:HB3	0.43	2.14	8	1
1:A:753:VAL:HG13	1:A:755:LYS:HB2	0.43	1.91	18	1
1:A:772:ILE:HG13	1:A:773:PRO:CD	0.43	2.32	1	1
1:A:711:LEU:HD21	1:A:719:CYS:HB2	0.43	1.89	6	1
1:A:718:LEU:HD21	1:A:765:PHE:HD2	0.43	1.74	12	1
1:A:919:MET:HB3	1:A:920:ASP:H	0.43	1.45	13	1
1:A:872:VAL:HG22	1:A:897:LEU:HD12	0.43	1.91	18	1
1:A:875:ASP:HB3	1:A:902:VAL:HG22	0.43	1.90	5	1
1:A:722:LEU:HD13	1:A:748:ILE:HG21	0.43	1.91	13	1
1:A:867:ASN:O	1:A:868:HIS:CB	0.43	2.67	19	1
1:A:736:TYR:HE2	1:A:755:LYS:HD3	0.43	1.74	4	1
1:A:751:GLU:HG2	1:A:767:ARG:NH2	0.43	2.20	9	1
1:A:871:ILE:HG13	1:A:898:PRO:HG2	0.43	1.89	15	1
1:A:794:LEU:HA	1:A:797:ARG:HD3	0.43	1.90	18	1
1:A:928:THR:OG1	1:A:931:VAL:HB	0.43	2.14	6	1
1:A:909:GLU:O	1:A:922:CYS:HB2	0.43	2.14	7	1
1:A:903:THR:O	1:A:924:SER:HA	0.42	2.14	2	3
1:A:719:CYS:O	1:A:723:GLU:HB3	0.42	2.14	3	1
1:A:794:LEU:O	1:A:798:ILE:HB	0.42	2.14	7	1
1:A:718:LEU:O	1:A:722:LEU:HG	0.42	2.14	9	1
1:A:877:ASN:CB	1:A:925:LYS:HE3	0.42	2.40	12	1
1:A:715:ASN:HB3	1:A:718:LEU:HB2	0.42	1.90	17	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:756:LYS:O	1:A:756:LYS:HD2	0.42	2.13	18	1
1:A:934:GLN:HG2	1:A:935:THR:N	0.42	2.29	20	1
1:A:795:LEU:HD22	1:A:795:LEU:HA	0.42	1.75	17	2
1:A:774:LEU:HG	1:A:776:LYS:HG2	0.42	1.91	7	1
1:A:797:ARG:HA	1:A:800:LEU:HD13	0.42	1.89	2	1
1:A:718:LEU:HD11	1:A:765:PHE:HD2	0.42	1.73	2	1
1:A:829:VAL:HG21	1:A:840:LEU:HD12	0.42	1.90	3	1
1:A:875:ASP:OD1	1:A:875:ASP:N	0.42	2.52	5	1
1:A:872:VAL:HB	1:A:899:VAL:HG13	0.42	1.91	7	1
1:A:705:SER:CB	1:A:730:GLY:HA3	0.42	2.45	10	1
1:A:711:LEU:HD12	1:A:719:CYS:SG	0.42	2.54	10	1
1:A:847:LEU:HD21	1:A:933:LYS:HG2	0.42	1.90	11	1
1:A:900:ILE:CG2	1:A:923:LEU:HG	0.42	2.45	5	1
1:A:797:ARG:HG3	1:A:798:ILE:N	0.42	2.29	9	1
1:A:861:LEU:HD11	1:A:889:ARG:HB3	0.42	1.92	17	1
1:A:830:VAL:HG11	1:A:860:ALA:HB2	0.42	1.92	8	1
1:A:835:ILE:O	1:A:838:ARG:HG3	0.42	2.15	15	3
1:A:889:ARG:HD3	1:A:892:GLN:OE1	0.42	2.15	5	1
1:A:844:LEU:HD22	1:A:851:CYS:HB3	0.42	1.90	15	1
1:A:945:LYS:HB2	1:A:945:LYS:HE2	0.42	1.37	16	1
1:A:710:TRP:C	1:A:711:LEU:HD23	0.42	2.35	18	1
1:A:757:TRP:CD1	1:A:762:VAL:HB	0.41	2.49	13	2
1:A:830:VAL:O	1:A:874:SER:HA	0.41	2.15	8	1
1:A:830:VAL:HG13	1:A:874:SER:HA	0.41	1.92	13	1
1:A:750:ASP:O	1:A:751:GLU:HB2	0.41	2.15	18	1
1:A:774:LEU:CB	1:A:782:VAL:HG22	0.41	2.45	2	1
1:A:828:LEU:HD23	1:A:872:VAL:HG13	0.41	1.91	10	1
1:A:825:MET:O	1:A:849:TYR:HB3	0.41	2.14	12	1
1:A:772:ILE:CG1	1:A:773:PRO:HD2	0.41	2.37	15	1
1:A:707:LYS:HB3	1:A:799:TYR:CE2	0.41	2.50	16	1
1:A:840:LEU:HA	1:A:843:GLN:NE2	0.41	2.29	18	1
1:A:902:VAL:CG2	1:A:925:LYS:HA	0.41	2.46	13	1
1:A:768:ARG:HA	1:A:768:ARG:HD2	0.41	1.73	7	1
1:A:707:LYS:HE2	1:A:799:TYR:CE2	0.41	2.50	9	1
1:A:724:THR:O	1:A:728:ARG:HB3	0.41	2.16	11	1
1:A:944:ARG:HG3	1:A:945:LYS:N	0.41	2.29	8	1
1:A:844:LEU:HD13	1:A:849:TYR:HB2	0.41	1.93	10	1
1:A:875:ASP:HB3	1:A:925:LYS:HE3	0.41	1.93	13	1
1:A:887:THR:O	1:A:891:ARG:HG2	0.41	2.15	5	1
1:A:751:GLU:CD	1:A:769:HIS:HB2	0.41	2.36	15	1
1:A:869:ILE:O	1:A:897:LEU:HD22	0.41	2.16	18	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:720:GLN:O	1:A:723:GLU:HG2	0.41	2.16	4	1
1:A:764:THR:HB	1:A:782:VAL:HG22	0.41	1.91	9	1
1:A:931:VAL:O	1:A:934:GLN:HG2	0.41	2.16	11	1
1:A:838:ARG:HG3	1:A:839:LEU:N	0.41	2.30	13	1
1:A:719:CYS:SG	1:A:720:GLN:N	0.41	2.94	14	1
1:A:751:GLU:OE1	1:A:767:ARG:HB2	0.41	2.15	15	1
1:A:711:LEU:HD22	1:A:733:VAL:CG1	0.41	2.46	16	1
1:A:826:MET:HG3	1:A:868:HIS:O	0.41	2.16	16	1
1:A:913:ARG:HG3	1:A:914:CYS:N	0.41	2.30	2	1
1:A:746:VAL:HA	1:A:761:ALA:O	0.41	2.16	10	1
1:A:834:PRO:HA	1:A:837:ARG:HD3	0.41	1.92	18	1
1:A:923:LEU:HD12	1:A:923:LEU:HA	0.40	1.77	18	1
1:A:910:GLU:H	1:A:910:GLU:HG3	0.40	1.52	5	2
1:A:916:GLU:HG2	1:A:917:SER:N	0.40	2.31	5	1
1:A:861:LEU:HD21	1:A:893:LEU:HG	0.40	1.93	6	1
1:A:726:LEU:HD23	1:A:731:ILE:HG21	0.40	1.93	9	1
1:A:876:VAL:HG22	1:A:878:MET:H	0.40	1.76	13	1
1:A:913:ARG:NH1	1:A:921:SER:HA	0.40	2.31	4	1
1:A:710:TRP:CZ3	1:A:734:THR:HB	0.40	2.52	15	1
1:A:718:LEU:HG	1:A:787:ALA:HB2	0.40	1.92	15	1
1:A:827:ILE:O	1:A:851:CYS:HA	0.40	2.17	9	1
1:A:773:PRO:HB2	1:A:774:LEU:H	0.40	1.59	14	1
1:A:913:ARG:HD2	1:A:913:ARG:O	0.40	2.16	10	1
1:A:756:LYS:O	1:A:757:TRP:HB3	0.40	2.16	18	1

6.3 Torsion angles (i)

6.3.1 Protein backbone (i)

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

Mol	Chain	Analysed	Favoured	Allowed	Outliers	Percentiles
1	A	217/254 (85%)	185±3 (85±1%)	23±3 (11±1%)	9±2 (4±1%)	5 31
All	All	4340/5080 (85%)	3705 (85%)	459 (11%)	176 (4%)	5 31

All 36 unique Ramachandran outliers are listed below. They are sorted by the frequency of occurrence in the ensemble.

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	920	ASP	20
1	A	775	GLU	15
1	A	856	ASP	11
1	A	788	PRO	10
1	A	738	GLY	10
1	A	785	VAL	10
1	A	773	PRO	9
1	A	789	HIS	8
1	A	869	ILE	8
1	A	774	LEU	7
1	A	894	GLY	6
1	A	868	HIS	6
1	A	919	MET	6
1	A	926	PRO	5
1	A	706	GLY	5
1	A	757	TRP	4
1	A	884	TYR	3
1	A	907	LEU	3
1	A	771	GLY	3
1	A	730	GLY	3
1	A	824	ASP	3
1	A	770	ILE	3
1	A	867	ASN	2
1	A	768	ARG	2
1	A	769	HIS	2
1	A	834	PRO	2
1	A	779	GLY	1
1	A	778	PRO	1
1	A	905	ASN	1
1	A	767	ARG	1
1	A	948	ASP	1
1	A	878	MET	1
1	A	705	SER	1
1	A	800	LEU	1
1	A	883	GLY	1
1	A	908	ALA	1

6.3.2 Protein sidechains [\(i\)](#)

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

Mol	Chain	Analysed	Rotameric	Outliers	Percentiles
1	A	189/219 (86%)	103±4 (54±2%)	86±4 (46±2%)	0 2
All	All	3780/4380 (86%)	2059 (54%)	1721 (46%)	0 2

All 168 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	742	THR	20
1	A	747	LEU	20
1	A	851	CYS	20
1	A	755	LYS	19
1	A	798	ILE	19
1	A	844	LEU	19
1	A	853	THR	19
1	A	887	THR	19
1	A	896	THR	19
1	A	903	THR	19
1	A	717	SER	18
1	A	852	LYS	18
1	A	895	LEU	18
1	A	922	CYS	18
1	A	928	THR	18
1	A	791	LEU	18
1	A	734	THR	17
1	A	784	SER	17
1	A	795	LEU	17
1	A	797	ARG	17
1	A	874	SER	17
1	A	897	LEU	17
1	A	902	VAL	17
1	A	936	LEU	17
1	A	944	ARG	17
1	A	718	LEU	17
1	A	735	THR	17
1	A	829	VAL	17
1	A	766	CYS	16
1	A	767	ARG	16
1	A	774	LEU	16
1	A	839	LEU	16
1	A	886	LEU	16
1	A	932	ILE	16
1	A	864	LEU	16
1	A	889	ARG	16

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	838	ARG	16
1	A	711	LEU	15
1	A	785	VAL	15
1	A	840	LEU	15
1	A	913	ARG	15
1	A	917	SER	15
1	A	910	GLU	15
1	A	705	SER	14
1	A	832	ASP	14
1	A	885	ARG	14
1	A	915	LEU	14
1	A	923	LEU	14
1	A	938	LEU	14
1	A	942	ARG	14
1	A	921	SER	14
1	A	737	GLU	13
1	A	754	SER	13
1	A	768	ARG	13
1	A	776	LYS	13
1	A	924	SER	13
1	A	720	GLN	13
1	A	835	ILE	12
1	A	847	LEU	12
1	A	909	GLU	12
1	A	929	LEU	12
1	A	941	GLU	12
1	A	709	CYS	12
1	A	789	HIS	12
1	A	723	GLU	12
1	A	729	SER	12
1	A	783	HIS	12
1	A	876	VAL	12
1	A	891	ARG	12
1	A	790	GLU	11
1	A	933	LYS	11
1	A	728	ARG	11
1	A	826	MET	11
1	A	846	SER	11
1	A	861	LEU	11
1	A	825	MET	11
1	A	866	LYS	11
1	A	925	LYS	11

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	893	LEU	11
1	A	756	LYS	10
1	A	780	GLU	10
1	A	858	VAL	10
1	A	873	LEU	10
1	A	877	ASN	10
1	A	884	TYR	10
1	A	930	ASP	10
1	A	934	GLN	10
1	A	708	ARG	10
1	A	758	GLN	10
1	A	769	HIS	10
1	A	794	LEU	10
1	A	850	GLN	10
1	A	911	LYS	10
1	A	945	LYS	10
1	A	947	ARG	10
1	A	837	ARG	10
1	A	750	ASP	9
1	A	760	ARG	9
1	A	828	LEU	9
1	A	919	MET	9
1	A	878	MET	9
1	A	907	LEU	9
1	A	916	GLU	9
1	A	732	VAL	8
1	A	744	GLU	8
1	A	799	TYR	8
1	A	843	GLN	8
1	A	863	VAL	8
1	A	830	VAL	8
1	A	831	ASP	8
1	A	868	HIS	8
1	A	855	ASN	8
1	A	870	ASP	8
1	A	722	LEU	7
1	A	939	TYR	7
1	A	714	ARG	7
1	A	833	HIS	7
1	A	867	ASN	7
1	A	912	GLN	7
1	A	740	GLU	7

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	733	VAL	7
1	A	875	ASP	7
1	A	890	ILE	7
1	A	719	CYS	6
1	A	865	SER	6
1	A	749	THR	6
1	A	859	ASP	6
1	A	772	ILE	6
1	A	927	VAL	6
1	A	869	ILE	5
1	A	946	SER	5
1	A	739	GLN	5
1	A	751	GLU	5
1	A	721	PHE	5
1	A	727	GLN	5
1	A	892	GLN	5
1	A	899	VAL	5
1	A	748	ILE	5
1	A	707	LYS	5
1	A	905	ASN	5
1	A	948	ASP	5
1	A	800	LEU	4
1	A	836	ASN	4
1	A	842	ASP	4
1	A	871	ILE	4
1	A	849	TYR	3
1	A	824	ASP	3
1	A	872	VAL	3
1	A	888	GLN	3
1	A	763	VAL	3
1	A	775	GLU	3
1	A	770	ILE	2
1	A	900	ILE	2
1	A	731	ILE	2
1	A	931	VAL	2
1	A	827	ILE	2
1	A	782	VAL	2
1	A	765	PHE	2
1	A	862	ASN	2
1	A	725	SER	1
1	A	753	VAL	1
1	A	746	VAL	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	757	TRP	1
1	A	715	ASN	1
1	A	764	THR	1
1	A	752	VAL	1
1	A	726	LEU	1
1	A	920	ASP	1

6.3.3 RNA [\(i\)](#)

There are no RNA molecules in this entry.

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

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

6.5 Carbohydrates [\(i\)](#)

There are no monosaccharides 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 90% for the well-defined parts and 88% for the entire structure.

7.1 Chemical shift list 1

File name: working_cs.cif

Chemical shift list name: *assigned_chem_shift_list_1*

7.1.1 Bookkeeping (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	3026
Number of shifts mapped to atoms	3026
Number of unparsed shifts	0
Number of shifts with mapping errors	0
Number of shifts with mapping warnings	0
Number of shift outliers (ShiftChecker)	4

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
$^{13}\text{C}_\alpha$	250	-0.11 \pm 0.10	None needed (< 0.5 ppm)
$^{13}\text{C}_\beta$	234	0.40 \pm 0.08	None needed (< 0.5 ppm)
$^{13}\text{C}'$	244	0.00 \pm 0.11	None needed (< 0.5 ppm)
^{15}N	230	-0.48 \pm 0.19	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 90%, i.e. 2705 atoms were assigned a chemical shift out of a possible 3015. 0 out of 49 assigned methyl groups (LEU and VAL) were assigned stereospecifically.

	Total	^1H	^{13}C	^{15}N
Backbone	1065/1080 (99%)	434/438 (99%)	429/434 (99%)	202/208 (97%)
Sidechain	1537/1794 (86%)	1057/1172 (90%)	474/547 (87%)	6/75 (8%)

Continued on next page...

Continued from previous page...

	Total	¹ H	¹³ C	¹⁵ N
Aromatic	103/141 (73%)	52/68 (76%)	47/60 (78%)	4/13 (31%)
Overall	2705/3015 (90%)	1543/1678 (92%)	950/1041 (91%)	212/296 (72%)

The following table shows the completeness of the chemical shift assignments for the full structure. The overall completeness is 88%, i.e. 3026 atoms were assigned a chemical shift out of a possible 3426. 0 out of 53 assigned methyl groups (LEU and VAL) were assigned stereospecifically.

	Total	¹ H	¹³ C	¹⁵ N
Backbone	1218/1263 (96%)	494/513 (96%)	494/508 (97%)	230/242 (95%)
Sidechain	1705/2022 (84%)	1171/1319 (89%)	527/624 (84%)	7/79 (9%)
Aromatic	103/141 (73%)	52/68 (76%)	47/60 (78%)	4/13 (31%)
Overall	3026/3426 (88%)	1717/1900 (90%)	1068/1192 (90%)	241/334 (72%)

7.1.4 Statistically unusual chemical shifts [\(i\)](#)

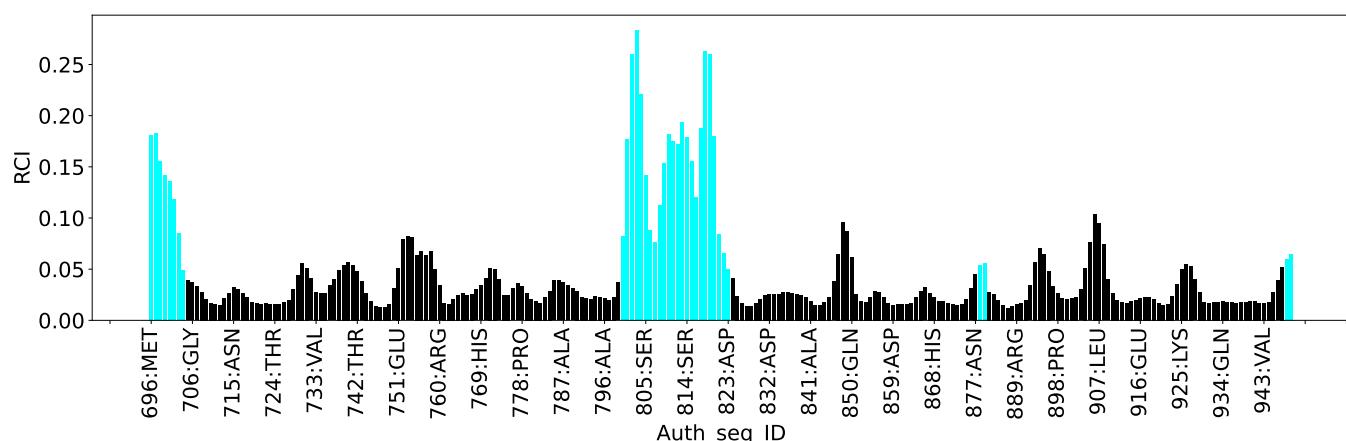
The following table lists the statistically unusual chemical shifts. These are statistical measures, and large deviations from the mean do not necessarily imply incorrect assignments. Molecules containing paramagnetic centres or hemes are expected to give rise to anomalous chemical shifts.

List Id	Chain	Res	Type	Atom	Shift, ppm	Expected range, ppm	Z-score
1	A	775	GLU	HB3	-0.57	0.95 – 3.05	-12.2
1	A	775	GLU	HG3	0.28	1.20 – 3.30	-9.4
1	A	747	LEU	HB3	-1.22	-0.26 – 3.31	-7.7
1	A	741	PRO	HG3	-0.20	0.33 – 3.48	-6.7

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

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

Random coil index (RCI) for chain A:



8 NMR restraints analysis i

8.1 Conformationally restricting restraints i

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	3459
Intra-residue ($ i-j =0$)	370
Sequential ($ i-j =1$)	938
Medium range ($ i-j >1$ and $ i-j <5$)	810
Long range ($ i-j \geq 5$)	1139
Inter-chain	0
Hydrogen bond restraints	202
Disulfide bond restraints	0
Total dihedral-angle restraints	0
Number of unmapped restraints	0
Number of restraints per residue	13.6
Number of long range restraints per residue ¹	4.8

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 i

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 i

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)	27.2	0.2
0.2-0.5 (Medium)	21.9	0.5
>0.5 (Large)	1.9	1.76

8.2.2 Average number of dihedral-angle violations per model [\(i\)](#)

Dihedral-angle violations less than 1° are not included in the calculation. There are no dihedral-angle violations

9 Distance violation analysis (i)

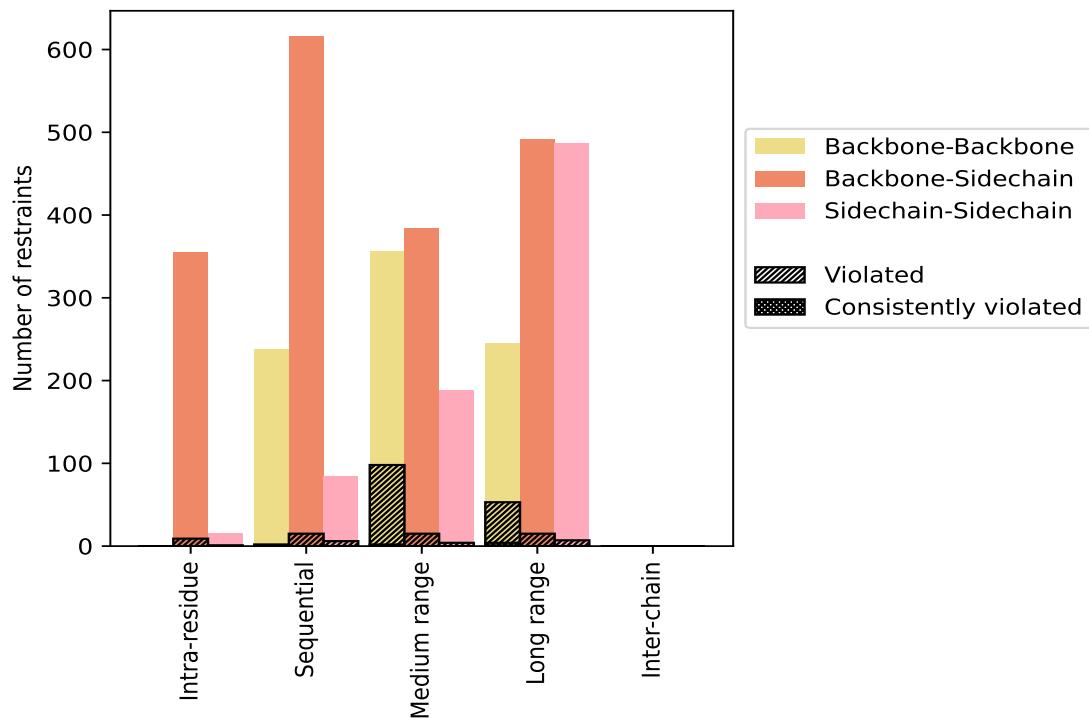
9.1 Summary of distance violations (i)

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.

Restraints type	Count	% ¹	Violated ³			Consistently Violated ⁴		
			Count	% ²	% ¹	Count	% ²	% ¹
Intra-residue ($ i-j =0$)	370	10.7	10	2.7	0.3	0	0.0	0.0
Backbone-Backbone	0	0.0	0	0.0	0.0	0	0.0	0.0
Backbone-Sidechain	355	10.3	9	2.5	0.3	0	0.0	0.0
Sidechain-Sidechain	15	0.4	1	6.7	0.0	0	0.0	0.0
Sequential ($ i-j =1$)	938	27.1	23	2.5	0.7	0	0.0	0.0
Backbone-Backbone	238	6.9	2	0.8	0.1	0	0.0	0.0
Backbone-Sidechain	616	17.8	15	2.4	0.4	0	0.0	0.0
Sidechain-Sidechain	84	2.4	6	7.1	0.2	0	0.0	0.0
Medium range ($ i-j >1 \text{ & } i-j <5$)	810	23.4	29	3.6	0.8	1	0.1	0.0
Backbone-Backbone	238	6.9	10	4.2	0.3	1	0.4	0.0
Backbone-Sidechain	384	11.1	15	3.9	0.4	0	0.0	0.0
Sidechain-Sidechain	188	5.4	4	2.1	0.1	0	0.0	0.0
Long range ($ i-j \geq 5$)	1139	32.9	30	2.6	0.9	0	0.0	0.0
Backbone-Backbone	161	4.7	8	5.0	0.2	0	0.0	0.0
Backbone-Sidechain	492	14.2	15	3.0	0.4	0	0.0	0.0
Sidechain-Sidechain	486	14.1	7	1.4	0.2	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	202	5.8	133	65.8	3.8	5	2.5	0.1
Disulfide bond	0	0.0	0	0.0	0.0	0	0.0	0.0
Total	3459	100.0	225	6.5	6.5	6	0.2	0.2
Backbone-Backbone	839	24.3	153	18.2	4.4	6	0.7	0.2
Backbone-Sidechain	1847	53.4	54	2.9	1.6	0	0.0	0.0
Sidechain-Sidechain	773	22.3	18	2.3	0.5	0	0.0	0.0

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

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



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

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

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

Model ID	Number of violations						Mean (Å)	Max (Å)	SD ⁶ (Å)	Median (Å)
	IR ¹	SQ ²	MR ³	LR ⁴	IC ⁵	Total				
1	2	4	28	16	0	50	0.2	0.69	0.1	0.17
2	0	4	30	14	0	48	0.29	1.76	0.33	0.21
3	1	2	32	14	0	49	0.23	1.09	0.16	0.2
4	0	5	25	23	0	53	0.2	0.72	0.09	0.2
5	0	5	32	24	0	61	0.19	0.35	0.06	0.18
6	1	3	29	22	0	55	0.22	1.27	0.19	0.19
7	1	3	31	19	0	54	0.25	1.35	0.23	0.21
8	1	5	28	15	0	49	0.22	1.07	0.15	0.19
9	2	3	29	22	0	56	0.24	1.4	0.22	0.2
10	0	6	30	23	0	59	0.2	0.89	0.11	0.19
11	0	2	28	21	0	51	0.22	0.51	0.08	0.21

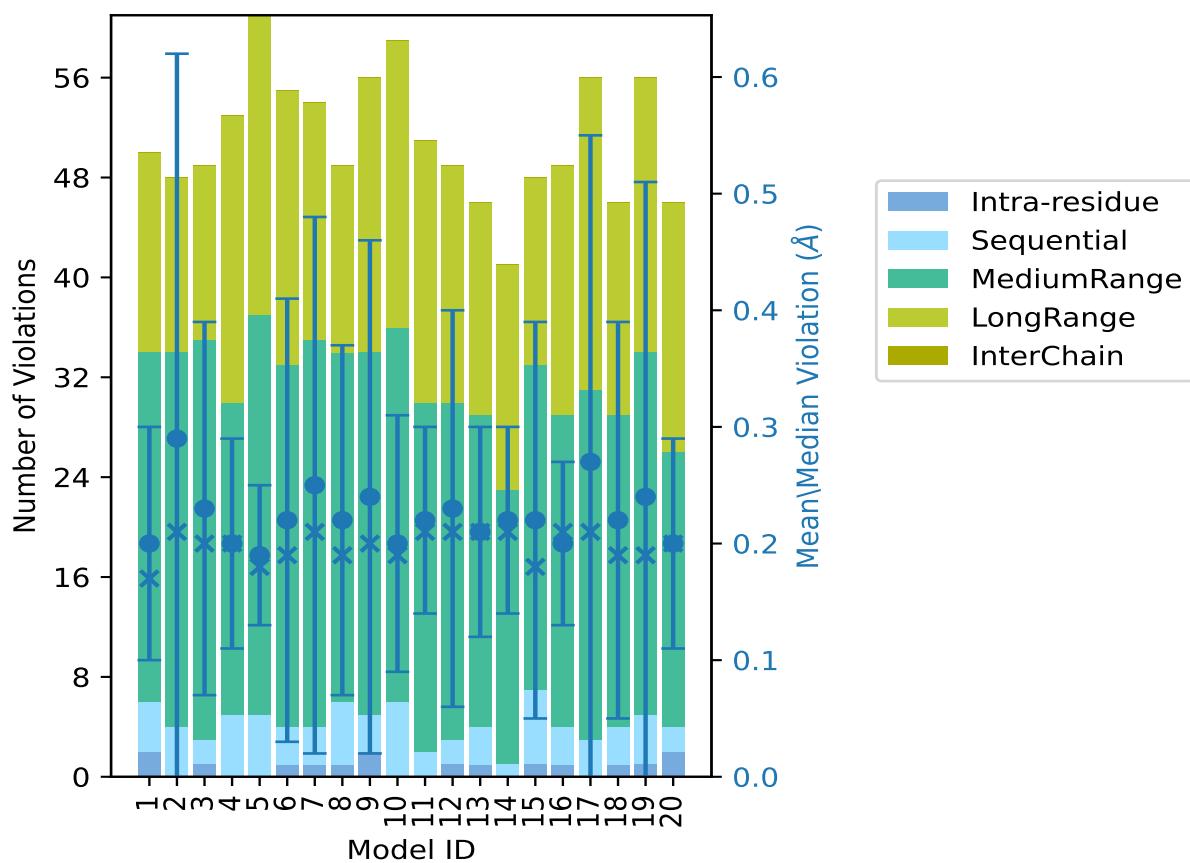
Continued on next page...

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				
12	1	2	27	19	0	49	0.23	1.14	0.17	0.21
13	1	3	25	17	0	46	0.21	0.67	0.09	0.21
14	0	1	22	18	0	41	0.22	0.52	0.08	0.21
15	1	6	26	15	0	48	0.22	1.11	0.17	0.18
16	1	3	25	20	0	49	0.2	0.51	0.07	0.21
17	0	3	28	25	0	56	0.27	1.58	0.28	0.21
18	1	3	25	17	0	46	0.22	1.24	0.17	0.19
19	1	4	29	22	0	56	0.24	1.6	0.27	0.19
20	2	2	22	20	0	46	0.2	0.71	0.09	0.2

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

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



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

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

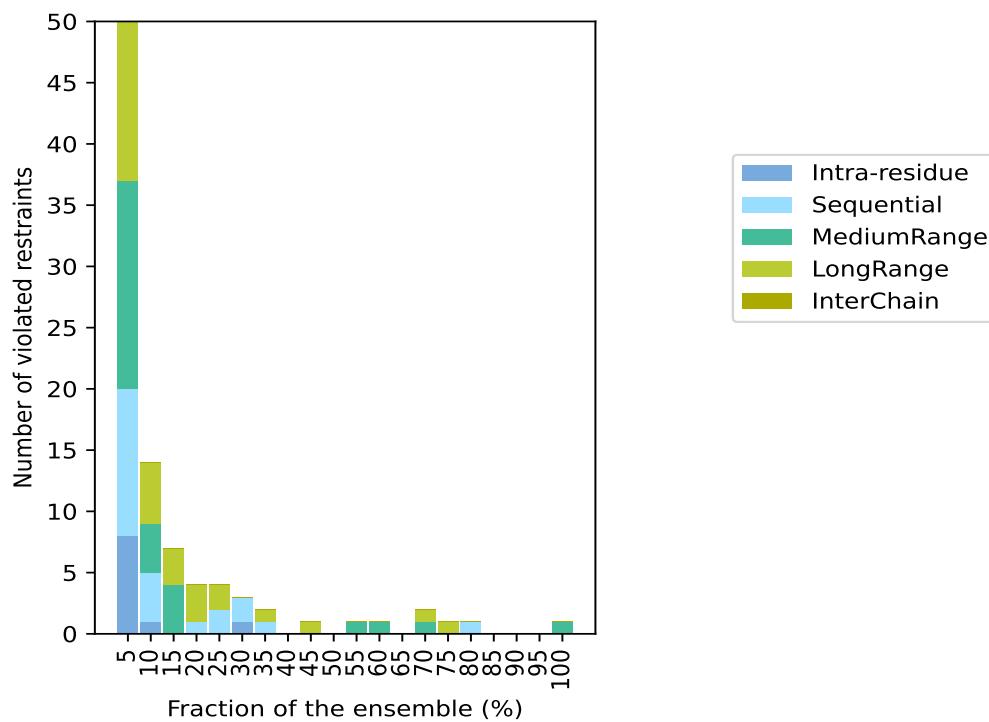
Violation analysis may find that some restraints are violated in few models and some are violated in most of models. The following table provides this information as number of violated restraints for a given fraction of the ensemble. In total, 3165(IR:360, SQ:915, MR:781, LR:1109, IC:0) restraints are not violated in the ensemble.

IR ¹	SQ ²	MR ³	LR ⁴	IC ⁵	Total	Fraction of the ensemble	
						Count ⁶	%
8	12	17	13	0	50	1	5.0
1	4	4	5	0	14	2	10.0
0	0	4	3	0	7	3	15.0
0	1	0	3	0	4	4	20.0
0	2	0	2	0	4	5	25.0
1	2	0	0	0	3	6	30.0
0	1	0	1	0	2	7	35.0
0	0	0	0	0	0	8	40.0
0	0	0	1	0	1	9	45.0
0	0	0	0	0	0	10	50.0
0	0	1	0	0	1	11	55.0
0	0	1	0	0	1	12	60.0
0	0	0	0	0	0	13	65.0
0	0	1	1	0	2	14	70.0
0	0	0	1	0	1	15	75.0
0	1	0	0	0	1	16	80.0
0	0	0	0	0	0	17	85.0
0	0	0	0	0	0	18	90.0
0	0	0	0	0	0	19	95.0
0	0	1	0	0	1	20	100.0

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

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

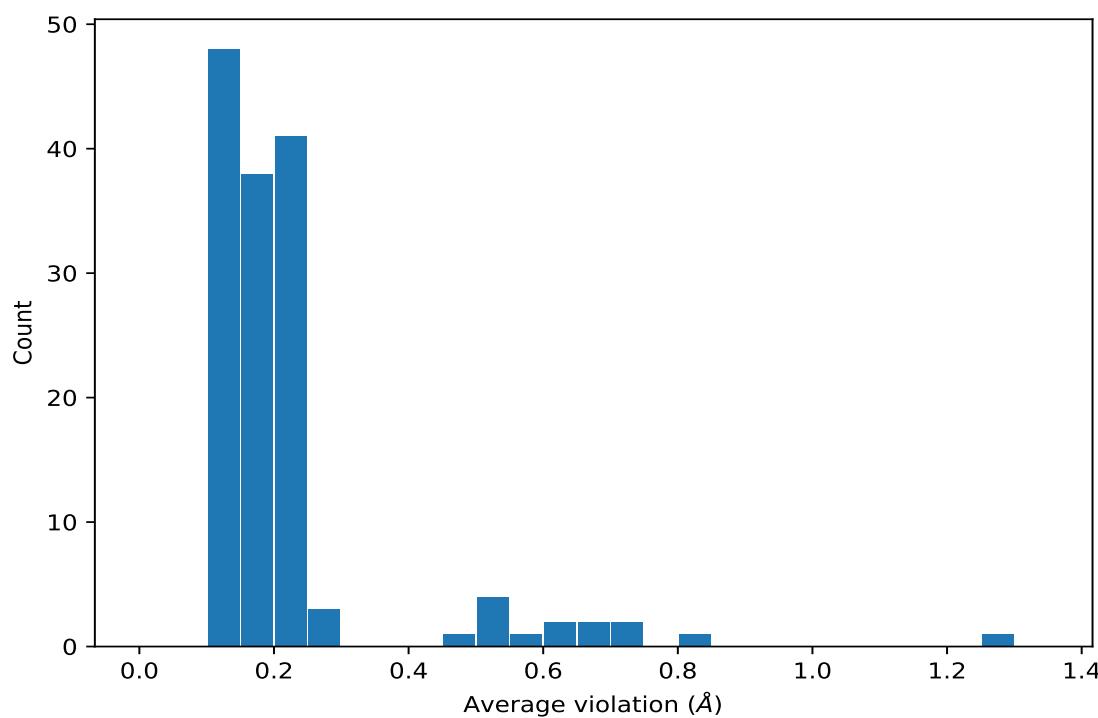
9.3.1 Bar graph : Distance violation statistics for the ensemble [\(i\)](#)



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)
(1,147)	1:A:899:VAL:H	1:A:919:MET:O	20	0.28	0.03	0.28
(1,95)	1:A:835:ILE:O	1:A:839:LEU:H	20	0.26	0.04	0.24
(1,125)	1:A:872:VAL:H	1:A:898:PRO:O	20	0.24	0.03	0.24
(1,148)	1:A:899:VAL:N	1:A:919:MET:O	20	0.21	0.03	0.22
(1,126)	1:A:872:VAL:N	1:A:898:PRO:O	20	0.21	0.03	0.2
(2,254)	1:A:716:ALA:H	1:A:720:GLN:H	20	0.16	0.03	0.16
(1,89)	1:A:831:ASP:H	1:A:854:ALA:O	19	0.27	0.03	0.26
(1,197)	1:A:942:ARG:O	1:A:946:SER:H	18	0.23	0.05	0.22
(1,22)	1:A:717:SER:O	1:A:721:PHE:H	18	0.23	0.02	0.22
(1,30)	1:A:721:PHE:O	1:A:725:SER:H	17	0.21	0.04	0.21
(1,18)	1:A:712:ALA:O	1:A:750:ASP:H	16	0.24	0.03	0.24
(1,149)	1:A:899:VAL:O	1:A:921:SER:H	16	0.23	0.04	0.24
(1,68)	1:A:795:LEU:O	1:A:799:TYR:H	16	0.22	0.03	0.22
(1,121)	1:A:862:ASN:O	1:A:866:LYS:H	16	0.22	0.04	0.22
(1,103)	1:A:839:LEU:O	1:A:843:GLN:H	16	0.21	0.05	0.22
(2,956)	1:A:775:GLU:HG2	1:A:776:LYS:H	16	0.16	0.03	0.16

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)	Median (Å)
(3,665)	1:A:857:GLY:HA2	1:A:886:LEU:H	15	0.71	0.38	0.51
(1,91)	1:A:832:ASP:H	1:A:875:ASP:O	15	0.24	0.06	0.23
(1,69)	1:A:825:MET:O	1:A:850:GLN:H	15	0.23	0.05	0.23
(1,111)	1:A:843:GLN:O	1:A:847:LEU:H	15	0.22	0.04	0.22
(2,508)	1:A:736:TYR:HE1	1:A:738:GLY:HA3	14	0.61	0.4	0.51
(2,508)	1:A:736:TYR:HE2	1:A:738:GLY:HA3	14	0.61	0.4	0.51
(1,56)	1:A:766:CYS:H	1:A:783:HIS:O	14	0.23	0.06	0.22
(1,161)	1:A:910:GLU:O	1:A:914:CYS:H	14	0.22	0.04	0.22
(1,24)	1:A:718:LEU:O	1:A:722:LEU:H	14	0.21	0.05	0.23
(1,150)	1:A:899:VAL:O	1:A:921:SER:N	14	0.17	0.04	0.17
(3,347)	1:A:775:GLU:H	1:A:780:GLU:HA	14	0.14	0.02	0.14
(1,23)	1:A:718:LEU:O	1:A:722:LEU:N	13	0.19	0.04	0.2
(1,29)	1:A:721:PHE:O	1:A:725:SER:N	13	0.14	0.02	0.13
(1,21)	1:A:717:SER:O	1:A:721:PHE:N	13	0.13	0.01	0.13
(2,776)	1:A:759:GLY:HA2	1:A:761:ALA:H	12	0.23	0.08	0.23
(1,17)	1:A:712:ALA:O	1:A:750:ASP:N	12	0.16	0.03	0.16
(2,1771)	1:A:883:GLY:HA3	1:A:886:LEU:H	11	0.54	0.34	0.38
(1,189)	1:A:938:LEU:O	1:A:942:ARG:H	11	0.21	0.05	0.21
(1,117)	1:A:860:ALA:O	1:A:864:LEU:H	11	0.19	0.06	0.19
(1,119)	1:A:861:LEU:O	1:A:865:SER:H	10	0.21	0.02	0.21
(1,141)	1:A:887:THR:O	1:A:891:ARG:H	10	0.2	0.05	0.21
(1,104)	1:A:839:LEU:O	1:A:843:GLN:N	10	0.17	0.03	0.16
(1,96)	1:A:835:ILE:O	1:A:839:LEU:N	10	0.16	0.05	0.14
(1,62)	1:A:792:PRO:O	1:A:796:ALA:H	9	0.19	0.04	0.19
(2,936)	1:A:774:LEU:HG	1:A:781:TRP:HA	9	0.12	0.01	0.12
(1,193)	1:A:940:ALA:O	1:A:944:ARG:H	8	0.22	0.03	0.2
(1,71)	1:A:826:MET:O	1:A:870:ASP:H	8	0.22	0.07	0.21
(1,157)	1:A:908:ALA:O	1:A:912:GLN:H	8	0.2	0.04	0.21
(1,99)	1:A:837:ARG:O	1:A:841:ALA:H	8	0.2	0.04	0.22
(1,109)	1:A:842:ASP:O	1:A:846:SER:H	8	0.2	0.04	0.2
(1,142)	1:A:887:THR:O	1:A:891:ARG:N	8	0.17	0.02	0.18
(1,90)	1:A:831:ASP:N	1:A:854:ALA:O	8	0.15	0.02	0.15
(1,162)	1:A:910:GLU:O	1:A:914:CYS:N	8	0.15	0.03	0.14
(1,203)	1:A:831:ASP:OD1	1:A:925:LYS:HZ3	7	0.85	0.69	0.32
(2,575)	1:A:744:GLU:HG3	1:A:745:ASP:H	7	0.17	0.05	0.15
(1,195)	1:A:941:GLU:O	1:A:945:LYS:H	6	0.21	0.02	0.21
(1,64)	1:A:793:ALA:O	1:A:797:ARG:H	6	0.2	0.05	0.22
(1,198)	1:A:942:ARG:O	1:A:946:SER:N	6	0.2	0.04	0.21
(2,1141)	1:A:798:ILE:H	1:A:798:ILE:HG12	6	0.19	0.04	0.2
(1,201)	1:A:944:ARG:O	1:A:948:ASP:H	6	0.18	0.04	0.2
(2,482)	1:A:734:THR:HA	1:A:735:THR:HB	6	0.15	0.04	0.15
(1,158)	1:A:908:ALA:O	1:A:912:GLN:N	6	0.14	0.03	0.14

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)	Median (Å)
(2,1774)	1:A:884:TYR:H	1:A:885:ARG:HD2	6	0.14	0.02	0.14
(2,18)	1:A:706:GLY:H	1:A:730:GLY:HA2	5	0.59	0.25	0.71
(3,4)	1:A:704:LEU:HD21	1:A:730:GLY:HA2	5	0.53	0.26	0.47
(3,4)	1:A:704:LEU:HD22	1:A:730:GLY:HA2	5	0.53	0.26	0.47
(3,4)	1:A:704:LEU:HD23	1:A:730:GLY:HA2	5	0.53	0.26	0.47
(1,113)	1:A:858:VAL:O	1:A:862:ASN:H	5	0.22	0.02	0.21
(1,131)	1:A:874:SER:O	1:A:902:VAL:H	5	0.2	0.04	0.2
(1,129)	1:A:874:SER:H	1:A:900:ILE:O	5	0.18	0.04	0.21
(1,163)	1:A:911:LYS:O	1:A:915:LEU:H	5	0.18	0.07	0.14
(1,11)	1:A:711:LEU:H	1:A:734:THR:O	5	0.17	0.03	0.16
(2,1448)	1:A:840:LEU:HG	1:A:841:ALA:HA	5	0.15	0.02	0.14
(2,585)	1:A:745:ASP:HA	1:A:746:VAL:HB	5	0.12	0.01	0.12
(1,204)	1:A:831:ASP:OD1	1:A:925:LYS:NZ	4	1.27	0.66	1.59
(1,199)	1:A:943:VAL:O	1:A:947:ARG:H	4	0.22	0.04	0.22
(1,2)	1:A:707:LYS:O	1:A:732:VAL:H	4	0.22	0.05	0.22
(1,143)	1:A:888:GLN:O	1:A:892:GLN:H	4	0.21	0.04	0.21
(1,101)	1:A:838:ARG:O	1:A:842:ASP:H	4	0.21	0.02	0.22
(1,8)	1:A:710:TRP:H	1:A:746:VAL:O	4	0.19	0.04	0.18
(1,92)	1:A:832:ASP:N	1:A:875:ASP:O	4	0.18	0.04	0.18
(1,72)	1:A:826:MET:O	1:A:870:ASP:N	4	0.18	0.04	0.18
(1,63)	1:A:793:ALA:O	1:A:797:ARG:N	4	0.16	0.04	0.16
(3,58)	1:A:711:LEU:HG	1:A:734:THR:H	4	0.13	0.01	0.12
(2,1304)	1:A:828:LEU:HB3	1:A:852:LYS:H	4	0.13	0.03	0.11
(1,70)	1:A:825:MET:O	1:A:850:GLN:N	4	0.12	0.02	0.12
(2,2009)	1:A:922:CYS:HA	1:A:923:LEU:HB3	4	0.11	0.0	0.11
(2,16)	1:A:705:SER:HB2	1:A:730:GLY:HA2	3	0.7	0.33	0.8
(2,16)	1:A:705:SER:HB3	1:A:730:GLY:HA2	3	0.7	0.33	0.8
(2,759)	1:A:757:TRP:HD1	1:A:759:GLY:HA2	3	0.46	0.25	0.63
(1,54)	1:A:764:THR:O	1:A:783:HIS:H	3	0.19	0.03	0.18
(2,1096)	1:A:794:LEU:HD11	1:A:798:ILE:H	3	0.18	0.04	0.17
(2,1096)	1:A:794:LEU:HD12	1:A:798:ILE:H	3	0.18	0.04	0.17
(2,1096)	1:A:794:LEU:HD13	1:A:798:ILE:H	3	0.18	0.04	0.17
(1,32)	1:A:722:LEU:O	1:A:726:LEU:H	3	0.17	0.04	0.19
(1,83)	1:A:829:VAL:O	1:A:854:ALA:H	3	0.17	0.04	0.16
(1,139)	1:A:886:LEU:O	1:A:890:ILE:H	3	0.16	0.02	0.17
(2,1922)	1:A:903:THR:HB	1:A:906:ALA:HB1	3	0.15	0.01	0.16
(2,1922)	1:A:903:THR:HB	1:A:906:ALA:HB2	3	0.15	0.01	0.16
(2,1922)	1:A:903:THR:HB	1:A:906:ALA:HB3	3	0.15	0.01	0.16
(1,77)	1:A:828:LEU:H	1:A:871:ILE:O	3	0.15	0.05	0.12
(2,1005)	1:A:781:TRP:HE3	1:A:794:LEU:HB2	3	0.15	0.05	0.12
(1,114)	1:A:858:VAL:O	1:A:862:ASN:N	3	0.15	0.03	0.14
(1,190)	1:A:938:LEU:O	1:A:942:ARG:N	3	0.15	0.03	0.15

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)	Median (Å)
(1,38)	1:A:747:LEU:H	1:A:761:ALA:O	3	0.14	0.02	0.13
(3,356)	1:A:775:GLU:HG3	1:A:779:GLY:H	3	0.13	0.02	0.12
(1,12)	1:A:711:LEU:N	1:A:734:THR:O	3	0.11	0.0	0.11
(3,540)	1:A:831:ASP:HA	1:A:856:ASP:H	3	0.11	0.0	0.11
(2,1497)	1:A:845:GLY:HA3	1:A:848:GLY:H	2	0.74	0.09	0.74
(1,115)	1:A:859:ASP:O	1:A:863:VAL:H	2	0.22	0.02	0.22
(1,167)	1:A:913:ARG:O	1:A:917:SER:H	2	0.22	0.01	0.22
(1,165)	1:A:912:GLN:O	1:A:916:GLU:H	2	0.21	0.01	0.21
(1,137)	1:A:885:ARG:O	1:A:889:ARG:H	2	0.2	0.03	0.2
(1,179)	1:A:933:LYS:O	1:A:937:THR:H	2	0.2	0.0	0.2
(2,1193)	1:A:802:GLU:HA	1:A:803:MET:H	2	0.2	0.04	0.2
(1,87)	1:A:830:VAL:O	1:A:875:ASP:H	2	0.19	0.05	0.19
(1,93)	1:A:834:PRO:O	1:A:838:ARG:H	2	0.18	0.02	0.18
(1,116)	1:A:859:ASP:O	1:A:863:VAL:N	2	0.18	0.01	0.18
(1,123)	1:A:863:VAL:O	1:A:867:ASN:H	2	0.18	0.02	0.18
(1,169)	1:A:928:THR:O	1:A:932:ILE:H	2	0.18	0.03	0.18
(1,183)	1:A:935:THR:O	1:A:939:TYR:H	2	0.18	0.04	0.18
(1,166)	1:A:912:GLN:O	1:A:916:GLU:N	2	0.16	0.01	0.16
(2,1230)	1:A:824:ASP:H	1:A:825:MET:H	2	0.16	0.06	0.16
(1,34)	1:A:723:GLU:O	1:A:727:GLN:H	2	0.16	0.03	0.16
(1,97)	1:A:836:ASN:O	1:A:840:LEU:H	2	0.16	0.04	0.16
(1,67)	1:A:795:LEU:O	1:A:799:TYR:N	2	0.16	0.02	0.16
(2,134)	1:A:711:LEU:H	1:A:711:LEU:HG	2	0.15	0.03	0.15
(1,194)	1:A:940:ALA:O	1:A:944:ARG:N	2	0.15	0.03	0.15
(3,386)	1:A:787:ALA:H	1:A:791:LEU:H	2	0.15	0.02	0.15
(1,61)	1:A:792:PRO:O	1:A:796:ALA:N	2	0.14	0.01	0.14
(1,187)	1:A:937:THR:O	1:A:941:GLU:H	2	0.14	0.01	0.14
(2,708)	1:A:751:GLU:HG3	1:A:752:VAL:HG21	2	0.14	0.03	0.14
(2,708)	1:A:751:GLU:HG3	1:A:752:VAL:HG22	2	0.14	0.03	0.14
(2,708)	1:A:751:GLU:HG3	1:A:752:VAL:HG23	2	0.14	0.03	0.14
(2,1176)	1:A:801:ILE:H	1:A:803:MET:H	2	0.14	0.01	0.14
(1,110)	1:A:842:ASP:O	1:A:846:SER:N	2	0.14	0.01	0.14
(2,686)	1:A:749:THR:HB	1:A:753:VAL:HB	2	0.14	0.02	0.14
(2,692)	1:A:749:THR:HG21	1:A:764:THR:HB	2	0.14	0.01	0.14
(2,692)	1:A:749:THR:HG22	1:A:764:THR:HB	2	0.14	0.01	0.14
(2,692)	1:A:749:THR:HG23	1:A:764:THR:HB	2	0.14	0.01	0.14
(2,1239)	1:A:825:MET:H	1:A:849:TYR:HA	2	0.12	0.02	0.12
(1,55)	1:A:766:CYS:N	1:A:783:HIS:O	2	0.12	0.01	0.12
(1,135)	1:A:884:TYR:O	1:A:888:GLN:H	2	0.12	0.01	0.12
(3,269)	1:A:752:VAL:HB	1:A:770:ILE:HA	2	0.12	0.01	0.12
(3,264)	1:A:750:ASP:HB3	1:A:765:PHE:H	2	0.12	0.0	0.12
(1,180)	1:A:933:LYS:O	1:A:937:THR:N	2	0.11	0.0	0.11

Continued on next page...

Continued from previous page...

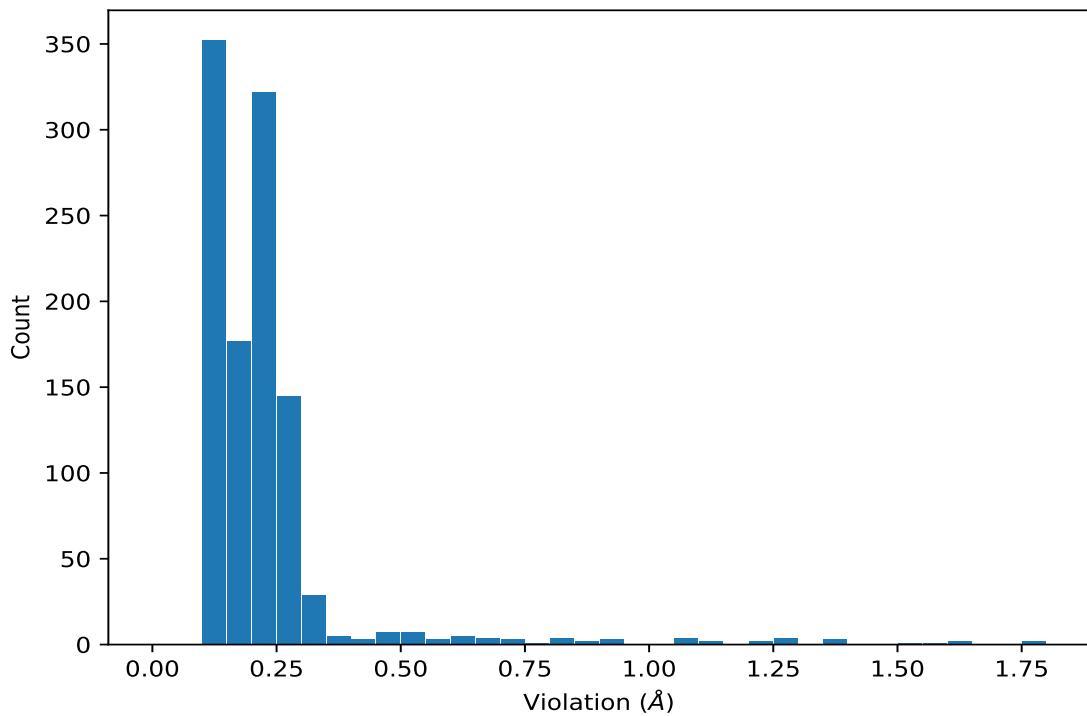
Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)	Median (Å)
(3,197)	1:A:742:THR:HA	1:A:760:ARG:H	2	0.11	0.0	0.11
(3,702)	1:A:864:LEU:HG	1:A:865:SER:HA	2	0.11	0.0	0.11

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)
(1,203)	1:A:831:ASP:OD1	1:A:925:LYS:HZ3	2	1.76
(1,204)	1:A:831:ASP:OD1	1:A:925:LYS:NZ	2	1.75

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,204)	1:A:831:ASP:OD1	1:A:925:LYS:NZ	19	1.6
(1,203)	1:A:831:ASP:OD1	1:A:925:LYS:HZ3	19	1.6
(1,204)	1:A:831:ASP:OD1	1:A:925:LYS:NZ	17	1.58
(1,203)	1:A:831:ASP:OD1	1:A:925:LYS:HZ3	17	1.54
(2,508)	1:A:736:TYR:HE1	1:A:738:GLY:HA3	9	1.4
(2,508)	1:A:736:TYR:HE2	1:A:738:GLY:HA3	9	1.4
(3,665)	1:A:857:GLY:HA2	1:A:886:LEU:H	7	1.35
(2,508)	1:A:736:TYR:HE1	1:A:738:GLY:HA3	6	1.27
(2,508)	1:A:736:TYR:HE2	1:A:738:GLY:HA3	6	1.27
(2,508)	1:A:736:TYR:HE1	1:A:738:GLY:HA3	7	1.26
(2,508)	1:A:736:TYR:HE2	1:A:738:GLY:HA3	7	1.26
(3,665)	1:A:857:GLY:HA2	1:A:886:LEU:H	18	1.24
(2,1771)	1:A:883:GLY:HA3	1:A:886:LEU:H	9	1.24
(3,665)	1:A:857:GLY:HA2	1:A:886:LEU:H	12	1.14
(3,665)	1:A:857:GLY:HA2	1:A:886:LEU:H	15	1.11
(2,1771)	1:A:883:GLY:HA3	1:A:886:LEU:H	3	1.09
(3,665)	1:A:857:GLY:HA2	1:A:886:LEU:H	8	1.07
(2,16)	1:A:705:SER:HB2	1:A:730:GLY:HA2	6	1.05
(2,16)	1:A:705:SER:HB3	1:A:730:GLY:HA2	6	1.05
(3,4)	1:A:704:LEU:HD21	1:A:730:GLY:HA2	2	0.94
(3,4)	1:A:704:LEU:HD22	1:A:730:GLY:HA2	2	0.94
(3,4)	1:A:704:LEU:HD23	1:A:730:GLY:HA2	2	0.94
(3,665)	1:A:857:GLY:HA2	1:A:886:LEU:H	10	0.89
(2,18)	1:A:706:GLY:H	1:A:730:GLY:HA2	7	0.88
(2,1497)	1:A:845:GLY:HA3	1:A:848:GLY:H	3	0.84
(2,1771)	1:A:883:GLY:HA3	1:A:886:LEU:H	17	0.81
(2,16)	1:A:705:SER:HB2	1:A:730:GLY:HA2	17	0.8
(2,16)	1:A:705:SER:HB3	1:A:730:GLY:HA2	17	0.8
(2,18)	1:A:706:GLY:H	1:A:730:GLY:HA2	15	0.78
(2,508)	1:A:736:TYR:HE1	1:A:738:GLY:HA3	4	0.72
(2,508)	1:A:736:TYR:HE2	1:A:738:GLY:HA3	4	0.72
(2,18)	1:A:706:GLY:H	1:A:730:GLY:HA2	20	0.71
(2,508)	1:A:736:TYR:HE1	1:A:738:GLY:HA3	1	0.69
(2,508)	1:A:736:TYR:HE2	1:A:738:GLY:HA3	1	0.69
(3,665)	1:A:857:GLY:HA2	1:A:886:LEU:H	13	0.67
(2,1497)	1:A:845:GLY:HA3	1:A:848:GLY:H	12	0.65
(2,759)	1:A:757:TRP:HD1	1:A:759:GLY:HA2	8	0.64
(3,4)	1:A:704:LEU:HD21	1:A:730:GLY:HA2	9	0.63
(3,4)	1:A:704:LEU:HD22	1:A:730:GLY:HA2	9	0.63
(3,4)	1:A:704:LEU:HD23	1:A:730:GLY:HA2	9	0.63
(2,759)	1:A:757:TRP:HD1	1:A:759:GLY:HA2	15	0.63
(2,508)	1:A:736:TYR:HE1	1:A:738:GLY:HA3	18	0.6

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,508)	1:A:736:TYR:HE2	1:A:738:GLY:HA3	18	0.6
(2,1771)	1:A:883:GLY:HA3	1:A:886:LEU:H	12	0.6
(2,508)	1:A:736:TYR:HE1	1:A:738:GLY:HA3	14	0.52
(2,508)	1:A:736:TYR:HE2	1:A:738:GLY:HA3	14	0.52
(3,665)	1:A:857:GLY:HA2	1:A:886:LEU:H	2	0.51
(3,665)	1:A:857:GLY:HA2	1:A:886:LEU:H	11	0.51
(3,665)	1:A:857:GLY:HA2	1:A:886:LEU:H	16	0.51
(2,508)	1:A:736:TYR:HE1	1:A:738:GLY:HA3	11	0.5
(2,508)	1:A:736:TYR:HE2	1:A:738:GLY:HA3	11	0.5
(3,665)	1:A:857:GLY:HA2	1:A:886:LEU:H	1	0.48
(3,4)	1:A:704:LEU:HD21	1:A:730:GLY:HA2	19	0.47
(3,4)	1:A:704:LEU:HD22	1:A:730:GLY:HA2	19	0.47
(3,4)	1:A:704:LEU:HD23	1:A:730:GLY:HA2	19	0.47
(3,4)	1:A:704:LEU:HD21	1:A:730:GLY:HA2	11	0.46
(3,4)	1:A:704:LEU:HD22	1:A:730:GLY:HA2	11	0.46
(3,4)	1:A:704:LEU:HD23	1:A:730:GLY:HA2	11	0.46
(2,508)	1:A:736:TYR:HE1	1:A:738:GLY:HA3	2	0.44
(2,508)	1:A:736:TYR:HE2	1:A:738:GLY:HA3	2	0.44
(2,1771)	1:A:883:GLY:HA3	1:A:886:LEU:H	14	0.42
(3,665)	1:A:857:GLY:HA2	1:A:886:LEU:H	6	0.38
(2,1771)	1:A:883:GLY:HA3	1:A:886:LEU:H	2	0.38
(2,1771)	1:A:883:GLY:HA3	1:A:886:LEU:H	4	0.36
(2,1771)	1:A:883:GLY:HA3	1:A:886:LEU:H	10	0.36
(1,95)	1:A:835:ILE:O	1:A:839:LEU:H	12	0.36
(3,665)	1:A:857:GLY:HA2	1:A:886:LEU:H	5	0.35
(2,776)	1:A:759:GLY:HA2	1:A:761:ALA:H	3	0.35
(1,91)	1:A:832:ASP:H	1:A:875:ASP:O	14	0.35
(1,89)	1:A:831:ASP:H	1:A:854:ALA:O	17	0.35
(1,71)	1:A:826:MET:O	1:A:870:ASP:H	8	0.35
(1,117)	1:A:860:ALA:O	1:A:864:LEU:H	1	0.35
(2,18)	1:A:706:GLY:H	1:A:730:GLY:HA2	10	0.34
(2,1572)	1:A:857:GLY:HA2	1:A:886:LEU:HG	7	0.34
(2,1399)	1:A:837:ARG:HA	1:A:837:ARG:HG3	13	0.34
(1,95)	1:A:835:ILE:O	1:A:839:LEU:H	19	0.34
(1,91)	1:A:832:ASP:H	1:A:875:ASP:O	17	0.34
(1,147)	1:A:899:VAL:H	1:A:919:MET:O	10	0.34
(1,89)	1:A:831:ASP:H	1:A:854:ALA:O	14	0.33
(2,776)	1:A:759:GLY:HA2	1:A:761:ALA:H	9	0.32
(1,95)	1:A:835:ILE:O	1:A:839:LEU:H	11	0.32
(1,89)	1:A:831:ASP:H	1:A:854:ALA:O	4	0.32
(1,69)	1:A:825:MET:O	1:A:850:GLN:H	2	0.32
(1,203)	1:A:831:ASP:OD1	1:A:925:LYS:HZ3	8	0.32

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,197)	1:A:942:ARG:O	1:A:946:SER:H	6	0.32
(1,147)	1:A:899:VAL:H	1:A:919:MET:O	14	0.32
(2,1771)	1:A:883:GLY:HA3	1:A:886:LEU:H	5	0.31
(1,95)	1:A:835:ILE:O	1:A:839:LEU:H	16	0.31
(1,89)	1:A:831:ASP:H	1:A:854:ALA:O	11	0.31
(1,69)	1:A:825:MET:O	1:A:850:GLN:H	7	0.31
(1,56)	1:A:766:CYS:H	1:A:783:HIS:O	2	0.31
(1,56)	1:A:766:CYS:H	1:A:783:HIS:O	13	0.31
(1,197)	1:A:942:ARG:O	1:A:946:SER:H	1	0.31
(1,147)	1:A:899:VAL:H	1:A:919:MET:O	3	0.31
(1,147)	1:A:899:VAL:H	1:A:919:MET:O	12	0.31
(2,776)	1:A:759:GLY:HA2	1:A:761:ALA:H	5	0.3
(2,776)	1:A:759:GLY:HA2	1:A:761:ALA:H	7	0.3
(2,776)	1:A:759:GLY:HA2	1:A:761:ALA:H	12	0.3
(1,56)	1:A:766:CYS:H	1:A:783:HIS:O	3	0.3
(1,147)	1:A:899:VAL:H	1:A:919:MET:O	16	0.3
(1,147)	1:A:899:VAL:H	1:A:919:MET:O	17	0.3
(1,103)	1:A:839:LEU:O	1:A:843:GLN:H	10	0.3
(1,91)	1:A:832:ASP:H	1:A:875:ASP:O	5	0.29
(1,89)	1:A:831:ASP:H	1:A:854:ALA:O	1	0.29
(1,68)	1:A:795:LEU:O	1:A:799:TYR:H	7	0.29
(1,68)	1:A:795:LEU:O	1:A:799:TYR:H	9	0.29
(1,2)	1:A:707:LYS:O	1:A:732:VAL:H	7	0.29
(1,193)	1:A:940:ALA:O	1:A:944:ARG:H	17	0.29
(1,189)	1:A:938:LEU:O	1:A:942:ARG:H	6	0.29
(1,189)	1:A:938:LEU:O	1:A:942:ARG:H	8	0.29
(1,18)	1:A:712:ALA:O	1:A:750:ASP:H	17	0.29
(1,149)	1:A:899:VAL:O	1:A:921:SER:H	20	0.29
(1,147)	1:A:899:VAL:H	1:A:919:MET:O	6	0.29
(1,125)	1:A:872:VAL:H	1:A:898:PRO:O	8	0.29
(2,508)	1:A:736:TYR:HE1	1:A:738:GLY:HA3	8	0.28
(2,508)	1:A:736:TYR:HE2	1:A:738:GLY:HA3	8	0.28
(1,95)	1:A:835:ILE:O	1:A:839:LEU:H	3	0.28
(1,91)	1:A:832:ASP:H	1:A:875:ASP:O	10	0.28
(1,89)	1:A:831:ASP:H	1:A:854:ALA:O	7	0.28
(1,69)	1:A:825:MET:O	1:A:850:GLN:H	1	0.28
(1,56)	1:A:766:CYS:H	1:A:783:HIS:O	11	0.28
(1,203)	1:A:831:ASP:OD1	1:A:925:LYS:HZ3	13	0.28
(1,18)	1:A:712:ALA:O	1:A:750:ASP:H	1	0.28
(1,18)	1:A:712:ALA:O	1:A:750:ASP:H	3	0.28
(1,163)	1:A:911:LYS:O	1:A:915:LEU:H	12	0.28
(1,161)	1:A:910:GLU:O	1:A:914:CYS:H	7	0.28

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,161)	1:A:910:GLU:O	1:A:914:CYS:H	8	0.28
(1,157)	1:A:908:ALA:O	1:A:912:GLN:H	14	0.28
(1,149)	1:A:899:VAL:O	1:A:921:SER:H	9	0.28
(1,147)	1:A:899:VAL:H	1:A:919:MET:O	1	0.28
(1,147)	1:A:899:VAL:H	1:A:919:MET:O	8	0.28
(1,147)	1:A:899:VAL:H	1:A:919:MET:O	19	0.28
(2,508)	1:A:736:TYR:HE1	1:A:738:GLY:HA3	10	0.27
(2,508)	1:A:736:TYR:HE2	1:A:738:GLY:HA3	10	0.27
(2,1771)	1:A:883:GLY:HA3	1:A:886:LEU:H	20	0.27
(1,95)	1:A:835:ILE:O	1:A:839:LEU:H	7	0.27
(1,89)	1:A:831:ASP:H	1:A:854:ALA:O	5	0.27
(1,89)	1:A:831:ASP:H	1:A:854:ALA:O	20	0.27
(1,71)	1:A:826:MET:O	1:A:870:ASP:H	9	0.27
(1,24)	1:A:718:LEU:O	1:A:722:LEU:H	3	0.27
(1,22)	1:A:717:SER:O	1:A:721:PHE:H	5	0.27
(1,199)	1:A:943:VAL:O	1:A:947:ARG:H	11	0.27
(1,197)	1:A:942:ARG:O	1:A:946:SER:H	3	0.27
(1,197)	1:A:942:ARG:O	1:A:946:SER:H	7	0.27
(1,197)	1:A:942:ARG:O	1:A:946:SER:H	19	0.27
(1,18)	1:A:712:ALA:O	1:A:750:ASP:H	11	0.27
(1,18)	1:A:712:ALA:O	1:A:750:ASP:H	12	0.27
(1,147)	1:A:899:VAL:H	1:A:919:MET:O	5	0.27
(1,147)	1:A:899:VAL:H	1:A:919:MET:O	7	0.27
(1,147)	1:A:899:VAL:H	1:A:919:MET:O	9	0.27
(1,147)	1:A:899:VAL:H	1:A:919:MET:O	11	0.27
(1,147)	1:A:899:VAL:H	1:A:919:MET:O	13	0.27
(1,147)	1:A:899:VAL:H	1:A:919:MET:O	15	0.27
(1,143)	1:A:888:GLN:O	1:A:892:GLN:H	3	0.27
(1,125)	1:A:872:VAL:H	1:A:898:PRO:O	1	0.27
(1,125)	1:A:872:VAL:H	1:A:898:PRO:O	7	0.27
(1,121)	1:A:862:ASN:O	1:A:866:LYS:H	8	0.27
(1,121)	1:A:862:ASN:O	1:A:866:LYS:H	12	0.27
(1,113)	1:A:858:VAL:O	1:A:862:ASN:H	4	0.27
(1,111)	1:A:843:GLN:O	1:A:847:LEU:H	13	0.27
(2,575)	1:A:744:GLU:HG3	1:A:745:ASP:H	19	0.26
(2,508)	1:A:736:TYR:HE1	1:A:738:GLY:HA3	16	0.26
(2,508)	1:A:736:TYR:HE2	1:A:738:GLY:HA3	16	0.26
(2,18)	1:A:706:GLY:H	1:A:730:GLY:HA2	19	0.26
(1,95)	1:A:835:ILE:O	1:A:839:LEU:H	1	0.26
(1,95)	1:A:835:ILE:O	1:A:839:LEU:H	15	0.26
(1,89)	1:A:831:ASP:H	1:A:854:ALA:O	3	0.26
(1,89)	1:A:831:ASP:H	1:A:854:ALA:O	8	0.26

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,89)	1:A:831:ASP:H	1:A:854:ALA:O	10	0.26
(1,89)	1:A:831:ASP:H	1:A:854:ALA:O	15	0.26
(1,89)	1:A:831:ASP:H	1:A:854:ALA:O	16	0.26
(1,69)	1:A:825:MET:O	1:A:850:GLN:H	17	0.26
(1,68)	1:A:795:LEU:O	1:A:799:TYR:H	5	0.26
(1,64)	1:A:793:ALA:O	1:A:797:ARG:H	2	0.26
(1,30)	1:A:721:PHE:O	1:A:725:SER:H	9	0.26
(1,30)	1:A:721:PHE:O	1:A:725:SER:H	11	0.26
(1,30)	1:A:721:PHE:O	1:A:725:SER:H	18	0.26
(1,24)	1:A:718:LEU:O	1:A:722:LEU:H	9	0.26
(1,22)	1:A:717:SER:O	1:A:721:PHE:H	13	0.26
(1,197)	1:A:942:ARG:O	1:A:946:SER:H	14	0.26
(1,18)	1:A:712:ALA:O	1:A:750:ASP:H	5	0.26
(1,18)	1:A:712:ALA:O	1:A:750:ASP:H	15	0.26
(1,149)	1:A:899:VAL:O	1:A:921:SER:H	4	0.26
(1,149)	1:A:899:VAL:O	1:A:921:SER:H	11	0.26
(1,149)	1:A:899:VAL:O	1:A:921:SER:H	14	0.26
(1,147)	1:A:899:VAL:H	1:A:919:MET:O	2	0.26
(1,147)	1:A:899:VAL:H	1:A:919:MET:O	4	0.26
(1,147)	1:A:899:VAL:H	1:A:919:MET:O	18	0.26
(1,126)	1:A:872:VAL:N	1:A:898:PRO:O	8	0.26
(1,125)	1:A:872:VAL:H	1:A:898:PRO:O	4	0.26
(1,125)	1:A:872:VAL:H	1:A:898:PRO:O	16	0.26
(1,125)	1:A:872:VAL:H	1:A:898:PRO:O	19	0.26
(1,121)	1:A:862:ASN:O	1:A:866:LYS:H	7	0.26
(1,119)	1:A:861:LEU:O	1:A:865:SER:H	1	0.26
(1,111)	1:A:843:GLN:O	1:A:847:LEU:H	9	0.26
(1,109)	1:A:842:ASP:O	1:A:846:SER:H	12	0.26
(1,103)	1:A:839:LEU:O	1:A:843:GLN:H	13	0.26
(2,776)	1:A:759:GLY:HA2	1:A:761:ALA:H	2	0.25
(2,16)	1:A:705:SER:HB2	1:A:730:GLY:HA2	16	0.25
(2,16)	1:A:705:SER:HB3	1:A:730:GLY:HA2	16	0.25
(2,1368)	1:A:832:ASP:HA	1:A:876:VAL:HA	16	0.25
(1,95)	1:A:835:ILE:O	1:A:839:LEU:H	9	0.25
(1,95)	1:A:835:ILE:O	1:A:839:LEU:H	18	0.25
(1,91)	1:A:832:ASP:H	1:A:875:ASP:O	4	0.25
(1,91)	1:A:832:ASP:H	1:A:875:ASP:O	18	0.25
(1,89)	1:A:831:ASP:H	1:A:854:ALA:O	2	0.25
(1,89)	1:A:831:ASP:H	1:A:854:ALA:O	9	0.25
(1,89)	1:A:831:ASP:H	1:A:854:ALA:O	12	0.25
(1,8)	1:A:710:TRP:H	1:A:746:VAL:O	17	0.25
(1,69)	1:A:825:MET:O	1:A:850:GLN:H	13	0.25

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,69)	1:A:825:MET:O	1:A:850:GLN:H	18	0.25
(1,62)	1:A:792:PRO:O	1:A:796:ALA:H	6	0.25
(1,56)	1:A:766:CYS:H	1:A:783:HIS:O	12	0.25
(1,30)	1:A:721:PHE:O	1:A:725:SER:H	5	0.25
(1,22)	1:A:717:SER:O	1:A:721:PHE:H	3	0.25
(1,199)	1:A:943:VAL:O	1:A:947:ARG:H	16	0.25
(1,197)	1:A:942:ARG:O	1:A:946:SER:H	9	0.25
(1,189)	1:A:938:LEU:O	1:A:942:ARG:H	14	0.25
(1,159)	1:A:909:GLU:O	1:A:913:ARG:H	9	0.25
(1,149)	1:A:899:VAL:O	1:A:921:SER:H	5	0.25
(1,149)	1:A:899:VAL:O	1:A:921:SER:H	6	0.25
(1,149)	1:A:899:VAL:O	1:A:921:SER:H	8	0.25
(1,148)	1:A:899:VAL:N	1:A:919:MET:O	11	0.25
(1,141)	1:A:887:THR:O	1:A:891:ARG:H	17	0.25
(1,133)	1:A:876:VAL:H	1:A:902:VAL:O	5	0.25
(1,131)	1:A:874:SER:O	1:A:902:VAL:H	16	0.25
(1,126)	1:A:872:VAL:N	1:A:898:PRO:O	1	0.25
(1,126)	1:A:872:VAL:N	1:A:898:PRO:O	4	0.25
(1,126)	1:A:872:VAL:N	1:A:898:PRO:O	7	0.25
(1,125)	1:A:872:VAL:H	1:A:898:PRO:O	11	0.25
(1,125)	1:A:872:VAL:H	1:A:898:PRO:O	14	0.25
(1,125)	1:A:872:VAL:H	1:A:898:PRO:O	17	0.25
(1,125)	1:A:872:VAL:H	1:A:898:PRO:O	18	0.25
(1,121)	1:A:862:ASN:O	1:A:866:LYS:H	2	0.25
(1,121)	1:A:862:ASN:O	1:A:866:LYS:H	4	0.25
(1,121)	1:A:862:ASN:O	1:A:866:LYS:H	19	0.25
(1,111)	1:A:843:GLN:O	1:A:847:LEU:H	18	0.25
(1,103)	1:A:839:LEU:O	1:A:843:GLN:H	5	0.25
(1,103)	1:A:839:LEU:O	1:A:843:GLN:H	12	0.25
(1,103)	1:A:839:LEU:O	1:A:843:GLN:H	16	0.25
(2,1193)	1:A:802:GLU:HA	1:A:803:MET:H	5	0.24
(1,99)	1:A:837:ARG:O	1:A:841:ALA:H	15	0.24
(1,95)	1:A:835:ILE:O	1:A:839:LEU:H	2	0.24
(1,95)	1:A:835:ILE:O	1:A:839:LEU:H	4	0.24
(1,95)	1:A:835:ILE:O	1:A:839:LEU:H	10	0.24
(1,95)	1:A:835:ILE:O	1:A:839:LEU:H	17	0.24
(1,95)	1:A:835:ILE:O	1:A:839:LEU:H	20	0.24
(1,91)	1:A:832:ASP:H	1:A:875:ASP:O	16	0.24
(1,89)	1:A:831:ASP:H	1:A:854:ALA:O	18	0.24
(1,87)	1:A:830:VAL:O	1:A:875:ASP:H	5	0.24
(1,69)	1:A:825:MET:O	1:A:850:GLN:H	16	0.24
(1,68)	1:A:795:LEU:O	1:A:799:TYR:H	16	0.24

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,68)	1:A:795:LEU:O	1:A:799:TYR:H	17	0.24
(1,64)	1:A:793:ALA:O	1:A:797:ARG:H	17	0.24
(1,62)	1:A:792:PRO:O	1:A:796:ALA:H	17	0.24
(1,56)	1:A:766:CYS:H	1:A:783:HIS:O	10	0.24
(1,30)	1:A:721:PHE:O	1:A:725:SER:H	13	0.24
(1,24)	1:A:718:LEU:O	1:A:722:LEU:H	8	0.24
(1,24)	1:A:718:LEU:O	1:A:722:LEU:H	17	0.24
(1,23)	1:A:718:LEU:O	1:A:722:LEU:N	3	0.24
(1,22)	1:A:717:SER:O	1:A:721:PHE:H	15	0.24
(1,22)	1:A:717:SER:O	1:A:721:PHE:H	20	0.24
(1,189)	1:A:938:LEU:O	1:A:942:ARG:H	2	0.24
(1,18)	1:A:712:ALA:O	1:A:750:ASP:H	7	0.24
(1,18)	1:A:712:ALA:O	1:A:750:ASP:H	18	0.24
(1,18)	1:A:712:ALA:O	1:A:750:ASP:H	20	0.24
(1,163)	1:A:911:LYS:O	1:A:915:LEU:H	20	0.24
(1,161)	1:A:910:GLU:O	1:A:914:CYS:H	14	0.24
(1,161)	1:A:910:GLU:O	1:A:914:CYS:H	17	0.24
(1,149)	1:A:899:VAL:O	1:A:921:SER:H	16	0.24
(1,148)	1:A:899:VAL:N	1:A:919:MET:O	4	0.24
(1,148)	1:A:899:VAL:N	1:A:919:MET:O	9	0.24
(1,148)	1:A:899:VAL:N	1:A:919:MET:O	14	0.24
(1,141)	1:A:887:THR:O	1:A:891:ARG:H	6	0.24
(1,137)	1:A:885:ARG:O	1:A:889:ARG:H	3	0.24
(1,125)	1:A:872:VAL:H	1:A:898:PRO:O	3	0.24
(1,125)	1:A:872:VAL:H	1:A:898:PRO:O	10	0.24
(1,121)	1:A:862:ASN:O	1:A:866:LYS:H	6	0.24
(1,115)	1:A:859:ASP:O	1:A:863:VAL:H	11	0.24
(1,111)	1:A:843:GLN:O	1:A:847:LEU:H	7	0.24
(1,109)	1:A:842:ASP:O	1:A:846:SER:H	10	0.24
(1,103)	1:A:839:LEU:O	1:A:843:GLN:H	6	0.24
(2,956)	1:A:775:GLU:HG2	1:A:776:LYS:H	8	0.23
(2,482)	1:A:734:THR:HA	1:A:735:THR:HB	16	0.23
(2,254)	1:A:716:ALA:H	1:A:720:GLN:H	17	0.23
(2,1569)	1:A:856:ASP:H	1:A:856:ASP:HB2	16	0.23
(2,1141)	1:A:798:ILE:H	1:A:798:ILE:HG12	18	0.23
(2,1141)	1:A:798:ILE:H	1:A:798:ILE:HG12	20	0.23
(2,1096)	1:A:794:LEU:HD11	1:A:798:ILE:H	17	0.23
(2,1096)	1:A:794:LEU:HD12	1:A:798:ILE:H	17	0.23
(2,1096)	1:A:794:LEU:HD13	1:A:798:ILE:H	17	0.23
(1,96)	1:A:835:ILE:O	1:A:839:LEU:N	19	0.23
(1,92)	1:A:832:ASP:N	1:A:875:ASP:O	14	0.23
(1,91)	1:A:832:ASP:H	1:A:875:ASP:O	3	0.23

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,91)	1:A:832:ASP:H	1:A:875:ASP:O	13	0.23
(1,91)	1:A:832:ASP:H	1:A:875:ASP:O	19	0.23
(1,89)	1:A:831:ASP:H	1:A:854:ALA:O	6	0.23
(1,83)	1:A:829:VAL:O	1:A:854:ALA:H	11	0.23
(1,71)	1:A:826:MET:O	1:A:870:ASP:H	6	0.23
(1,71)	1:A:826:MET:O	1:A:870:ASP:H	19	0.23
(1,69)	1:A:825:MET:O	1:A:850:GLN:H	15	0.23
(1,68)	1:A:795:LEU:O	1:A:799:TYR:H	19	0.23
(1,64)	1:A:793:ALA:O	1:A:797:ARG:H	20	0.23
(1,56)	1:A:766:CYS:H	1:A:783:HIS:O	9	0.23
(1,54)	1:A:764:THR:O	1:A:783:HIS:H	4	0.23
(1,30)	1:A:721:PHE:O	1:A:725:SER:H	10	0.23
(1,24)	1:A:718:LEU:O	1:A:722:LEU:H	6	0.23
(1,24)	1:A:718:LEU:O	1:A:722:LEU:H	11	0.23
(1,24)	1:A:718:LEU:O	1:A:722:LEU:H	12	0.23
(1,24)	1:A:718:LEU:O	1:A:722:LEU:H	13	0.23
(1,23)	1:A:718:LEU:O	1:A:722:LEU:N	9	0.23
(1,22)	1:A:717:SER:O	1:A:721:PHE:H	4	0.23
(1,198)	1:A:942:ARG:O	1:A:946:SER:N	1	0.23
(1,198)	1:A:942:ARG:O	1:A:946:SER:N	6	0.23
(1,197)	1:A:942:ARG:O	1:A:946:SER:H	12	0.23
(1,197)	1:A:942:ARG:O	1:A:946:SER:H	18	0.23
(1,195)	1:A:941:GLU:O	1:A:945:LYS:H	1	0.23
(1,195)	1:A:941:GLU:O	1:A:945:LYS:H	8	0.23
(1,189)	1:A:938:LEU:O	1:A:942:ARG:H	15	0.23
(1,161)	1:A:910:GLU:O	1:A:914:CYS:H	2	0.23
(1,161)	1:A:910:GLU:O	1:A:914:CYS:H	12	0.23
(1,157)	1:A:908:ALA:O	1:A:912:GLN:H	6	0.23
(1,150)	1:A:899:VAL:O	1:A:921:SER:N	4	0.23
(1,149)	1:A:899:VAL:O	1:A:921:SER:H	19	0.23
(1,148)	1:A:899:VAL:N	1:A:919:MET:O	1	0.23
(1,148)	1:A:899:VAL:N	1:A:919:MET:O	12	0.23
(1,141)	1:A:887:THR:O	1:A:891:ARG:H	5	0.23
(1,131)	1:A:874:SER:O	1:A:902:VAL:H	3	0.23
(1,126)	1:A:872:VAL:N	1:A:898:PRO:O	3	0.23
(1,126)	1:A:872:VAL:N	1:A:898:PRO:O	19	0.23
(1,125)	1:A:872:VAL:H	1:A:898:PRO:O	9	0.23
(1,125)	1:A:872:VAL:H	1:A:898:PRO:O	15	0.23
(1,119)	1:A:861:LEU:O	1:A:865:SER:H	5	0.23
(1,111)	1:A:843:GLN:O	1:A:847:LEU:H	1	0.23
(1,111)	1:A:843:GLN:O	1:A:847:LEU:H	6	0.23
(1,111)	1:A:843:GLN:O	1:A:847:LEU:H	10	0.23

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,109)	1:A:842:ASP:O	1:A:846:SER:H	3	0.23
(1,103)	1:A:839:LEU:O	1:A:843:GLN:H	9	0.23
(1,103)	1:A:839:LEU:O	1:A:843:GLN:H	14	0.23
(1,101)	1:A:838:ARG:O	1:A:842:ASP:H	6	0.23
(1,101)	1:A:838:ARG:O	1:A:842:ASP:H	13	0.23
(2,254)	1:A:716:ALA:H	1:A:720:GLN:H	11	0.22
(2,1465)	1:A:842:ASP:HA	1:A:845:GLY:HA2	12	0.22
(2,1230)	1:A:824:ASP:H	1:A:825:MET:H	4	0.22
(2,1005)	1:A:781:TRP:HE3	1:A:794:LEU:HB2	9	0.22
(1,99)	1:A:837:ARG:O	1:A:841:ALA:H	1	0.22
(1,99)	1:A:837:ARG:O	1:A:841:ALA:H	2	0.22
(1,99)	1:A:837:ARG:O	1:A:841:ALA:H	7	0.22
(1,96)	1:A:835:ILE:O	1:A:839:LEU:N	11	0.22
(1,96)	1:A:835:ILE:O	1:A:839:LEU:N	12	0.22
(1,95)	1:A:835:ILE:O	1:A:839:LEU:H	6	0.22
(1,95)	1:A:835:ILE:O	1:A:839:LEU:H	8	0.22
(1,95)	1:A:835:ILE:O	1:A:839:LEU:H	13	0.22
(1,95)	1:A:835:ILE:O	1:A:839:LEU:H	14	0.22
(1,91)	1:A:832:ASP:H	1:A:875:ASP:O	7	0.22
(1,89)	1:A:831:ASP:H	1:A:854:ALA:O	19	0.22
(1,85)	1:A:830:VAL:H	1:A:873:LEU:O	16	0.22
(1,77)	1:A:828:LEU:H	1:A:871:ILE:O	12	0.22
(1,72)	1:A:826:MET:O	1:A:870:ASP:N	9	0.22
(1,68)	1:A:795:LEU:O	1:A:799:TYR:H	13	0.22
(1,68)	1:A:795:LEU:O	1:A:799:TYR:H	18	0.22
(1,68)	1:A:795:LEU:O	1:A:799:TYR:H	20	0.22
(1,64)	1:A:793:ALA:O	1:A:797:ARG:H	11	0.22
(1,63)	1:A:793:ALA:O	1:A:797:ARG:N	2	0.22
(1,62)	1:A:792:PRO:O	1:A:796:ALA:H	11	0.22
(1,30)	1:A:721:PHE:O	1:A:725:SER:H	3	0.22
(1,30)	1:A:721:PHE:O	1:A:725:SER:H	16	0.22
(1,24)	1:A:718:LEU:O	1:A:722:LEU:H	7	0.22
(1,24)	1:A:718:LEU:O	1:A:722:LEU:H	10	0.22
(1,22)	1:A:717:SER:O	1:A:721:PHE:H	1	0.22
(1,22)	1:A:717:SER:O	1:A:721:PHE:H	2	0.22
(1,22)	1:A:717:SER:O	1:A:721:PHE:H	6	0.22
(1,22)	1:A:717:SER:O	1:A:721:PHE:H	7	0.22
(1,22)	1:A:717:SER:O	1:A:721:PHE:H	8	0.22
(1,22)	1:A:717:SER:O	1:A:721:PHE:H	16	0.22
(1,22)	1:A:717:SER:O	1:A:721:PHE:H	17	0.22
(1,22)	1:A:717:SER:O	1:A:721:PHE:H	19	0.22
(1,203)	1:A:831:ASP:OD1	1:A:925:LYS:HZ3	14	0.22

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,201)	1:A:944:ARG:O	1:A:948:ASP:H	13	0.22
(1,201)	1:A:944:ARG:O	1:A:948:ASP:H	18	0.22
(1,2)	1:A:707:LYS:O	1:A:732:VAL:H	10	0.22
(1,198)	1:A:942:ARG:O	1:A:946:SER:N	19	0.22
(1,197)	1:A:942:ARG:O	1:A:946:SER:H	2	0.22
(1,197)	1:A:942:ARG:O	1:A:946:SER:H	17	0.22
(1,195)	1:A:941:GLU:O	1:A:945:LYS:H	16	0.22
(1,193)	1:A:940:ALA:O	1:A:944:ARG:H	1	0.22
(1,183)	1:A:935:THR:O	1:A:939:TYR:H	4	0.22
(1,18)	1:A:712:ALA:O	1:A:750:ASP:H	4	0.22
(1,18)	1:A:712:ALA:O	1:A:750:ASP:H	9	0.22
(1,18)	1:A:712:ALA:O	1:A:750:ASP:H	10	0.22
(1,173)	1:A:930:ASP:O	1:A:934:GLN:H	10	0.22
(1,17)	1:A:712:ALA:O	1:A:750:ASP:N	20	0.22
(1,167)	1:A:913:ARG:O	1:A:917:SER:H	7	0.22
(1,165)	1:A:912:GLN:O	1:A:916:GLU:H	5	0.22
(1,161)	1:A:910:GLU:O	1:A:914:CYS:H	1	0.22
(1,161)	1:A:910:GLU:O	1:A:914:CYS:H	9	0.22
(1,157)	1:A:908:ALA:O	1:A:912:GLN:H	20	0.22
(1,153)	1:A:901:GLY:O	1:A:923:LEU:H	7	0.22
(1,150)	1:A:899:VAL:O	1:A:921:SER:N	14	0.22
(1,149)	1:A:899:VAL:O	1:A:921:SER:H	3	0.22
(1,149)	1:A:899:VAL:O	1:A:921:SER:H	10	0.22
(1,149)	1:A:899:VAL:O	1:A:921:SER:H	13	0.22
(1,148)	1:A:899:VAL:N	1:A:919:MET:O	3	0.22
(1,148)	1:A:899:VAL:N	1:A:919:MET:O	5	0.22
(1,148)	1:A:899:VAL:N	1:A:919:MET:O	6	0.22
(1,148)	1:A:899:VAL:N	1:A:919:MET:O	10	0.22
(1,143)	1:A:888:GLN:O	1:A:892:GLN:H	11	0.22
(1,141)	1:A:887:THR:O	1:A:891:ARG:H	8	0.22
(1,129)	1:A:874:SER:H	1:A:900:ILE:O	10	0.22
(1,129)	1:A:874:SER:H	1:A:900:ILE:O	14	0.22
(1,126)	1:A:872:VAL:N	1:A:898:PRO:O	14	0.22
(1,126)	1:A:872:VAL:N	1:A:898:PRO:O	16	0.22
(1,125)	1:A:872:VAL:H	1:A:898:PRO:O	13	0.22
(1,121)	1:A:862:ASN:O	1:A:866:LYS:H	13	0.22
(1,121)	1:A:862:ASN:O	1:A:866:LYS:H	16	0.22
(1,121)	1:A:862:ASN:O	1:A:866:LYS:H	18	0.22
(1,121)	1:A:862:ASN:O	1:A:866:LYS:H	20	0.22
(1,119)	1:A:861:LEU:O	1:A:865:SER:H	8	0.22
(1,118)	1:A:860:ALA:O	1:A:864:LEU:N	1	0.22
(1,113)	1:A:858:VAL:O	1:A:862:ASN:H	5	0.22

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,111)	1:A:843:GLN:O	1:A:847:LEU:H	2	0.22
(1,111)	1:A:843:GLN:O	1:A:847:LEU:H	4	0.22
(1,111)	1:A:843:GLN:O	1:A:847:LEU:H	5	0.22
(1,111)	1:A:843:GLN:O	1:A:847:LEU:H	20	0.22
(1,107)	1:A:841:ALA:O	1:A:845:GLY:H	4	0.22
(1,104)	1:A:839:LEU:O	1:A:843:GLN:N	10	0.22
(1,101)	1:A:838:ARG:O	1:A:842:ASP:H	3	0.22
(3,665)	1:A:857:GLY:HA2	1:A:886:LEU:H	20	0.21
(2,776)	1:A:759:GLY:HA2	1:A:761:ALA:H	19	0.21
(2,575)	1:A:744:GLU:HG3	1:A:745:ASP:H	13	0.21
(2,1141)	1:A:798:ILE:H	1:A:798:ILE:HG12	12	0.21
(1,99)	1:A:837:ARG:O	1:A:841:ALA:H	14	0.21
(1,95)	1:A:835:ILE:O	1:A:839:LEU:H	5	0.21
(1,91)	1:A:832:ASP:H	1:A:875:ASP:O	20	0.21
(1,8)	1:A:710:TRP:H	1:A:746:VAL:O	11	0.21
(1,69)	1:A:825:MET:O	1:A:850:GLN:H	4	0.21
(1,69)	1:A:825:MET:O	1:A:850:GLN:H	8	0.21
(1,68)	1:A:795:LEU:O	1:A:799:TYR:H	2	0.21
(1,68)	1:A:795:LEU:O	1:A:799:TYR:H	14	0.21
(1,56)	1:A:766:CYS:H	1:A:783:HIS:O	5	0.21
(1,56)	1:A:766:CYS:H	1:A:783:HIS:O	16	0.21
(1,50)	1:A:762:VAL:O	1:A:781:TRP:H	12	0.21
(1,32)	1:A:722:LEU:O	1:A:726:LEU:H	6	0.21
(1,30)	1:A:721:PHE:O	1:A:725:SER:H	1	0.21
(1,30)	1:A:721:PHE:O	1:A:725:SER:H	6	0.21
(1,30)	1:A:721:PHE:O	1:A:725:SER:H	7	0.21
(1,30)	1:A:721:PHE:O	1:A:725:SER:H	8	0.21
(1,30)	1:A:721:PHE:O	1:A:725:SER:H	15	0.21
(1,30)	1:A:721:PHE:O	1:A:725:SER:H	17	0.21
(1,23)	1:A:718:LEU:O	1:A:722:LEU:N	8	0.21
(1,23)	1:A:718:LEU:O	1:A:722:LEU:N	13	0.21
(1,23)	1:A:718:LEU:O	1:A:722:LEU:N	17	0.21
(1,22)	1:A:717:SER:O	1:A:721:PHE:H	11	0.21
(1,22)	1:A:717:SER:O	1:A:721:PHE:H	14	0.21
(1,22)	1:A:717:SER:O	1:A:721:PHE:H	18	0.21
(1,201)	1:A:944:ARG:O	1:A:948:ASP:H	7	0.21
(1,2)	1:A:707:LYS:O	1:A:732:VAL:H	20	0.21
(1,197)	1:A:942:ARG:O	1:A:946:SER:H	11	0.21
(1,197)	1:A:942:ARG:O	1:A:946:SER:H	16	0.21
(1,193)	1:A:940:ALA:O	1:A:944:ARG:H	7	0.21
(1,193)	1:A:940:ALA:O	1:A:944:ARG:H	13	0.21
(1,189)	1:A:938:LEU:O	1:A:942:ARG:H	4	0.21

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,18)	1:A:712:ALA:O	1:A:750:ASP:H	6	0.21
(1,179)	1:A:933:LYS:O	1:A:937:THR:H	5	0.21
(1,169)	1:A:928:THR:O	1:A:932:ILE:H	16	0.21
(1,167)	1:A:913:ARG:O	1:A:917:SER:H	16	0.21
(1,162)	1:A:910:GLU:O	1:A:914:CYS:N	8	0.21
(1,157)	1:A:908:ALA:O	1:A:912:GLN:H	4	0.21
(1,157)	1:A:908:ALA:O	1:A:912:GLN:H	19	0.21
(1,150)	1:A:899:VAL:O	1:A:921:SER:N	9	0.21
(1,150)	1:A:899:VAL:O	1:A:921:SER:N	11	0.21
(1,150)	1:A:899:VAL:O	1:A:921:SER:N	20	0.21
(1,149)	1:A:899:VAL:O	1:A:921:SER:H	17	0.21
(1,148)	1:A:899:VAL:N	1:A:919:MET:O	2	0.21
(1,148)	1:A:899:VAL:N	1:A:919:MET:O	13	0.21
(1,148)	1:A:899:VAL:N	1:A:919:MET:O	16	0.21
(1,148)	1:A:899:VAL:N	1:A:919:MET:O	17	0.21
(1,147)	1:A:899:VAL:H	1:A:919:MET:O	20	0.21
(1,141)	1:A:887:THR:O	1:A:891:ARG:H	2	0.21
(1,141)	1:A:887:THR:O	1:A:891:ARG:H	12	0.21
(1,141)	1:A:887:THR:O	1:A:891:ARG:H	18	0.21
(1,129)	1:A:874:SER:H	1:A:900:ILE:O	13	0.21
(1,126)	1:A:872:VAL:N	1:A:898:PRO:O	15	0.21
(1,126)	1:A:872:VAL:N	1:A:898:PRO:O	18	0.21
(1,125)	1:A:872:VAL:H	1:A:898:PRO:O	2	0.21
(1,125)	1:A:872:VAL:H	1:A:898:PRO:O	20	0.21
(1,119)	1:A:861:LEU:O	1:A:865:SER:H	2	0.21
(1,119)	1:A:861:LEU:O	1:A:865:SER:H	11	0.21
(1,119)	1:A:861:LEU:O	1:A:865:SER:H	12	0.21
(1,119)	1:A:861:LEU:O	1:A:865:SER:H	17	0.21
(1,117)	1:A:860:ALA:O	1:A:864:LEU:H	11	0.21
(1,115)	1:A:859:ASP:O	1:A:863:VAL:H	19	0.21
(1,113)	1:A:858:VAL:O	1:A:862:ASN:H	13	0.21
(1,113)	1:A:858:VAL:O	1:A:862:ASN:H	14	0.21
(1,111)	1:A:843:GLN:O	1:A:847:LEU:H	17	0.21
(1,11)	1:A:711:LEU:H	1:A:734:THR:O	5	0.21
(1,104)	1:A:839:LEU:O	1:A:843:GLN:N	12	0.21
(1,103)	1:A:839:LEU:O	1:A:843:GLN:H	7	0.21
(1,103)	1:A:839:LEU:O	1:A:843:GLN:H	11	0.21
(1,1)	1:A:707:LYS:O	1:A:732:VAL:N	7	0.21
(2,508)	1:A:736:TYR:HE1	1:A:738:GLY:HA3	3	0.2
(2,508)	1:A:736:TYR:HE2	1:A:738:GLY:HA3	3	0.2
(2,254)	1:A:716:ALA:H	1:A:720:GLN:H	12	0.2
(2,1141)	1:A:798:ILE:H	1:A:798:ILE:HG12	3	0.2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,97)	1:A:836:ASN:O	1:A:840:LEU:H	19	0.2
(1,93)	1:A:834:PRO:O	1:A:838:ARG:H	18	0.2
(1,72)	1:A:826:MET:O	1:A:870:ASP:N	19	0.2
(1,69)	1:A:825:MET:O	1:A:850:GLN:H	10	0.2
(1,68)	1:A:795:LEU:O	1:A:799:TYR:H	4	0.2
(1,68)	1:A:795:LEU:O	1:A:799:TYR:H	10	0.2
(1,68)	1:A:795:LEU:O	1:A:799:TYR:H	12	0.2
(1,62)	1:A:792:PRO:O	1:A:796:ALA:H	2	0.2
(1,56)	1:A:766:CYS:H	1:A:783:HIS:O	4	0.2
(1,56)	1:A:766:CYS:H	1:A:783:HIS:O	20	0.2
(1,29)	1:A:721:PHE:O	1:A:725:SER:N	18	0.2
(1,23)	1:A:718:LEU:O	1:A:722:LEU:N	6	0.2
(1,23)	1:A:718:LEU:O	1:A:722:LEU:N	12	0.2
(1,203)	1:A:831:ASP:OD1	1:A:925:LYS:HZ3	4	0.2
(1,199)	1:A:943:VAL:O	1:A:947:ARG:H	5	0.2
(1,198)	1:A:942:ARG:O	1:A:946:SER:N	3	0.2
(1,198)	1:A:942:ARG:O	1:A:946:SER:N	7	0.2
(1,197)	1:A:942:ARG:O	1:A:946:SER:H	4	0.2
(1,197)	1:A:942:ARG:O	1:A:946:SER:H	15	0.2
(1,195)	1:A:941:GLU:O	1:A:945:LYS:H	2	0.2
(1,195)	1:A:941:GLU:O	1:A:945:LYS:H	7	0.2
(1,193)	1:A:940:ALA:O	1:A:944:ARG:H	5	0.2
(1,193)	1:A:940:ALA:O	1:A:944:ARG:H	15	0.2
(1,193)	1:A:940:ALA:O	1:A:944:ARG:H	19	0.2
(1,189)	1:A:938:LEU:O	1:A:942:ARG:H	3	0.2
(1,189)	1:A:938:LEU:O	1:A:942:ARG:H	16	0.2
(1,18)	1:A:712:ALA:O	1:A:750:ASP:H	13	0.2
(1,179)	1:A:933:LYS:O	1:A:937:THR:H	10	0.2
(1,17)	1:A:712:ALA:O	1:A:750:ASP:N	3	0.2
(1,17)	1:A:712:ALA:O	1:A:750:ASP:N	18	0.2
(1,165)	1:A:912:GLN:O	1:A:916:GLU:H	10	0.2
(1,161)	1:A:910:GLU:O	1:A:914:CYS:H	11	0.2
(1,161)	1:A:910:GLU:O	1:A:914:CYS:H	13	0.2
(1,161)	1:A:910:GLU:O	1:A:914:CYS:H	15	0.2
(1,150)	1:A:899:VAL:O	1:A:921:SER:N	5	0.2
(1,149)	1:A:899:VAL:O	1:A:921:SER:H	15	0.2
(1,148)	1:A:899:VAL:N	1:A:919:MET:O	15	0.2
(1,143)	1:A:888:GLN:O	1:A:892:GLN:H	20	0.2
(1,142)	1:A:887:THR:O	1:A:891:ARG:N	17	0.2
(1,131)	1:A:874:SER:O	1:A:902:VAL:H	4	0.2
(1,126)	1:A:872:VAL:N	1:A:898:PRO:O	2	0.2
(1,126)	1:A:872:VAL:N	1:A:898:PRO:O	9	0.2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,126)	1:A:872:VAL:N	1:A:898:PRO:O	11	0.2
(1,126)	1:A:872:VAL:N	1:A:898:PRO:O	13	0.2
(1,126)	1:A:872:VAL:N	1:A:898:PRO:O	17	0.2
(1,125)	1:A:872:VAL:H	1:A:898:PRO:O	6	0.2
(1,123)	1:A:863:VAL:O	1:A:867:ASN:H	2	0.2
(1,121)	1:A:862:ASN:O	1:A:866:LYS:H	9	0.2
(1,121)	1:A:862:ASN:O	1:A:866:LYS:H	11	0.2
(1,119)	1:A:861:LEU:O	1:A:865:SER:H	9	0.2
(1,119)	1:A:861:LEU:O	1:A:865:SER:H	15	0.2
(1,117)	1:A:860:ALA:O	1:A:864:LEU:H	6	0.2
(1,117)	1:A:860:ALA:O	1:A:864:LEU:H	7	0.2
(1,117)	1:A:860:ALA:O	1:A:864:LEU:H	10	0.2
(1,113)	1:A:858:VAL:O	1:A:862:ASN:H	2	0.2
(1,11)	1:A:711:LEU:H	1:A:734:THR:O	19	0.2
(1,109)	1:A:842:ASP:O	1:A:846:SER:H	4	0.2
(1,103)	1:A:839:LEU:O	1:A:843:GLN:H	15	0.2
(3,347)	1:A:775:GLU:H	1:A:780:GLU:HA	11	0.19
(2,956)	1:A:775:GLU:HG2	1:A:776:LYS:H	3	0.19
(2,956)	1:A:775:GLU:HG2	1:A:776:LYS:H	15	0.19
(2,956)	1:A:775:GLU:HG2	1:A:776:LYS:H	18	0.19
(2,254)	1:A:716:ALA:H	1:A:720:GLN:H	2	0.19
(2,254)	1:A:716:ALA:H	1:A:720:GLN:H	15	0.19
(1,92)	1:A:832:ASP:N	1:A:875:ASP:O	17	0.19
(1,91)	1:A:832:ASP:H	1:A:875:ASP:O	1	0.19
(1,78)	1:A:828:LEU:N	1:A:871:ILE:O	12	0.19
(1,71)	1:A:826:MET:O	1:A:870:ASP:H	12	0.19
(1,71)	1:A:826:MET:O	1:A:870:ASP:H	17	0.19
(1,69)	1:A:825:MET:O	1:A:850:GLN:H	9	0.19
(1,69)	1:A:825:MET:O	1:A:850:GLN:H	11	0.19
(1,69)	1:A:825:MET:O	1:A:850:GLN:H	14	0.19
(1,68)	1:A:795:LEU:O	1:A:799:TYR:H	8	0.19
(1,62)	1:A:792:PRO:O	1:A:796:ALA:H	9	0.19
(1,34)	1:A:723:GLU:O	1:A:727:GLN:H	1	0.19
(1,32)	1:A:722:LEU:O	1:A:726:LEU:H	4	0.19
(1,28)	1:A:720:GLN:O	1:A:724:THR:H	20	0.19
(1,23)	1:A:718:LEU:O	1:A:722:LEU:N	7	0.19
(1,23)	1:A:718:LEU:O	1:A:722:LEU:N	10	0.19
(1,23)	1:A:718:LEU:O	1:A:722:LEU:N	11	0.19
(1,201)	1:A:944:ARG:O	1:A:948:ASP:H	8	0.19
(1,200)	1:A:943:VAL:O	1:A:947:ARG:N	16	0.19
(1,195)	1:A:941:GLU:O	1:A:945:LYS:H	19	0.19
(1,193)	1:A:940:ALA:O	1:A:944:ARG:H	10	0.19

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,18)	1:A:712:ALA:O	1:A:750:ASP:H	14	0.19
(1,161)	1:A:910:GLU:O	1:A:914:CYS:H	20	0.19
(1,158)	1:A:908:ALA:O	1:A:912:GLN:N	14	0.19
(1,148)	1:A:899:VAL:N	1:A:919:MET:O	8	0.19
(1,142)	1:A:887:THR:O	1:A:891:ARG:N	5	0.19
(1,142)	1:A:887:THR:O	1:A:891:ARG:N	6	0.19
(1,142)	1:A:887:THR:O	1:A:891:ARG:N	18	0.19
(1,141)	1:A:887:THR:O	1:A:891:ARG:H	10	0.19
(1,139)	1:A:886:LEU:O	1:A:890:ILE:H	19	0.19
(1,126)	1:A:872:VAL:N	1:A:898:PRO:O	10	0.19
(1,126)	1:A:872:VAL:N	1:A:898:PRO:O	20	0.19
(1,117)	1:A:860:ALA:O	1:A:864:LEU:H	14	0.19
(1,116)	1:A:859:ASP:O	1:A:863:VAL:N	11	0.19
(1,114)	1:A:858:VAL:O	1:A:862:ASN:N	4	0.19
(1,111)	1:A:843:GLN:O	1:A:847:LEU:H	19	0.19
(1,109)	1:A:842:ASP:O	1:A:846:SER:H	7	0.19
(1,103)	1:A:839:LEU:O	1:A:843:GLN:H	4	0.19
(2,956)	1:A:775:GLU:HG2	1:A:776:LYS:H	16	0.18
(2,776)	1:A:759:GLY:HA2	1:A:761:ALA:H	11	0.18
(2,254)	1:A:716:ALA:H	1:A:720:GLN:H	9	0.18
(2,235)	1:A:714:ARG:HB3	1:A:715:ASN:HA	19	0.18
(2,134)	1:A:711:LEU:H	1:A:711:LEU:HG	20	0.18
(2,1304)	1:A:828:LEU:HB3	1:A:852:LYS:H	14	0.18
(2,1216)	1:A:821:ASP:HA	1:A:823:ASP:H	15	0.18
(2,1014)	1:A:782:VAL:HG21	1:A:783:HIS:HD2	9	0.18
(2,1014)	1:A:782:VAL:HG22	1:A:783:HIS:HD2	9	0.18
(2,1014)	1:A:782:VAL:HG23	1:A:783:HIS:HD2	9	0.18
(1,99)	1:A:837:ARG:O	1:A:841:ALA:H	18	0.18
(1,99)	1:A:837:ARG:O	1:A:841:ALA:H	20	0.18
(1,92)	1:A:832:ASP:N	1:A:875:ASP:O	5	0.18
(1,63)	1:A:793:ALA:O	1:A:797:ARG:N	17	0.18
(1,54)	1:A:764:THR:O	1:A:783:HIS:H	9	0.18
(1,22)	1:A:717:SER:O	1:A:721:PHE:H	9	0.18
(1,199)	1:A:943:VAL:O	1:A:947:ARG:H	3	0.18
(1,191)	1:A:939:TYR:O	1:A:943:VAL:H	12	0.18
(1,190)	1:A:938:LEU:O	1:A:942:ARG:N	8	0.18
(1,17)	1:A:712:ALA:O	1:A:750:ASP:N	10	0.18
(1,17)	1:A:712:ALA:O	1:A:750:ASP:N	12	0.18
(1,157)	1:A:908:ALA:O	1:A:912:GLN:H	17	0.18
(1,150)	1:A:899:VAL:O	1:A:921:SER:N	19	0.18
(1,148)	1:A:899:VAL:N	1:A:919:MET:O	20	0.18
(1,14)	1:A:711:LEU:O	1:A:736:TYR:H	4	0.18

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,126)	1:A:872:VAL:N	1:A:898:PRO:O	6	0.18
(1,104)	1:A:839:LEU:O	1:A:843:GLN:N	5	0.18
(3,665)	1:A:857:GLY:HA2	1:A:886:LEU:H	19	0.17
(3,16)	1:A:707:LYS:HG3	1:A:799:TYR:HA	9	0.17
(2,776)	1:A:759:GLY:HA2	1:A:761:ALA:H	16	0.17
(2,733)	1:A:755:LYS:HB2	1:A:757:TRP:H	9	0.17
(2,708)	1:A:751:GLU:HG3	1:A:752:VAL:HG21	6	0.17
(2,708)	1:A:751:GLU:HG3	1:A:752:VAL:HG22	6	0.17
(2,708)	1:A:751:GLU:HG3	1:A:752:VAL:HG23	6	0.17
(2,575)	1:A:744:GLU:HG3	1:A:745:ASP:H	11	0.17
(2,508)	1:A:736:TYR:HE1	1:A:738:GLY:HA3	13	0.17
(2,508)	1:A:736:TYR:HE2	1:A:738:GLY:HA3	13	0.17
(2,254)	1:A:716:ALA:H	1:A:720:GLN:H	10	0.17
(2,166)	1:A:711:LEU:HD21	1:A:736:TYR:H	18	0.17
(2,166)	1:A:711:LEU:HD22	1:A:736:TYR:H	18	0.17
(2,166)	1:A:711:LEU:HD23	1:A:736:TYR:H	18	0.17
(2,1588)	1:A:858:VAL:HG21	1:A:859:ASP:HA	5	0.17
(2,1588)	1:A:858:VAL:HG22	1:A:859:ASP:HA	5	0.17
(2,1588)	1:A:858:VAL:HG23	1:A:859:ASP:HA	5	0.17
(2,1508)	1:A:847:LEU:H	1:A:847:LEU:HG	1	0.17
(2,1448)	1:A:840:LEU:HG	1:A:841:ALA:HA	2	0.17
(2,1448)	1:A:840:LEU:HG	1:A:841:ALA:HA	18	0.17
(2,1096)	1:A:794:LEU:HD11	1:A:798:ILE:H	6	0.17
(2,1096)	1:A:794:LEU:HD12	1:A:798:ILE:H	6	0.17
(2,1096)	1:A:794:LEU:HD13	1:A:798:ILE:H	6	0.17
(1,90)	1:A:831:ASP:N	1:A:854:ALA:O	1	0.17
(1,90)	1:A:831:ASP:N	1:A:854:ALA:O	2	0.17
(1,68)	1:A:795:LEU:O	1:A:799:TYR:H	3	0.17
(1,67)	1:A:795:LEU:O	1:A:799:TYR:N	9	0.17
(1,38)	1:A:747:LEU:H	1:A:761:ALA:O	20	0.17
(1,29)	1:A:721:PHE:O	1:A:725:SER:N	11	0.17
(1,197)	1:A:942:ARG:O	1:A:946:SER:H	10	0.17
(1,194)	1:A:940:ALA:O	1:A:944:ARG:N	17	0.17
(1,189)	1:A:938:LEU:O	1:A:942:ARG:H	11	0.17
(1,170)	1:A:928:THR:O	1:A:932:ILE:N	16	0.17
(1,17)	1:A:712:ALA:O	1:A:750:ASP:N	11	0.17
(1,166)	1:A:912:GLN:O	1:A:916:GLU:N	5	0.17
(1,162)	1:A:910:GLU:O	1:A:914:CYS:N	7	0.17
(1,161)	1:A:910:GLU:O	1:A:914:CYS:H	19	0.17
(1,148)	1:A:899:VAL:N	1:A:919:MET:O	18	0.17
(1,148)	1:A:899:VAL:N	1:A:919:MET:O	19	0.17
(1,139)	1:A:886:LEU:O	1:A:890:ILE:H	2	0.17

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,138)	1:A:885:ARG:O	1:A:889:ARG:N	3	0.17
(1,137)	1:A:885:ARG:O	1:A:889:ARG:H	12	0.17
(1,131)	1:A:874:SER:O	1:A:902:VAL:H	15	0.17
(1,121)	1:A:862:ASN:O	1:A:866:LYS:H	3	0.17
(1,121)	1:A:862:ASN:O	1:A:866:LYS:H	15	0.17
(1,117)	1:A:860:ALA:O	1:A:864:LEU:H	12	0.17
(1,116)	1:A:859:ASP:O	1:A:863:VAL:N	19	0.17
(1,109)	1:A:842:ASP:O	1:A:846:SER:H	20	0.17
(1,104)	1:A:839:LEU:O	1:A:843:GLN:N	13	0.17
(1,104)	1:A:839:LEU:O	1:A:843:GLN:N	16	0.17
(1,103)	1:A:839:LEU:O	1:A:843:GLN:H	17	0.17
(1,101)	1:A:838:ARG:O	1:A:842:ASP:H	5	0.17
(3,386)	1:A:787:ALA:H	1:A:791:LEU:H	15	0.16
(3,356)	1:A:775:GLU:HG3	1:A:779:GLY:H	18	0.16
(3,347)	1:A:775:GLU:H	1:A:780:GLU:HA	6	0.16
(3,347)	1:A:775:GLU:H	1:A:780:GLU:HA	20	0.16
(3,177)	1:A:732:VAL:HG21	1:A:734:THR:HA	8	0.16
(3,177)	1:A:732:VAL:HG22	1:A:734:THR:HA	8	0.16
(3,177)	1:A:732:VAL:HG23	1:A:734:THR:HA	8	0.16
(2,956)	1:A:775:GLU:HG2	1:A:776:LYS:H	6	0.16
(2,956)	1:A:775:GLU:HG2	1:A:776:LYS:H	7	0.16
(2,956)	1:A:775:GLU:HG2	1:A:776:LYS:H	13	0.16
(2,956)	1:A:775:GLU:HG2	1:A:776:LYS:H	19	0.16
(2,686)	1:A:749:THR:HB	1:A:753:VAL:HB	5	0.16
(2,254)	1:A:716:ALA:H	1:A:720:GLN:H	3	0.16
(2,254)	1:A:716:ALA:H	1:A:720:GLN:H	5	0.16
(2,254)	1:A:716:ALA:H	1:A:720:GLN:H	14	0.16
(2,254)	1:A:716:ALA:H	1:A:720:GLN:H	18	0.16
(2,1922)	1:A:903:THR:HB	1:A:906:ALA:HB1	3	0.16
(2,1922)	1:A:903:THR:HB	1:A:906:ALA:HB2	3	0.16
(2,1922)	1:A:903:THR:HB	1:A:906:ALA:HB3	3	0.16
(2,1922)	1:A:903:THR:HB	1:A:906:ALA:HB1	9	0.16
(2,1922)	1:A:903:THR:HB	1:A:906:ALA:HB2	9	0.16
(2,1922)	1:A:903:THR:HB	1:A:906:ALA:HB3	9	0.16
(2,1774)	1:A:884:TYR:H	1:A:885:ARG:HD2	3	0.16
(2,1193)	1:A:802:GLU:HA	1:A:803:MET:H	10	0.16
(2,1141)	1:A:798:ILE:H	1:A:798:ILE:HG12	8	0.16
(1,96)	1:A:835:ILE:O	1:A:839:LEU:N	3	0.16
(1,93)	1:A:834:PRO:O	1:A:838:ARG:H	8	0.16
(1,90)	1:A:831:ASP:N	1:A:854:ALA:O	10	0.16
(1,83)	1:A:829:VAL:O	1:A:854:ALA:H	6	0.16
(1,72)	1:A:826:MET:O	1:A:870:ASP:N	12	0.16

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,70)	1:A:825:MET:O	1:A:850:GLN:N	7	0.16
(1,62)	1:A:792:PRO:O	1:A:796:ALA:H	1	0.16
(1,56)	1:A:766:CYS:H	1:A:783:HIS:O	8	0.16
(1,54)	1:A:764:THR:O	1:A:783:HIS:H	2	0.16
(1,21)	1:A:717:SER:O	1:A:721:PHE:N	4	0.16
(1,21)	1:A:717:SER:O	1:A:721:PHE:N	5	0.16
(1,17)	1:A:712:ALA:O	1:A:750:ASP:N	14	0.16
(1,17)	1:A:712:ALA:O	1:A:750:ASP:N	17	0.16
(1,166)	1:A:912:GLN:O	1:A:916:GLU:N	10	0.16
(1,160)	1:A:909:GLU:O	1:A:913:ARG:N	9	0.16
(1,155)	1:A:903:THR:H	1:A:923:LEU:O	17	0.16
(1,150)	1:A:899:VAL:O	1:A:921:SER:N	13	0.16
(1,150)	1:A:899:VAL:O	1:A:921:SER:N	16	0.16
(1,148)	1:A:899:VAL:N	1:A:919:MET:O	7	0.16
(1,144)	1:A:888:GLN:O	1:A:892:GLN:N	3	0.16
(1,143)	1:A:888:GLN:O	1:A:892:GLN:H	15	0.16
(1,142)	1:A:887:THR:O	1:A:891:ARG:N	8	0.16
(1,142)	1:A:887:THR:O	1:A:891:ARG:N	10	0.16
(1,125)	1:A:872:VAL:H	1:A:898:PRO:O	5	0.16
(1,125)	1:A:872:VAL:H	1:A:898:PRO:O	12	0.16
(1,123)	1:A:863:VAL:O	1:A:867:ASN:H	3	0.16
(1,119)	1:A:861:LEU:O	1:A:865:SER:H	18	0.16
(1,111)	1:A:843:GLN:O	1:A:847:LEU:H	14	0.16
(1,11)	1:A:711:LEU:H	1:A:734:THR:O	17	0.16
(1,104)	1:A:839:LEU:O	1:A:843:GLN:N	6	0.16
(3,58)	1:A:711:LEU:HG	1:A:734:THR:H	6	0.15
(3,347)	1:A:775:GLU:H	1:A:780:GLU:HA	2	0.15
(3,347)	1:A:775:GLU:H	1:A:780:GLU:HA	8	0.15
(3,347)	1:A:775:GLU:H	1:A:780:GLU:HA	10	0.15
(2,956)	1:A:775:GLU:HG2	1:A:776:LYS:H	4	0.15
(2,956)	1:A:775:GLU:HG2	1:A:776:LYS:H	9	0.15
(2,776)	1:A:759:GLY:HA2	1:A:761:ALA:H	15	0.15
(2,575)	1:A:744:GLU:HG3	1:A:745:ASP:H	15	0.15
(2,482)	1:A:734:THR:HA	1:A:735:THR:HB	4	0.15
(2,482)	1:A:734:THR:HA	1:A:735:THR:HB	10	0.15
(2,254)	1:A:716:ALA:H	1:A:720:GLN:H	1	0.15
(2,254)	1:A:716:ALA:H	1:A:720:GLN:H	7	0.15
(2,254)	1:A:716:ALA:H	1:A:720:GLN:H	8	0.15
(2,254)	1:A:716:ALA:H	1:A:720:GLN:H	19	0.15
(2,1935)	1:A:905:ASN:HB3	1:A:907:LEU:H	9	0.15
(2,1771)	1:A:883:GLY:HA3	1:A:886:LEU:H	18	0.15
(2,1205)	1:A:805:SER:HB2	1:A:807:ASP:HB2	4	0.15

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,1205)	1:A:805:SER:HB3	1:A:807:ASP:HB2	4	0.15
(2,1189)	1:A:801:ILE:HD11	1:A:802:GLU:H	9	0.15
(2,1189)	1:A:801:ILE:HD12	1:A:802:GLU:H	9	0.15
(2,1189)	1:A:801:ILE:HD13	1:A:802:GLU:H	9	0.15
(2,1176)	1:A:801:ILE:H	1:A:803:MET:H	18	0.15
(1,98)	1:A:836:ASN:O	1:A:840:LEU:N	19	0.15
(1,96)	1:A:835:ILE:O	1:A:839:LEU:N	18	0.15
(1,90)	1:A:831:ASP:N	1:A:854:ALA:O	9	0.15
(1,90)	1:A:831:ASP:N	1:A:854:ALA:O	11	0.15
(1,84)	1:A:829:VAL:O	1:A:854:ALA:N	11	0.15
(1,8)	1:A:710:TRP:H	1:A:746:VAL:O	14	0.15
(1,71)	1:A:826:MET:O	1:A:870:ASP:H	16	0.15
(1,62)	1:A:792:PRO:O	1:A:796:ALA:H	19	0.15
(1,61)	1:A:792:PRO:O	1:A:796:ALA:N	6	0.15
(1,58)	1:A:790:GLU:O	1:A:794:LEU:H	17	0.15
(1,30)	1:A:721:PHE:O	1:A:725:SER:H	4	0.15
(1,29)	1:A:721:PHE:O	1:A:725:SER:N	9	0.15
(1,29)	1:A:721:PHE:O	1:A:725:SER:N	16	0.15
(1,201)	1:A:944:ARG:O	1:A:948:ASP:H	5	0.15
(1,197)	1:A:942:ARG:O	1:A:946:SER:H	5	0.15
(1,190)	1:A:938:LEU:O	1:A:942:ARG:N	6	0.15
(1,187)	1:A:937:THR:O	1:A:941:GLU:H	18	0.15
(1,177)	1:A:932:ILE:O	1:A:936:LEU:H	5	0.15
(1,150)	1:A:899:VAL:O	1:A:921:SER:N	3	0.15
(1,150)	1:A:899:VAL:O	1:A:921:SER:N	17	0.15
(1,142)	1:A:887:THR:O	1:A:891:ARG:N	12	0.15
(1,131)	1:A:874:SER:O	1:A:902:VAL:H	7	0.15
(1,13)	1:A:711:LEU:O	1:A:736:TYR:N	4	0.15
(1,129)	1:A:874:SER:H	1:A:900:ILE:O	9	0.15
(1,120)	1:A:861:LEU:O	1:A:865:SER:N	1	0.15
(1,11)	1:A:711:LEU:H	1:A:734:THR:O	4	0.15
(1,109)	1:A:842:ASP:O	1:A:846:SER:H	11	0.15
(1,104)	1:A:839:LEU:O	1:A:843:GLN:N	15	0.15
(3,832)	1:A:902:VAL:H	1:A:923:LEU:HD11	18	0.14
(3,832)	1:A:902:VAL:H	1:A:923:LEU:HD12	18	0.14
(3,832)	1:A:902:VAL:H	1:A:923:LEU:HD13	18	0.14
(3,781)	1:A:884:TYR:HE1	1:A:885:ARG:HD3	6	0.14
(3,781)	1:A:884:TYR:HE2	1:A:885:ARG:HD3	6	0.14
(3,78)	1:A:713:VAL:H	1:A:714:ARG:HG3	2	0.14
(3,347)	1:A:775:GLU:H	1:A:780:GLU:HA	14	0.14
(3,347)	1:A:775:GLU:H	1:A:780:GLU:HA	19	0.14
(2,936)	1:A:774:LEU:HG	1:A:781:TRP:HA	4	0.14

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,892)	1:A:769:HIS:HA	1:A:770:ILE:HB	1	0.14
(2,736)	1:A:755:LYS:HB3	1:A:757:TRP:H	5	0.14
(2,692)	1:A:749:THR:HG21	1:A:764:THR:HB	4	0.14
(2,692)	1:A:749:THR:HG22	1:A:764:THR:HB	4	0.14
(2,692)	1:A:749:THR:HG23	1:A:764:THR:HB	4	0.14
(2,575)	1:A:744:GLU:HG3	1:A:745:ASP:H	1	0.14
(2,482)	1:A:734:THR:HA	1:A:735:THR:HB	17	0.14
(2,254)	1:A:716:ALA:H	1:A:720:GLN:H	6	0.14
(2,254)	1:A:716:ALA:H	1:A:720:GLN:H	16	0.14
(2,23)	1:A:707:LYS:H	1:A:707:LYS:HG3	7	0.14
(2,1922)	1:A:903:THR:HB	1:A:906:ALA:HB1	15	0.14
(2,1922)	1:A:903:THR:HB	1:A:906:ALA:HB2	15	0.14
(2,1922)	1:A:903:THR:HB	1:A:906:ALA:HB3	15	0.14
(2,1774)	1:A:884:TYR:H	1:A:885:ARG:HD2	16	0.14
(2,1774)	1:A:884:TYR:H	1:A:885:ARG:HD2	19	0.14
(2,1448)	1:A:840:LEU:HG	1:A:841:ALA:HA	12	0.14
(2,1448)	1:A:840:LEU:HG	1:A:841:ALA:HA	15	0.14
(2,1414)	1:A:837:ARG:H	1:A:840:LEU:HG	13	0.14
(2,1239)	1:A:825:MET:H	1:A:849:TYR:HA	12	0.14
(1,94)	1:A:834:PRO:O	1:A:838:ARG:N	18	0.14
(1,91)	1:A:832:ASP:H	1:A:875:ASP:O	12	0.14
(1,90)	1:A:831:ASP:N	1:A:854:ALA:O	6	0.14
(1,87)	1:A:830:VAL:O	1:A:875:ASP:H	13	0.14
(1,8)	1:A:710:TRP:H	1:A:746:VAL:O	8	0.14
(1,69)	1:A:825:MET:O	1:A:850:GLN:H	6	0.14
(1,67)	1:A:795:LEU:O	1:A:799:TYR:N	7	0.14
(1,64)	1:A:793:ALA:O	1:A:797:ARG:H	6	0.14
(1,62)	1:A:792:PRO:O	1:A:796:ALA:H	14	0.14
(1,56)	1:A:766:CYS:H	1:A:783:HIS:O	15	0.14
(1,44)	1:A:749:THR:O	1:A:765:PHE:H	1	0.14
(1,30)	1:A:721:PHE:O	1:A:725:SER:H	2	0.14
(1,24)	1:A:718:LEU:O	1:A:722:LEU:H	15	0.14
(1,24)	1:A:718:LEU:O	1:A:722:LEU:H	18	0.14
(1,21)	1:A:717:SER:O	1:A:721:PHE:N	3	0.14
(1,21)	1:A:717:SER:O	1:A:721:PHE:N	14	0.14
(1,21)	1:A:717:SER:O	1:A:721:PHE:N	15	0.14
(1,2)	1:A:707:LYS:O	1:A:732:VAL:H	18	0.14
(1,197)	1:A:942:ARG:O	1:A:946:SER:H	8	0.14
(1,196)	1:A:941:GLU:O	1:A:945:LYS:N	2	0.14
(1,189)	1:A:938:LEU:O	1:A:942:ARG:H	5	0.14
(1,184)	1:A:935:THR:O	1:A:939:TYR:N	4	0.14
(1,174)	1:A:930:ASP:O	1:A:934:GLN:N	10	0.14

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,17)	1:A:712:ALA:O	1:A:750:ASP:N	1	0.14
(1,169)	1:A:928:THR:O	1:A:932:ILE:H	10	0.14
(1,163)	1:A:911:LYS:O	1:A:915:LEU:H	8	0.14
(1,163)	1:A:911:LYS:O	1:A:915:LEU:H	9	0.14
(1,162)	1:A:910:GLU:O	1:A:914:CYS:N	2	0.14
(1,162)	1:A:910:GLU:O	1:A:914:CYS:N	11	0.14
(1,162)	1:A:910:GLU:O	1:A:914:CYS:N	14	0.14
(1,158)	1:A:908:ALA:O	1:A:912:GLN:N	6	0.14
(1,158)	1:A:908:ALA:O	1:A:912:GLN:N	19	0.14
(1,157)	1:A:908:ALA:O	1:A:912:GLN:H	1	0.14
(1,157)	1:A:908:ALA:O	1:A:912:GLN:H	9	0.14
(1,150)	1:A:899:VAL:O	1:A:921:SER:N	15	0.14
(1,142)	1:A:887:THR:O	1:A:891:ARG:N	2	0.14
(1,140)	1:A:886:LEU:O	1:A:890:ILE:N	19	0.14
(1,134)	1:A:876:VAL:N	1:A:902:VAL:O	5	0.14
(1,130)	1:A:874:SER:N	1:A:900:ILE:O	10	0.14
(1,126)	1:A:872:VAL:N	1:A:898:PRO:O	5	0.14
(1,126)	1:A:872:VAL:N	1:A:898:PRO:O	12	0.14
(1,122)	1:A:862:ASN:O	1:A:866:LYS:N	16	0.14
(1,117)	1:A:860:ALA:O	1:A:864:LEU:H	3	0.14
(1,117)	1:A:860:ALA:O	1:A:864:LEU:H	13	0.14
(1,114)	1:A:858:VAL:O	1:A:862:ASN:N	5	0.14
(1,110)	1:A:842:ASP:O	1:A:846:SER:N	12	0.14
(1,109)	1:A:842:ASP:O	1:A:846:SER:H	9	0.14
(1,104)	1:A:839:LEU:O	1:A:843:GLN:N	11	0.14
(1,104)	1:A:839:LEU:O	1:A:843:GLN:N	14	0.14
(1,103)	1:A:839:LEU:O	1:A:843:GLN:H	1	0.14
(1,103)	1:A:839:LEU:O	1:A:843:GLN:H	3	0.14
(3,58)	1:A:711:LEU:HG	1:A:734:THR:H	20	0.13
(3,4)	1:A:704:LEU:HD21	1:A:730:GLY:HA2	7	0.13
(3,4)	1:A:704:LEU:HD22	1:A:730:GLY:HA2	7	0.13
(3,4)	1:A:704:LEU:HD23	1:A:730:GLY:HA2	7	0.13
(3,386)	1:A:787:ALA:H	1:A:791:LEU:H	1	0.13
(3,381)	1:A:783:HIS:HD2	1:A:784:SER:HB3	17	0.13
(3,347)	1:A:775:GLU:H	1:A:780:GLU:HA	4	0.13
(3,347)	1:A:775:GLU:H	1:A:780:GLU:HA	5	0.13
(3,347)	1:A:775:GLU:H	1:A:780:GLU:HA	13	0.13
(3,347)	1:A:775:GLU:H	1:A:780:GLU:HA	15	0.13
(3,347)	1:A:775:GLU:H	1:A:780:GLU:HA	17	0.13
(3,269)	1:A:752:VAL:HB	1:A:770:ILE:HA	5	0.13
(2,956)	1:A:775:GLU:HG2	1:A:776:LYS:H	10	0.13
(2,956)	1:A:775:GLU:HG2	1:A:776:LYS:H	14	0.13

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,936)	1:A:774:LEU:HG	1:A:781:TRP:HA	6	0.13
(2,926)	1:A:774:LEU:HB2	1:A:776:LYS:H	4	0.13
(2,8)	1:A:704:LEU:HG	1:A:705:SER:H	10	0.13
(2,692)	1:A:749:THR:HG21	1:A:764:THR:HB	11	0.13
(2,692)	1:A:749:THR:HG22	1:A:764:THR:HB	11	0.13
(2,692)	1:A:749:THR:HG23	1:A:764:THR:HB	11	0.13
(2,585)	1:A:745:ASP:HA	1:A:746:VAL:HB	4	0.13
(2,585)	1:A:745:ASP:HA	1:A:746:VAL:HB	10	0.13
(2,575)	1:A:744:GLU:HG3	1:A:745:ASP:H	4	0.13
(2,254)	1:A:716:ALA:H	1:A:720:GLN:H	20	0.13
(2,2146)	1:A:934:GLN:H	1:A:937:THR:HB	16	0.13
(2,1934)	1:A:905:ASN:HA	1:A:907:LEU:H	19	0.13
(2,1774)	1:A:884:TYR:H	1:A:885:ARG:HD2	1	0.13
(2,1774)	1:A:884:TYR:H	1:A:885:ARG:HD2	11	0.13
(2,1176)	1:A:801:ILE:H	1:A:803:MET:H	19	0.13
(2,1096)	1:A:794:LEU:HD11	1:A:798:ILE:H	20	0.13
(2,1096)	1:A:794:LEU:HD12	1:A:798:ILE:H	20	0.13
(2,1096)	1:A:794:LEU:HD13	1:A:798:ILE:H	20	0.13
(2,1052)	1:A:789:HIS:HD2	1:A:790:GLU:HG2	5	0.13
(1,96)	1:A:835:ILE:O	1:A:839:LEU:N	13	0.13
(1,96)	1:A:835:ILE:O	1:A:839:LEU:N	20	0.13
(1,91)	1:A:832:ASP:H	1:A:875:ASP:O	11	0.13
(1,90)	1:A:831:ASP:N	1:A:854:ALA:O	7	0.13
(1,83)	1:A:829:VAL:O	1:A:854:ALA:H	19	0.13
(1,64)	1:A:793:ALA:O	1:A:797:ARG:H	12	0.13
(1,63)	1:A:793:ALA:O	1:A:797:ARG:N	11	0.13
(1,63)	1:A:793:ALA:O	1:A:797:ARG:N	20	0.13
(1,61)	1:A:792:PRO:O	1:A:796:ALA:N	17	0.13
(1,56)	1:A:766:CYS:H	1:A:783:HIS:O	17	0.13
(1,55)	1:A:766:CYS:N	1:A:783:HIS:O	16	0.13
(1,38)	1:A:747:LEU:H	1:A:761:ALA:O	8	0.13
(1,34)	1:A:723:GLU:O	1:A:727:GLN:H	20	0.13
(1,29)	1:A:721:PHE:O	1:A:725:SER:N	5	0.13
(1,29)	1:A:721:PHE:O	1:A:725:SER:N	7	0.13
(1,29)	1:A:721:PHE:O	1:A:725:SER:N	10	0.13
(1,29)	1:A:721:PHE:O	1:A:725:SER:N	13	0.13
(1,24)	1:A:718:LEU:O	1:A:722:LEU:H	19	0.13
(1,21)	1:A:717:SER:O	1:A:721:PHE:N	1	0.13
(1,21)	1:A:717:SER:O	1:A:721:PHE:N	6	0.13
(1,21)	1:A:717:SER:O	1:A:721:PHE:N	13	0.13
(1,21)	1:A:717:SER:O	1:A:721:PHE:N	19	0.13
(1,204)	1:A:831:ASP:OD1	1:A:925:LYS:NZ	11	0.13

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,189)	1:A:938:LEU:O	1:A:942:ARG:H	13	0.13
(1,187)	1:A:937:THR:O	1:A:941:GLU:H	11	0.13
(1,183)	1:A:935:THR:O	1:A:939:TYR:H	13	0.13
(1,17)	1:A:712:ALA:O	1:A:750:ASP:N	4	0.13
(1,162)	1:A:910:GLU:O	1:A:914:CYS:N	15	0.13
(1,162)	1:A:910:GLU:O	1:A:914:CYS:N	17	0.13
(1,158)	1:A:908:ALA:O	1:A:912:GLN:N	4	0.13
(1,139)	1:A:886:LEU:O	1:A:890:ILE:H	6	0.13
(1,135)	1:A:884:TYR:O	1:A:888:GLN:H	8	0.13
(1,117)	1:A:860:ALA:O	1:A:864:LEU:H	8	0.13
(1,117)	1:A:860:ALA:O	1:A:864:LEU:H	15	0.13
(1,110)	1:A:842:ASP:O	1:A:846:SER:N	10	0.13
(1,11)	1:A:711:LEU:H	1:A:734:THR:O	10	0.13
(1,103)	1:A:839:LEU:O	1:A:843:GLN:H	20	0.13
(3,58)	1:A:711:LEU:HG	1:A:734:THR:H	3	0.12
(3,58)	1:A:711:LEU:HG	1:A:734:THR:H	13	0.12
(3,540)	1:A:831:ASP:HA	1:A:856:ASP:H	1	0.12
(3,356)	1:A:775:GLU:HG3	1:A:779:GLY:H	15	0.12
(3,267)	1:A:751:GLU:HG2	1:A:769:HIS:H	10	0.12
(3,264)	1:A:750:ASP:HB3	1:A:765:PHE:H	19	0.12
(2,936)	1:A:774:LEU:HG	1:A:781:TRP:HA	1	0.12
(2,936)	1:A:774:LEU:HG	1:A:781:TRP:HA	5	0.12
(2,936)	1:A:774:LEU:HG	1:A:781:TRP:HA	17	0.12
(2,936)	1:A:774:LEU:HG	1:A:781:TRP:HA	19	0.12
(2,894)	1:A:769:HIS:HB2	1:A:769:HIS:HD2	15	0.12
(2,776)	1:A:759:GLY:HA2	1:A:761:ALA:H	10	0.12
(2,776)	1:A:759:GLY:HA2	1:A:761:ALA:H	14	0.12
(2,65)	1:A:708:ARG:HD3	1:A:734:THR:HB	19	0.12
(2,585)	1:A:745:ASP:HA	1:A:746:VAL:HB	7	0.12
(2,585)	1:A:745:ASP:HA	1:A:746:VAL:HB	15	0.12
(2,552)	1:A:742:THR:HB	1:A:744:GLU:HB2	3	0.12
(2,482)	1:A:734:THR:HA	1:A:735:THR:HB	8	0.12
(2,482)	1:A:734:THR:HA	1:A:735:THR:HB	13	0.12
(2,391)	1:A:726:LEU:H	1:A:726:LEU:HG	9	0.12
(2,2236)	1:A:942:ARG:HG2	1:A:943:VAL:HG11	8	0.12
(2,2236)	1:A:942:ARG:HG2	1:A:943:VAL:HG12	8	0.12
(2,2236)	1:A:942:ARG:HG2	1:A:943:VAL:HG13	8	0.12
(2,2009)	1:A:922:CYS:HA	1:A:923:LEU:HB3	8	0.12
(2,1675)	1:A:867:ASN:HD21	1:A:869:ILE:H	19	0.12
(2,1506)	1:A:847:LEU:HB3	1:A:849:TYR:H	3	0.12
(2,150)	1:A:711:LEU:HB2	1:A:747:LEU:HA	18	0.12
(2,150)	1:A:711:LEU:HB3	1:A:747:LEU:HA	18	0.12

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,134)	1:A:711:LEU:H	1:A:711:LEU:HG	6	0.12
(2,1141)	1:A:798:ILE:H	1:A:798:ILE:HG12	1	0.12
(2,1005)	1:A:781:TRP:HE3	1:A:794:LEU:HB2	6	0.12
(2,1005)	1:A:781:TRP:HE3	1:A:794:LEU:HB2	18	0.12
(1,99)	1:A:837:ARG:O	1:A:841:ALA:H	13	0.12
(1,97)	1:A:836:ASN:O	1:A:840:LEU:H	10	0.12
(1,96)	1:A:835:ILE:O	1:A:839:LEU:N	16	0.12
(1,90)	1:A:831:ASP:N	1:A:854:ALA:O	20	0.12
(1,77)	1:A:828:LEU:H	1:A:871:ILE:O	5	0.12
(1,77)	1:A:828:LEU:H	1:A:871:ILE:O	17	0.12
(1,72)	1:A:826:MET:O	1:A:870:ASP:N	6	0.12
(1,70)	1:A:825:MET:O	1:A:850:GLN:N	17	0.12
(1,62)	1:A:792:PRO:O	1:A:796:ALA:H	16	0.12
(1,53)	1:A:764:THR:O	1:A:783:HIS:N	9	0.12
(1,4)	1:A:709:CYS:H	1:A:732:VAL:O	4	0.12
(1,32)	1:A:722:LEU:O	1:A:726:LEU:H	1	0.12
(1,29)	1:A:721:PHE:O	1:A:725:SER:N	1	0.12
(1,29)	1:A:721:PHE:O	1:A:725:SER:N	3	0.12
(1,29)	1:A:721:PHE:O	1:A:725:SER:N	15	0.12
(1,29)	1:A:721:PHE:O	1:A:725:SER:N	17	0.12
(1,24)	1:A:718:LEU:O	1:A:722:LEU:H	5	0.12
(1,23)	1:A:718:LEU:O	1:A:722:LEU:N	15	0.12
(1,23)	1:A:718:LEU:O	1:A:722:LEU:N	18	0.12
(1,21)	1:A:717:SER:O	1:A:721:PHE:N	2	0.12
(1,21)	1:A:717:SER:O	1:A:721:PHE:N	7	0.12
(1,21)	1:A:717:SER:O	1:A:721:PHE:N	17	0.12
(1,198)	1:A:942:ARG:O	1:A:946:SER:N	10	0.12
(1,194)	1:A:940:ALA:O	1:A:944:ARG:N	10	0.12
(1,192)	1:A:939:TYR:O	1:A:943:VAL:N	12	0.12
(1,171)	1:A:929:LEU:O	1:A:933:LYS:H	14	0.12
(1,17)	1:A:712:ALA:O	1:A:750:ASP:N	5	0.12
(1,162)	1:A:910:GLU:O	1:A:914:CYS:N	9	0.12
(1,161)	1:A:910:GLU:O	1:A:914:CYS:H	18	0.12
(1,129)	1:A:874:SER:H	1:A:900:ILE:O	12	0.12
(1,12)	1:A:711:LEU:N	1:A:734:THR:O	19	0.12
(1,104)	1:A:839:LEU:O	1:A:843:GLN:N	7	0.12
(3,962)	1:A:942:ARG:H	1:A:945:LYS:HE2	16	0.11
(3,962)	1:A:942:ARG:H	1:A:945:LYS:HE3	16	0.11
(3,702)	1:A:864:LEU:HG	1:A:865:SER:HA	8	0.11
(3,702)	1:A:864:LEU:HG	1:A:865:SER:HA	15	0.11
(3,7)	1:A:705:SER:H	1:A:730:GLY:H	4	0.11
(3,540)	1:A:831:ASP:HA	1:A:856:ASP:H	16	0.11

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,540)	1:A:831:ASP:HA	1:A:856:ASP:H	18	0.11
(3,356)	1:A:775:GLU:HG3	1:A:779:GLY:H	19	0.11
(3,347)	1:A:775:GLU:H	1:A:780:GLU:HA	9	0.11
(3,327)	1:A:765:PHE:HB2	1:A:784:SER:HA	20	0.11
(3,269)	1:A:752:VAL:HB	1:A:770:ILE:HA	14	0.11
(3,264)	1:A:750:ASP:HB3	1:A:765:PHE:H	16	0.11
(3,197)	1:A:742:THR:HA	1:A:760:ARG:H	12	0.11
(3,197)	1:A:742:THR:HA	1:A:760:ARG:H	16	0.11
(2,956)	1:A:775:GLU:HG2	1:A:776:LYS:H	1	0.11
(2,956)	1:A:775:GLU:HG2	1:A:776:LYS:H	2	0.11
(2,956)	1:A:775:GLU:HG2	1:A:776:LYS:H	5	0.11
(2,936)	1:A:774:LEU:HG	1:A:781:TRP:HA	8	0.11
(2,936)	1:A:774:LEU:HG	1:A:781:TRP:HA	10	0.11
(2,936)	1:A:774:LEU:HG	1:A:781:TRP:HA	12	0.11
(2,930)	1:A:774:LEU:HB3	1:A:782:VAL:HB	5	0.11
(2,867)	1:A:764:THR:HG21	1:A:782:VAL:HA	6	0.11
(2,867)	1:A:764:THR:HG22	1:A:782:VAL:HA	6	0.11
(2,867)	1:A:764:THR:HG23	1:A:782:VAL:HA	6	0.11
(2,759)	1:A:757:TRP:HD1	1:A:759:GLY:HA2	6	0.11
(2,719)	1:A:752:VAL:HG21	1:A:769:HIS:HB2	6	0.11
(2,719)	1:A:752:VAL:HG22	1:A:769:HIS:HB2	6	0.11
(2,719)	1:A:752:VAL:HG23	1:A:769:HIS:HB2	6	0.11
(2,708)	1:A:751:GLU:HG3	1:A:752:VAL:HG21	18	0.11
(2,708)	1:A:751:GLU:HG3	1:A:752:VAL:HG22	18	0.11
(2,708)	1:A:751:GLU:HG3	1:A:752:VAL:HG23	18	0.11
(2,686)	1:A:749:THR:HB	1:A:753:VAL:HB	3	0.11
(2,585)	1:A:745:ASP:HA	1:A:746:VAL:HB	17	0.11
(2,575)	1:A:744:GLU:HG3	1:A:745:ASP:H	10	0.11
(2,309)	1:A:720:GLN:HA	1:A:723:GLU:HB2	7	0.11
(2,254)	1:A:716:ALA:H	1:A:720:GLN:H	4	0.11
(2,254)	1:A:716:ALA:H	1:A:720:GLN:H	13	0.11
(2,2144)	1:A:934:GLN:H	1:A:934:GLN:HG2	19	0.11
(2,2092)	1:A:930:ASP:H	1:A:931:VAL:HG11	12	0.11
(2,2092)	1:A:930:ASP:H	1:A:931:VAL:HG12	12	0.11
(2,2092)	1:A:930:ASP:H	1:A:931:VAL:HG13	12	0.11
(2,2009)	1:A:922:CYS:HA	1:A:923:LEU:HB3	5	0.11
(2,2009)	1:A:922:CYS:HA	1:A:923:LEU:HB3	7	0.11
(2,2009)	1:A:922:CYS:HA	1:A:923:LEU:HB3	20	0.11
(2,1853)	1:A:893:LEU:H	1:A:893:LEU:HG	9	0.11
(2,1774)	1:A:884:TYR:H	1:A:885:ARG:HD2	2	0.11
(2,1678)	1:A:869:ILE:HA	1:A:871:ILE:H	8	0.11
(2,1448)	1:A:840:LEU:HG	1:A:841:ALA:HA	20	0.11

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,1304)	1:A:828:LEU:HB3	1:A:852:LYS:H	6	0.11
(2,1304)	1:A:828:LEU:HB3	1:A:852:LYS:H	10	0.11
(2,1304)	1:A:828:LEU:HB3	1:A:852:LYS:H	13	0.11
(2,1239)	1:A:825:MET:H	1:A:849:TYR:HA	3	0.11
(2,1230)	1:A:824:ASP:H	1:A:825:MET:H	15	0.11
(1,96)	1:A:835:ILE:O	1:A:839:LEU:N	4	0.11
(1,96)	1:A:835:ILE:O	1:A:839:LEU:N	9	0.11
(1,92)	1:A:832:ASP:N	1:A:875:ASP:O	1	0.11
(1,71)	1:A:826:MET:O	1:A:870:ASP:H	20	0.11
(1,70)	1:A:825:MET:O	1:A:850:GLN:N	9	0.11
(1,70)	1:A:825:MET:O	1:A:850:GLN:N	15	0.11
(1,66)	1:A:794:LEU:O	1:A:798:ILE:H	5	0.11
(1,55)	1:A:766:CYS:N	1:A:783:HIS:O	5	0.11
(1,38)	1:A:747:LEU:H	1:A:761:ALA:O	18	0.11
(1,36)	1:A:745:ASP:O	1:A:760:ARG:H	9	0.11
(1,30)	1:A:721:PHE:O	1:A:725:SER:H	12	0.11
(1,29)	1:A:721:PHE:O	1:A:725:SER:N	8	0.11
(1,23)	1:A:718:LEU:O	1:A:722:LEU:N	19	0.11
(1,21)	1:A:717:SER:O	1:A:721:PHE:N	8	0.11
(1,201)	1:A:944:ARG:O	1:A:948:ASP:H	17	0.11
(1,190)	1:A:938:LEU:O	1:A:942:ARG:N	2	0.11
(1,180)	1:A:933:LYS:O	1:A:937:THR:N	5	0.11
(1,180)	1:A:933:LYS:O	1:A:937:THR:N	10	0.11
(1,175)	1:A:931:VAL:O	1:A:935:THR:H	2	0.11
(1,17)	1:A:712:ALA:O	1:A:750:ASP:N	7	0.11
(1,163)	1:A:911:LYS:O	1:A:915:LEU:H	1	0.11
(1,158)	1:A:908:ALA:O	1:A:912:GLN:N	1	0.11
(1,158)	1:A:908:ALA:O	1:A:912:GLN:N	20	0.11
(1,150)	1:A:899:VAL:O	1:A:921:SER:N	6	0.11
(1,150)	1:A:899:VAL:O	1:A:921:SER:N	10	0.11
(1,149)	1:A:899:VAL:O	1:A:921:SER:H	1	0.11
(1,141)	1:A:887:THR:O	1:A:891:ARG:H	1	0.11
(1,141)	1:A:887:THR:O	1:A:891:ARG:H	20	0.11
(1,135)	1:A:884:TYR:O	1:A:888:GLN:H	7	0.11
(1,121)	1:A:862:ASN:O	1:A:866:LYS:H	1	0.11
(1,12)	1:A:711:LEU:N	1:A:734:THR:O	5	0.11
(1,12)	1:A:711:LEU:N	1:A:734:THR:O	17	0.11
(1,114)	1:A:858:VAL:O	1:A:862:ASN:N	2	0.11
(1,112)	1:A:843:GLN:O	1:A:847:LEU:N	7	0.11
(1,111)	1:A:843:GLN:O	1:A:847:LEU:H	16	0.11
(1,100)	1:A:837:ARG:O	1:A:841:ALA:N	7	0.11

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

Dihedral angle analysis failed due to data error in the dihedral angle restraints, possibly missing target value