



Full wwPDB NMR Structure Validation Report ⓘ

Jun 4, 2023 – 01:53 PM EDT

PDB ID : 2LE0
BMRB ID : 17687
Title : PARP BRCT Domain
Authors : Mueller, G.; Loeffler, P.; Cuneo, M.; Derose, E.; London, R.
Deposited on : 2011-06-03

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

We welcome your comments at validation@mail.wwpdb.org
A user guide is available at
<https://www.wwpdb.org/validation/2017/NMRValidationReportHelp>
with specific help available everywhere you see the ⓘ symbol.

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

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

MolProbity : 4.02b-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

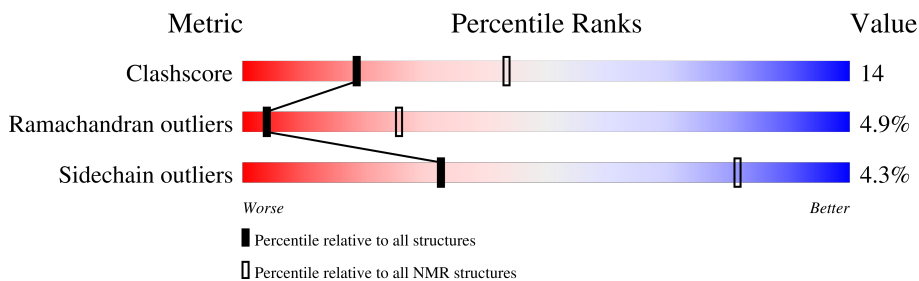
1 Overall quality at a glance

The following experimental techniques were used to determine the structure:

SOLUTION NMR

The overall completeness of chemical shifts assignment is 82%.

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 $\leq 5\%$

Mol	Chain	Length	Quality of chain
1	A	106	

2 Ensemble composition and analysis

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

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

Well-defined (core) protein residues			
Well-defined core	Residue range (total)	Backbone RMSD (Å)	Medoid model
1	A:2-A:97 (96)	0.73	2

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

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

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

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

3 Entry composition

There is only 1 type of molecule in this entry. The entry contains 1665 atoms, of which 853 are hydrogens and 0 are deuteriums.

- Molecule 1 is a protein called Poly [ADP-ribose] polymerase 1.

Mol	Chain	Residues	Atoms						Trace
			Total	C	H	N	O	S	
1	A	106	1665	504	853	147	154	7	0

There are 7 discrepancies between the modelled and reference sequences:

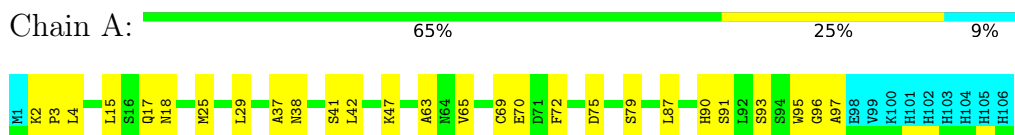
Chain	Residue	Modelled	Actual	Comment	Reference
A	1	MET	-	initiating methionine	UNP P27008
A	101	HIS	-	expression tag	UNP P27008
A	102	HIS	-	expression tag	UNP P27008
A	103	HIS	-	expression tag	UNP P27008
A	104	HIS	-	expression tag	UNP P27008
A	105	HIS	-	expression tag	UNP P27008
A	106	HIS	-	expression tag	UNP P27008

4 Residue-property plots

4.1 Average score per residue in the NMR ensemble

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

- Molecule 1: Poly [ADP-ribose] polymerase 1

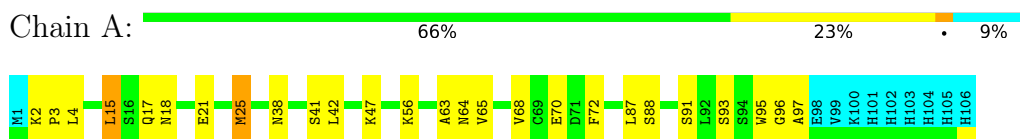


4.2 Scores per residue for each member of the ensemble

Colouring as in section 4.1 above.

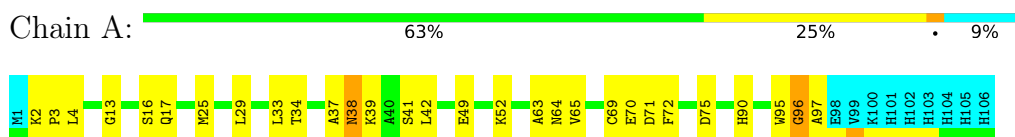
4.2.1 Score per residue for model 1

- Molecule 1: Poly [ADP-ribose] polymerase 1



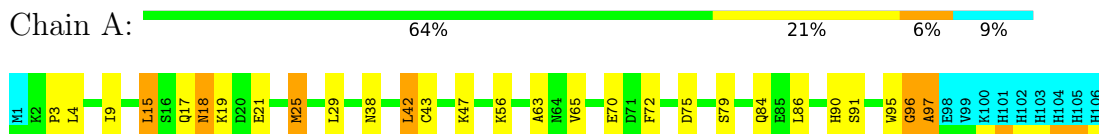
4.2.2 Score per residue for model 2 (medoid)

- Molecule 1: Poly [ADP-ribose] polymerase 1



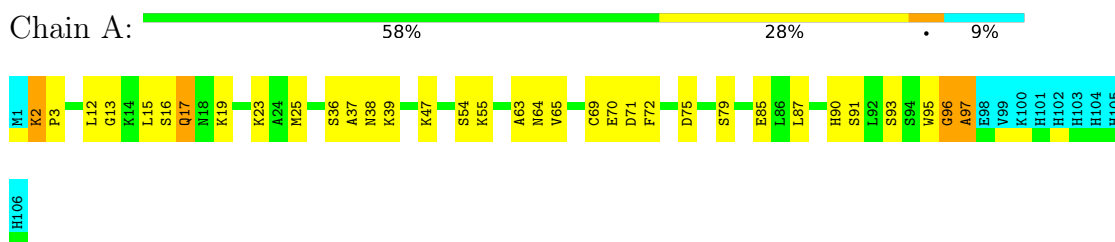
4.2.3 Score per residue for model 3

- Molecule 1: Poly [ADP-ribose] polymerase 1



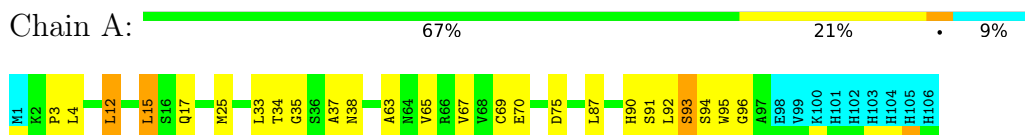
4.2.4 Score per residue for model 4

- Molecule 1: Poly [ADP-ribose] polymerase 1



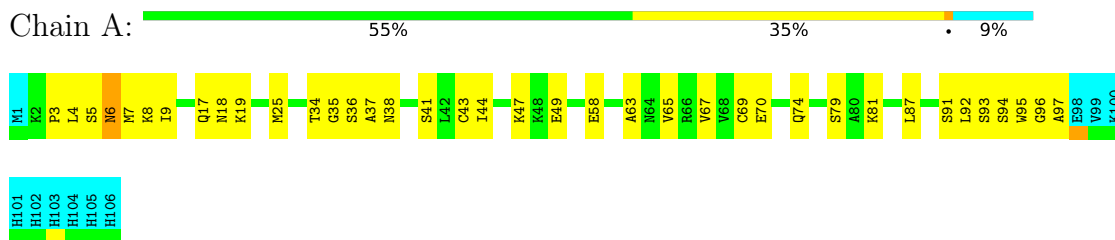
4.2.5 Score per residue for model 5

- Molecule 1: Poly [ADP-ribose] polymerase 1



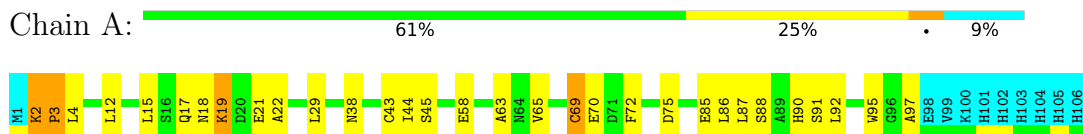
4.2.6 Score per residue for model 6

- Molecule 1: Poly [ADP-ribose] polymerase 1



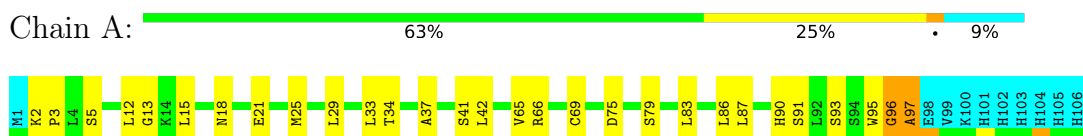
4.2.7 Score per residue for model 7

- Molecule 1: Poly [ADP-ribose] polymerase 1



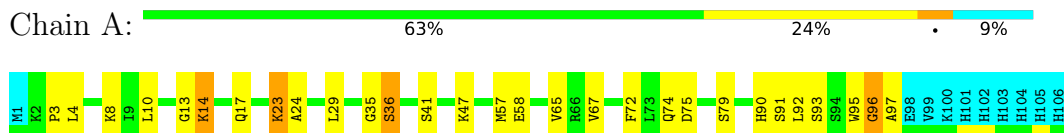
4.2.8 Score per residue for model 8

- Molecule 1: Poly [ADP-ribose] polymerase 1



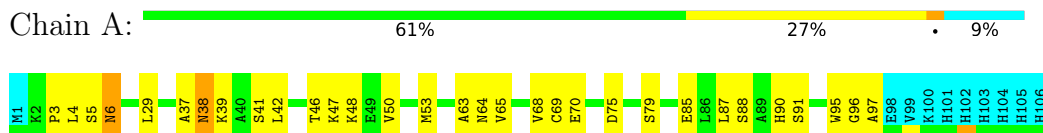
4.2.9 Score per residue for model 9

- Molecule 1: Poly [ADP-ribose] polymerase 1



4.2.10 Score per residue for model 10

- Molecule 1: Poly [ADP-ribose] polymerase 1



5 Refinement protocol and experimental data overview

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

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

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

Software name	Classification	Version
X-PLOR NIH	refinement	
CYANA	structure solution	
CNSSOLVE	structure solution	
CYANA	refinement	

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

Chemical shift file(s)	working_cs.cif
Number of chemical shift lists	1
Total number of shifts	1095
Number of shifts mapped to atoms	1095
Number of unparsed shifts	0
Number of shifts with mapping errors	0
Number of shifts with mapping warnings	0
Assignment completeness (well-defined parts)	82%

6 Model quality i

6.1 Standard geometry i

There are no covalent bond-length or bond-angle outliers.

There are no bond-length outliers.

There are no bond-angle outliers.

There are no chirality outliers.

There are no planarity outliers.

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	718	766	765	21±3
All	All	7180	7660	7650	213

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 14.

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

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:4:LEU:HD12	1:A:29:LEU:HD12	0.83	1.50	3	5
1:A:50:VAL:O	1:A:53:MET:SD	0.72	2.47	10	1
1:A:15:LEU:H	1:A:15:LEU:HD23	0.66	1.48	1	3
1:A:87:LEU:C	1:A:87:LEU:HD12	0.64	2.13	1	2
1:A:17:GLN:NE2	1:A:74:GLN:NE2	0.63	2.45	9	2
1:A:69:CYS:SG	1:A:70:GLU:N	0.62	2.73	4	4
1:A:87:LEU:HD12	1:A:87:LEU:C	0.62	2.15	6	1
1:A:65:VAL:O	1:A:95:TRP:NE1	0.61	2.32	5	10
1:A:91:SER:O	1:A:93:SER:N	0.61	2.33	9	2
1:A:96:GLY:O	1:A:97:ALA:HB3	0.60	1.97	9	5
1:A:15:LEU:H	1:A:15:LEU:CD2	0.59	2.11	1	1
1:A:85:GLU:OE1	1:A:85:GLU:N	0.58	2.36	4	1
1:A:75:ASP:OD2	1:A:90:HIS:NE2	0.57	2.38	7	7
1:A:93:SER:OG	1:A:95:TRP:CD2	0.56	2.58	4	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:38:ASN:ND2	1:A:63:ALA:O	0.56	2.39	5	8
1:A:70:GLU:O	1:A:74:GLN:NE2	0.55	2.39	6	1
1:A:12:LEU:HD23	1:A:12:LEU:O	0.55	2.01	8	1
1:A:41:SER:C	1:A:42:LEU:HD12	0.54	2.23	10	4
1:A:15:LEU:HD23	1:A:15:LEU:N	0.54	2.18	1	3
1:A:2:LYS:N	1:A:3:PRO:CD	0.54	2.71	1	3
1:A:91:SER:C	1:A:93:SER:H	0.53	2.06	5	3
1:A:42:LEU:HD23	1:A:68:VAL:HG11	0.53	1.80	10	2
1:A:96:GLY:O	1:A:97:ALA:CB	0.53	2.57	3	3
1:A:15:LEU:CD2	1:A:15:LEU:N	0.53	2.71	1	2
1:A:67:VAL:O	1:A:91:SER:O	0.53	2.26	9	3
1:A:12:LEU:O	1:A:12:LEU:HD13	0.53	2.03	5	1
1:A:70:GLU:H	1:A:70:GLU:CD	0.52	2.08	1	1
1:A:12:LEU:CD1	1:A:43:CYS:SG	0.52	2.98	7	1
1:A:91:SER:C	1:A:93:SER:N	0.52	2.62	6	3
1:A:2:LYS:H	1:A:3:PRO:CD	0.52	2.18	7	1
1:A:4:LEU:HD22	1:A:9:ILE:HD11	0.51	1.82	3	1
1:A:33:LEU:O	1:A:34:THR:OG1	0.51	2.26	2	3
1:A:93:SER:OG	1:A:95:TRP:CE3	0.51	2.63	6	2
1:A:42:LEU:HD13	1:A:43:CYS:N	0.50	2.22	3	1
1:A:70:GLU:C	1:A:72:PHE:N	0.50	2.64	7	5
1:A:5:SER:O	1:A:6:ASN:CB	0.48	2.61	6	2
1:A:70:GLU:O	1:A:72:PHE:N	0.48	2.47	2	4
1:A:79:SER:OG	1:A:81:LYS:CD	0.48	2.62	6	1
1:A:86:LEU:O	1:A:90:HIS:CD2	0.48	2.67	3	3
1:A:17:GLN:N	1:A:70:GLU:OE2	0.48	2.47	5	1
1:A:43:CYS:SG	1:A:44:ILE:N	0.48	2.87	6	2
1:A:47:LYS:O	1:A:50:VAL:N	0.47	2.47	10	1
1:A:8:LYS:O	1:A:41:SER:OG	0.47	2.32	9	2
1:A:70:GLU:OE1	1:A:70:GLU:N	0.47	2.46	10	1
1:A:43:CYS:SG	1:A:65:VAL:HG11	0.47	2.49	3	1
1:A:75:ASP:O	1:A:79:SER:N	0.47	2.48	10	5
1:A:15:LEU:N	1:A:15:LEU:CD2	0.47	2.77	5	1
1:A:15:LEU:HD11	1:A:70:GLU:OE2	0.47	2.09	7	1
1:A:87:LEU:O	1:A:91:SER:CB	0.47	2.63	4	3
1:A:46:THR:CG2	1:A:70:GLU:OE1	0.47	2.63	10	1
1:A:37:ALA:C	1:A:39:LYS:H	0.47	2.13	10	3
1:A:87:LEU:C	1:A:87:LEU:CD1	0.46	2.84	1	3
1:A:25:MET:SD	1:A:25:MET:C	0.46	2.94	2	3
1:A:18:ASN:ND2	1:A:21:GLU:OE2	0.46	2.48	7	2
1:A:95:TRP:CD1	1:A:95:TRP:C	0.46	2.88	4	6

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:87:LEU:O	1:A:91:SER:OG	0.46	2.30	5	2
1:A:4:LEU:CD2	1:A:4:LEU:N	0.46	2.78	1	1
1:A:17:GLN:CG	1:A:70:GLU:OE2	0.46	2.63	3	1
1:A:72:PHE:CD1	1:A:72:PHE:C	0.46	2.90	2	1
1:A:92:LEU:O	1:A:93:SER:O	0.45	2.34	5	1
1:A:13:GLY:O	1:A:14:LYS:O	0.45	2.34	9	1
1:A:18:ASN:HD22	1:A:21:GLU:CD	0.45	2.15	3	3
1:A:25:MET:SD	1:A:25:MET:O	0.45	2.75	8	3
1:A:34:THR:CG2	1:A:35:GLY:N	0.45	2.80	5	1
1:A:17:GLN:NE2	1:A:70:GLU:OE2	0.45	2.50	3	1
1:A:85:GLU:O	1:A:88:SER:OG	0.45	2.29	10	2
1:A:18:ASN:HD21	1:A:21:GLU:CD	0.45	2.14	8	1
1:A:95:TRP:C	1:A:95:TRP:CD1	0.44	2.90	7	1
1:A:64:ASN:OD1	1:A:97:ALA:N	0.44	2.50	10	2
1:A:5:SER:O	1:A:6:ASN:ND2	0.44	2.50	10	1
1:A:91:SER:OG	1:A:93:SER:O	0.44	2.36	1	2
1:A:66:ARG:NH1	1:A:87:LEU:HD22	0.44	2.28	8	1
1:A:34:THR:OG1	1:A:35:GLY:N	0.44	2.51	6	1
1:A:47:LYS:C	1:A:49:GLU:N	0.44	2.71	6	1
1:A:49:GLU:O	1:A:52:LYS:CG	0.43	2.66	2	1
1:A:17:GLN:NE2	1:A:70:GLU:CG	0.43	2.81	3	1
1:A:42:LEU:C	1:A:42:LEU:CD1	0.43	2.87	3	1
1:A:17:GLN:NE2	1:A:70:GLU:CD	0.43	2.71	2	1
1:A:4:LEU:HD12	1:A:29:LEU:CD1	0.43	2.34	10	2
1:A:4:LEU:HD22	1:A:4:LEU:N	0.43	2.27	6	1
1:A:16:SER:O	1:A:17:GLN:O	0.43	2.37	4	1
1:A:4:LEU:HD12	1:A:9:ILE:HD11	0.43	1.90	6	1
1:A:5:SER:OG	1:A:29:LEU:O	0.43	2.37	8	1
1:A:4:LEU:N	1:A:4:LEU:HD22	0.43	2.29	1	1
1:A:93:SER:OG	1:A:94:SER:N	0.43	2.51	6	1
1:A:4:LEU:N	1:A:4:LEU:CD2	0.42	2.82	6	1
1:A:42:LEU:HD21	1:A:66:ARG:HH21	0.42	1.74	8	1
1:A:87:LEU:O	1:A:91:SER:N	0.42	2.52	10	1
1:A:4:LEU:CD1	1:A:29:LEU:HD12	0.42	2.35	3	1
1:A:23:LYS:NZ	1:A:23:LYS:CB	0.42	2.82	9	1
1:A:47:LYS:O	1:A:48:LYS:C	0.42	2.58	10	1
1:A:5:SER:O	1:A:6:ASN:OD1	0.42	2.38	6	1
1:A:17:GLN:CD	1:A:70:GLU:OE2	0.42	2.58	3	2
1:A:87:LEU:HD12	1:A:87:LEU:O	0.42	2.15	5	1
1:A:4:LEU:HD12	1:A:4:LEU:N	0.42	2.30	5	1
1:A:2:LYS:H	1:A:3:PRO:HD2	0.42	1.74	7	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:23:LYS:CG	1:A:24:ALA:N	0.42	2.83	9	1
1:A:35:GLY:O	1:A:36:SER:C	0.42	2.59	9	1
1:A:72:PHE:C	1:A:72:PHE:CD1	0.41	2.93	9	1
1:A:37:ALA:O	1:A:39:LYS:N	0.41	2.53	10	1
1:A:21:GLU:CG	1:A:22:ALA:N	0.41	2.84	7	1
1:A:87:LEU:HD12	1:A:88:SER:N	0.41	2.30	1	1
1:A:15:LEU:HD21	1:A:17:GLN:O	0.41	2.15	1	1
1:A:12:LEU:O	1:A:13:GLY:C	0.41	2.58	4	1
1:A:70:GLU:C	1:A:72:PHE:H	0.41	2.20	2	1
1:A:42:LEU:CD1	1:A:43:CYS:O	0.41	2.69	3	1
1:A:83:LEU:HD12	1:A:83:LEU:H	0.41	1.75	8	1
1:A:54:SER:OG	1:A:55:LYS:N	0.41	2.54	4	1
1:A:90:HIS:O	1:A:91:SER:C	0.41	2.60	4	1
1:A:4:LEU:HD13	1:A:7:MET:SD	0.41	2.56	6	1
1:A:66:ARG:HH12	1:A:87:LEU:HD22	0.40	1.75	8	1
1:A:84:GLN:N	1:A:84:GLN:CD	0.40	2.75	3	1
1:A:45:SER:O	1:A:92:LEU:CD1	0.40	2.70	7	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	96/106 (91%)	84±2 (87±2%)	7±2 (8±2%)	5±1 (5±1%)	4	26
All	All	960/1060 (91%)	839 (87%)	74 (8%)	47 (5%)	4	26

All 19 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	96	GLY	9
1	A	3	PRO	8
1	A	97	ALA	4
1	A	19	LYS	3
1	A	37	ALA	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	13	GLY	2
1	A	38	ASN	2
1	A	71	ASP	2
1	A	18	ASN	2
1	A	6	ASN	2
1	A	92	LEU	2
1	A	16	SER	1
1	A	91	SER	1
1	A	17	GLN	1
1	A	93	SER	1
1	A	94	SER	1
1	A	2	LYS	1
1	A	14	LYS	1
1	A	36	SER	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	81/91 (89%)	78±2 (96±2%)	4±2 (4±2%)	33	81
All	All	810/910 (89%)	775 (96%)	35 (4%)	33	81

All 15 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	15	LEU	5
1	A	25	MET	4
1	A	47	LYS	4
1	A	69	CYS	4
1	A	58	GLU	3
1	A	56	LYS	2
1	A	2	LYS	2
1	A	23	LYS	2
1	A	36	SER	2
1	A	19	LYS	2
1	A	42	LEU	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	64	ASN	1
1	A	12	LEU	1
1	A	10	LEU	1
1	A	57	MET	1

6.3.3 RNA [i](#)

There are no RNA molecules in this entry.

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

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

6.5 Carbohydrates [i](#)

There are no 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 82% for the well-defined parts and 77% 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	1095
Number of shifts mapped to atoms	1095
Number of unparsed shifts	0
Number of shifts with mapping errors	0
Number of shifts with mapping warnings	0
Number of shift outliers (ShiftChecker)	1

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
$^{13}\text{C}_\alpha$	98	-0.10 ± 0.08	None needed (< 0.5 ppm)
$^{13}\text{C}_\beta$	93	-0.02 ± 0.08	None needed (< 0.5 ppm)
$^{13}\text{C}'$	0	—	None (insufficient data)
^{15}N	90	0.27 ± 0.36	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 82%, i.e. 1041 atoms were assigned a chemical shift out of a possible 1268. 0 out of 18 assigned methyl groups (LEU and VAL) were assigned stereospecifically.

	Total	^1H	^{13}C	^{15}N
Backbone	352/483 (73%)	174/196 (89%)	93/192 (48%)	85/95 (89%)
Sidechain	671/755 (89%)	453/492 (92%)	211/238 (89%)	7/25 (28%)

Continued on next page...

Continued from previous page...

	Total	¹ H	¹³ C	¹⁵ N
Aromatic	18/30 (60%)	9/15 (60%)	8/12 (67%)	1/3 (33%)
Overall	1041/1268 (82%)	636/703 (90%)	312/442 (71%)	93/123 (76%)

The following table shows the completeness of the chemical shift assignments for the full structure. The overall completeness is 77%, i.e. 1095 atoms were assigned a chemical shift out of a possible 1424. 0 out of 19 assigned methyl groups (LEU and VAL) were assigned stereospecifically.

	Total	¹ H	¹³ C	¹⁵ N
Backbone	371/533 (70%)	183/216 (85%)	98/212 (46%)	90/105 (86%)
Sidechain	706/813 (87%)	477/530 (90%)	222/257 (86%)	7/26 (27%)
Aromatic	18/78 (23%)	9/39 (23%)	8/24 (33%)	1/15 (7%)
Overall	1095/1424 (77%)	669/785 (85%)	328/493 (67%)	98/146 (67%)

7.1.4 Statistically unusual chemical shifts [i](#)

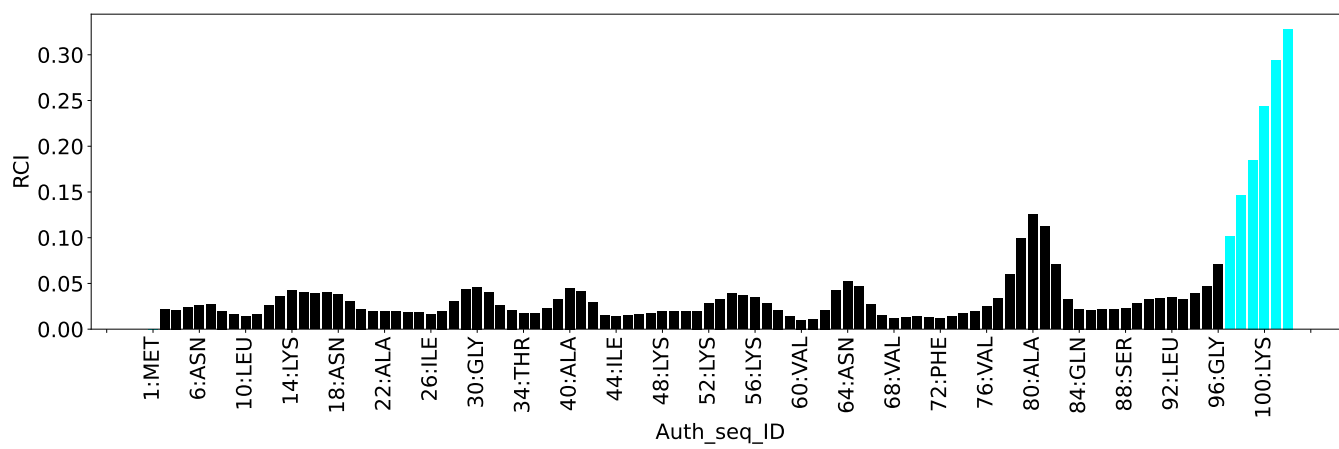
The following table lists the statistically unusual chemical shifts. These are statistical measures, and large deviations from the mean do not necessarily imply incorrect assignments. Molecules containing paramagnetic centres or hemes are expected to give rise to anomalous chemical shifts.

List Id	Chain	Res	Type	Atom	Shift, ppm	Expected range, ppm	Z-score
1	A	61	LYS	HB3	-0.15	0.46 – 3.04	-7.4

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

8.1 Conformationally restricting restraints

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

Description	Value
Total distance restraints	1631
Intra-residue ($ i-j =0$)	449
Sequential ($ i-j =1$)	447
Medium range ($ i-j >1$ and $ i-j <5$)	330
Long range ($ i-j \geq 5$)	405
Inter-chain	0
Hydrogen bond restraints	0
Disulfide bond restraints	0
Total dihedral-angle restraints	387
Number of unmapped restraints	0
Number of restraints per residue	19.0
Number of long range restraints per residue ¹	3.8

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

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

8.2.1 Average number of distance violations per model

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

Bins (Å)	Average number of violations per model	Max (Å)
0.1-0.2 (Small)	13.4	0.2
0.2-0.5 (Medium)	25.0	0.5
>0.5 (Large)	70.4	9.49

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

Dihedral-angle violations less than 1° are not included in the calculation.

Bins (°)	Average number of violations per model	Max (°)
1.0-10.0 (Small)	6.1	9.8
10.0-20.0 (Medium)	4.9	20.0
>20.0 (Large)	68.0	140.0

9 Distance violation analysis

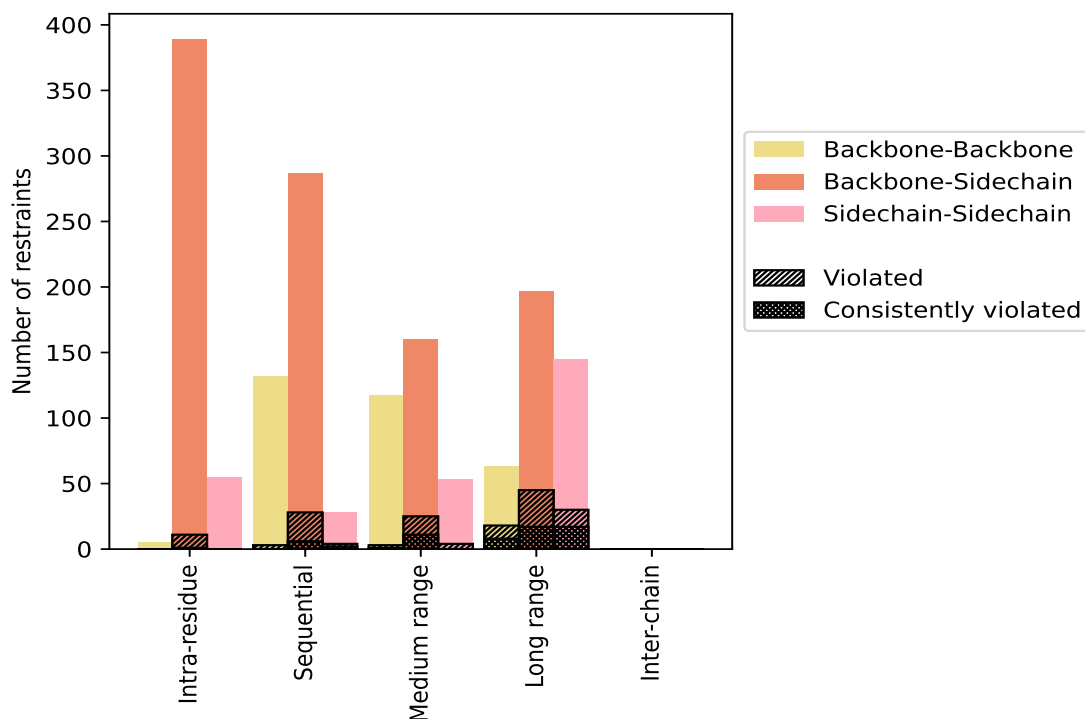
9.1 Summary of distance violations

The following table shows the summary of distance violations in different restraint categories based on the sequence separation of the atoms involved. Each category is further sub-divided into three sub-categories based on the atoms involved. Violations less than 0.1 Å are not included in the statistics.

Restrains type	Count	% ¹	Violated ³			Consistently Violated ⁴		
			Count	% ²	% ¹	Count	% ²	% ¹
Intra-residue ($i-j =0$)	449	27.5	11	2.4	0.7	1	0.2	0.1
Backbone-Backbone	5	0.3	0	0.0	0.0	0	0.0	0.0
Backbone-Sidechain	389	23.9	11	2.8	0.7	1	0.3	0.1
Sidechain-Sidechain	55	3.4	0	0.0	0.0	0	0.0	0.0
Sequential ($i-j =1$)	447	27.4	35	7.8	2.1	8	1.8	0.5
Backbone-Backbone	132	8.1	3	2.3	0.2	0	0.0	0.0
Backbone-Sidechain	287	17.6	28	9.8	1.7	6	2.1	0.4
Sidechain-Sidechain	28	1.7	4	14.3	0.2	2	7.1	0.1
Medium range ($i-j >1$ & $i-j <5$)	330	20.2	32	9.7	2.0	12	3.6	0.7
Backbone-Backbone	117	7.2	3	2.6	0.2	1	0.9	0.1
Backbone-Sidechain	160	9.8	25	15.6	1.5	11	6.9	0.7
Sidechain-Sidechain	53	3.2	4	7.5	0.2	0	0.0	0.0
Long range ($i-j \geq 5$)	405	24.8	93	23.0	5.7	42	10.4	2.6
Backbone-Backbone	63	3.9	18	28.6	1.1	8	12.7	0.5
Backbone-Sidechain	197	12.1	45	22.8	2.8	17	8.6	1.0
Sidechain-Sidechain	145	8.9	30	20.7	1.8	17	11.7	1.0
Inter-chain	0	0.0	0	0.0	0.0	0	0.0	0.0
Backbone-Backbone	0	0.0	0	0.0	0.0	0	0.0	0.0
Backbone-Sidechain	0	0.0	0	0.0	0.0	0	0.0	0.0
Sidechain-Sidechain	0	0.0	0	0.0	0.0	0	0.0	0.0
Hydrogen bond	0	0.0	0	0.0	0.0	0	0.0	0.0
Disulfide bond	0	0.0	0	0.0	0.0	0	0.0	0.0
Total	1631	100.0	171	10.5	10.5	63	3.9	3.9
Backbone-Backbone	317	19.4	24	7.6	1.5	9	2.8	0.6
Backbone-Sidechain	1033	63.3	109	10.6	6.7	35	3.4	2.1
Sidechain-Sidechain	281	17.2	38	13.5	2.3	19	6.8	1.2

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

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



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

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

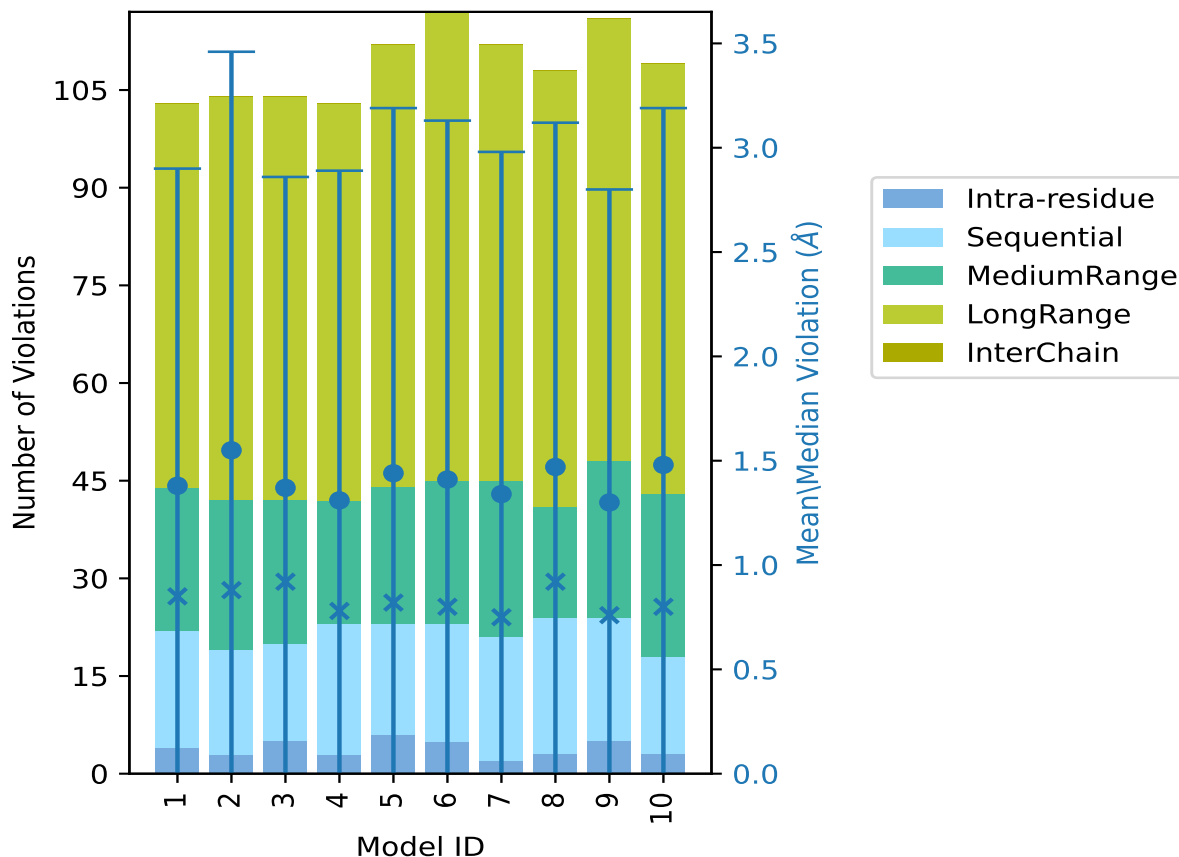
The following table provides the distance violation statistics for each model in the ensemble. Violations less than 0.1 Å are not included in the statistics.

Model ID	Number of violations						Mean (Å)	Max (Å)	SD ⁶ (Å)	Median (Å)
	IR ¹	SQ ²	MR ³	LR ⁴	IC ⁵	Total				
1	4	18	22	59	0	103	1.38	8.4	1.52	0.85
2	3	16	23	62	0	104	1.55	9.49	1.91	0.88
3	5	15	22	62	0	104	1.37	7.25	1.49	0.92
4	3	20	19	61	0	103	1.31	8.74	1.58	0.78
5	6	17	21	68	0	112	1.44	8.98	1.75	0.82
6	5	18	22	72	0	117	1.41	9.21	1.72	0.8
7	2	19	24	67	0	112	1.34	8.64	1.64	0.75
8	3	21	17	67	0	108	1.47	9.01	1.65	0.92
9	5	19	24	68	0	116	1.3	7.81	1.5	0.76
10	3	15	25	66	0	109	1.48	8.5	1.71	0.8

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, 1460(IR:438, SQ:412, MR:298, LR:312, IC:0) restraints are not violated in the ensemble.

Number of violated restraints						Fraction of the ensemble	
IR ¹	SQ ²	MR ³	LR ⁴	IC ⁵	Total	Count ⁶	%
4	6	4	12	0	26	1	10.0
0	5	2	5	0	12	2	20.0
4	5	0	9	0	18	3	30.0
1	2	2	1	0	6	4	40.0

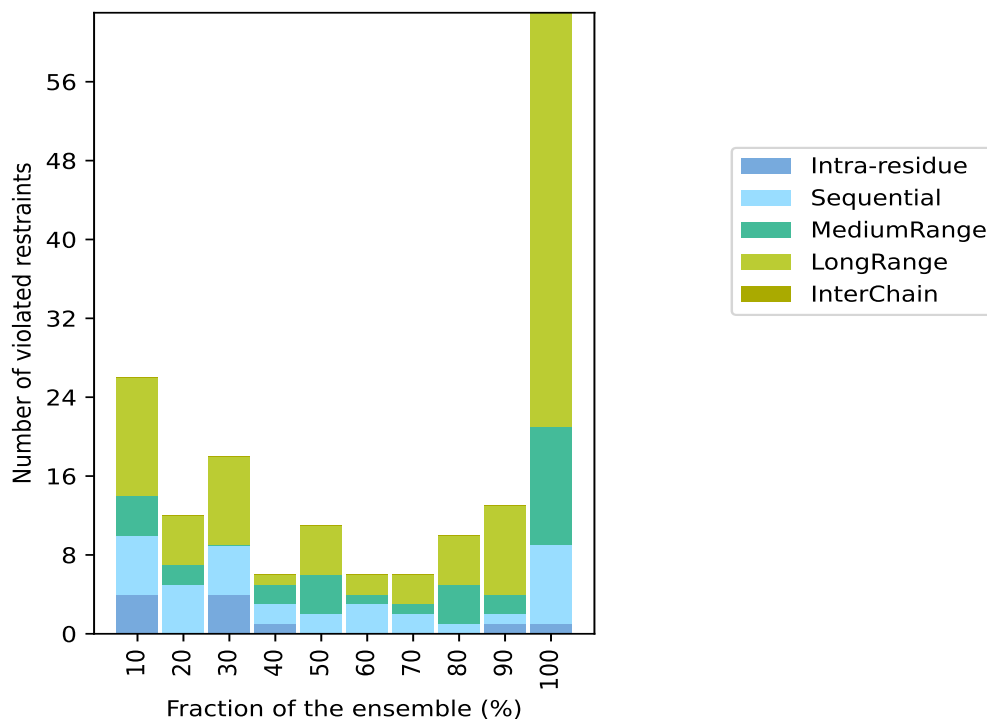
Continued on next page...

Continued from previous page...

Number of violated restraints						Fraction of the ensemble	
IR ¹	SQ ²	MR ³	LR ⁴	IC ⁵	Total	Count ⁶	%
0	2	4	5	0	11	5	50.0
0	3	1	2	0	6	6	60.0
0	2	1	3	0	6	7	70.0
0	1	4	5	0	10	8	80.0
1	1	2	9	0	13	9	90.0
1	8	12	42	0	63	10	100.0

¹Intra-residue restraints, ²Sequential restraints, ³Medium range restraints, ⁴Long range restraints, ⁵Inter-chain restraints, ⁶ Number of models with violations

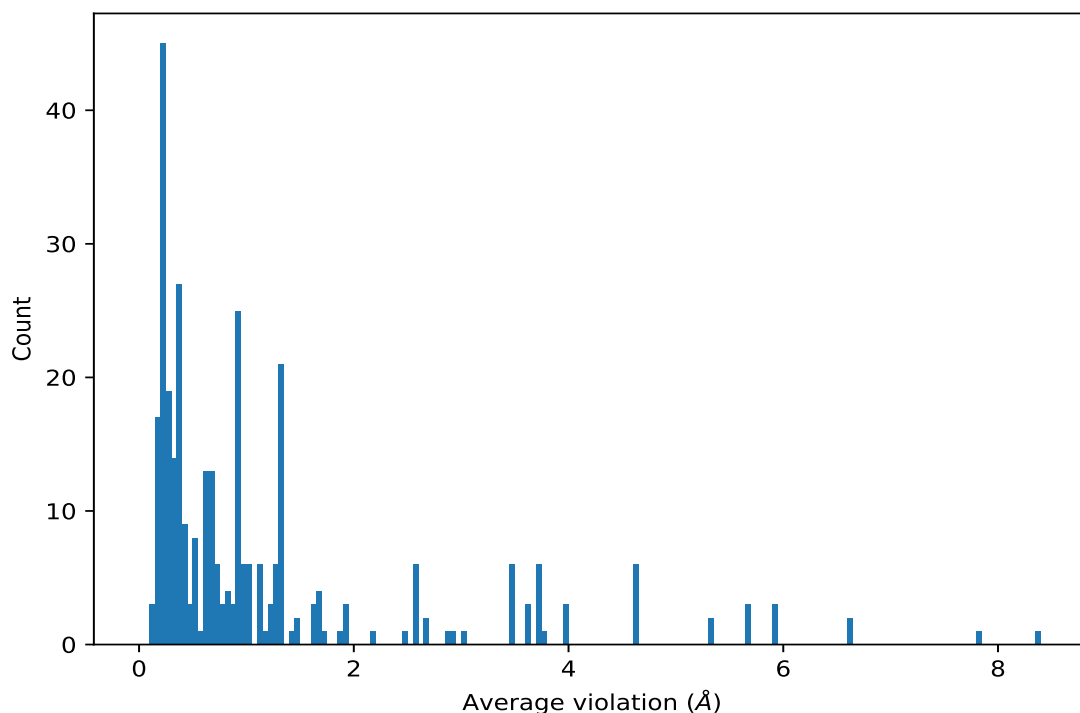
9.3.1 Bar graph : Distance violation statistics for the ensemble [i](#)



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

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

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



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

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

Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)	Median (Å)
(1,1211)	1:A:5:SER:H	1:A:84:GLN:HE22	10	8.36	0.95	8.62
(1,1212)	1:A:5:SER:H	1:A:84:GLN:HE21	10	7.84	0.51	7.82
(1,1321)	1:A:5:SER:H	1:A:84:GLN:HE21	10	6.61	0.56	6.63
(1,1321)	1:A:5:SER:H	1:A:84:GLN:HE22	10	6.61	0.56	6.63
(1,1232)	1:A:4:LEU:HD11	1:A:84:GLN:HE22	10	5.93	0.88	6.0
(1,1232)	1:A:4:LEU:HD12	1:A:84:GLN:HE22	10	5.93	0.88	6.0
(1,1232)	1:A:4:LEU:HD13	1:A:84:GLN:HE22	10	5.93	0.88	6.0
(1,1235)	1:A:4:LEU:HD11	1:A:84:GLN:HE21	10	5.68	1.04	5.68
(1,1235)	1:A:4:LEU:HD12	1:A:84:GLN:HE21	10	5.68	1.04	5.68
(1,1235)	1:A:4:LEU:HD13	1:A:84:GLN:HE21	10	5.68	1.04	5.68
(1,1317)	1:A:4:LEU:H	1:A:84:GLN:HE21	10	5.3	0.54	5.3
(1,1317)	1:A:4:LEU:H	1:A:84:GLN:HE22	10	5.3	0.54	5.3
(1,1318)	1:A:4:LEU:HD11	1:A:84:GLN:HE21	10	4.61	0.84	4.69
(1,1318)	1:A:4:LEU:HD11	1:A:84:GLN:HE22	10	4.61	0.84	4.69
(1,1318)	1:A:4:LEU:HD12	1:A:84:GLN:HE21	10	4.61	0.84	4.69
(1,1318)	1:A:4:LEU:HD12	1:A:84:GLN:HE22	10	4.61	0.84	4.69

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)	Median (Å)
(1,1318)	1:A:4:LEU:HD13	1:A:84:GLN:HE21	10	4.61	0.84	4.69
(1,1318)	1:A:4:LEU:HD13	1:A:84:GLN:HE22	10	4.61	0.84	4.69
(1,1229)	1:A:4:LEU:HD21	1:A:84:GLN:HE22	10	3.98	1.07	3.92
(1,1229)	1:A:4:LEU:HD22	1:A:84:GLN:HE22	10	3.98	1.07	3.92
(1,1229)	1:A:4:LEU:HD23	1:A:84:GLN:HE22	10	3.98	1.07	3.92
(1,170)	1:A:89:ALA:H	1:A:92:LEU:HB2	10	3.77	0.61	4.11
(1,1319)	1:A:4:LEU:HD21	1:A:84:GLN:HE21	10	3.72	0.86	3.5
(1,1319)	1:A:4:LEU:HD21	1:A:84:GLN:HE22	10	3.72	0.86	3.5
(1,1319)	1:A:4:LEU:HD22	1:A:84:GLN:HE21	10	3.72	0.86	3.5
(1,1319)	1:A:4:LEU:HD22	1:A:84:GLN:HE22	10	3.72	0.86	3.5
(1,1319)	1:A:4:LEU:HD23	1:A:84:GLN:HE21	10	3.72	0.86	3.5
(1,1319)	1:A:4:LEU:HD23	1:A:84:GLN:HE22	10	3.72	0.86	3.5
(1,1234)	1:A:4:LEU:HD21	1:A:84:GLN:HE21	10	3.64	0.91	3.4
(1,1234)	1:A:4:LEU:HD22	1:A:84:GLN:HE21	10	3.64	0.91	3.4
(1,1234)	1:A:4:LEU:HD23	1:A:84:GLN:HE21	10	3.64	0.91	3.4
(1,315)	1:A:7:MET:HE1	1:A:84:GLN:HE21	10	3.48	0.68	3.38
(1,315)	1:A:7:MET:HE2	1:A:84:GLN:HE21	10	3.48	0.68	3.38
(1,315)	1:A:7:MET:HE3	1:A:84:GLN:HE21	10	3.48	0.68	3.38
(1,309)	1:A:7:MET:HE1	1:A:84:GLN:HE22	10	3.48	0.78	3.33
(1,309)	1:A:7:MET:HE2	1:A:84:GLN:HE22	10	3.48	0.78	3.33
(1,309)	1:A:7:MET:HE3	1:A:84:GLN:HE22	10	3.48	0.78	3.33
(1,1085)	1:A:6:ASN:HA	1:A:32:LYS:H	10	3.0	0.21	3.02
(1,284)	1:A:72:PHE:HB2	1:A:87:LEU:HB2	10	2.93	0.77	2.66
(1,902)	1:A:72:PHE:HB3	1:A:87:LEU:H	10	2.85	0.24	2.96
(1,1413)	1:A:23:LYS:HE2	1:A:27:GLU:H	10	2.68	0.46	2.79
(1,1413)	1:A:23:LYS:HE3	1:A:27:GLU:H	10	2.68	0.46	2.79
(1,1327)	1:A:7:MET:HE1	1:A:84:GLN:HE21	10	2.55	0.64	2.42
(1,1327)	1:A:7:MET:HE1	1:A:84:GLN:HE22	10	2.55	0.64	2.42
(1,1327)	1:A:7:MET:HE2	1:A:84:GLN:HE21	10	2.55	0.64	2.42
(1,1327)	1:A:7:MET:HE2	1:A:84:GLN:HE22	10	2.55	0.64	2.42
(1,1327)	1:A:7:MET:HE3	1:A:84:GLN:HE21	10	2.55	0.64	2.42
(1,1327)	1:A:7:MET:HE3	1:A:84:GLN:HE22	10	2.55	0.64	2.42
(1,331)	1:A:72:PHE:HB3	1:A:87:LEU:HA	10	2.45	0.31	2.46
(1,285)	1:A:72:PHE:HB2	1:A:87:LEU:HB3	10	2.19	0.59	1.94
(1,282)	1:A:72:PHE:HB2	1:A:86:LEU:HB2	10	1.92	0.21	1.91
(1,739)	1:A:16:SER:H	1:A:45:SER:H	10	1.89	0.54	1.9
(1,901)	1:A:72:PHE:HB2	1:A:87:LEU:H	10	1.7	0.24	1.69
(1,369)	1:A:76:VAL:HA	1:A:83:LEU:HA	10	1.68	0.27	1.67
(1,1543)	1:A:72:PHE:HB2	1:A:87:LEU:HB2	10	1.68	0.58	1.44
(1,1543)	1:A:72:PHE:HB2	1:A:87:LEU:HB3	10	1.68	0.58	1.44
(1,1222)	1:A:5:SER:H	1:A:7:MET:HB3	10	1.66	0.19	1.63
(1,155)	1:A:68:VAL:H	1:A:92:LEU:HD21	10	1.63	0.32	1.68

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)	Median (Å)
(1,155)	1:A:68:VAL:H	1:A:92:LEU:HD22	10	1.63	0.32	1.68
(1,155)	1:A:68:VAL:H	1:A:92:LEU:HD23	10	1.63	0.32	1.68
(1,1111)	1:A:7:MET:HB3	1:A:32:LYS:H	10	1.47	0.18	1.52
(1,773)	1:A:15:LEU:HA	1:A:45:SER:H	10	1.45	0.52	1.34
(1,1177)	1:A:52:LYS:HE2	1:A:54:SER:H	10	1.44	0.38	1.52
(1,1178)	1:A:52:LYS:HE3	1:A:54:SER:H	10	1.34	0.26	1.33
(1,118)	1:A:57:MET:HE1	1:A:92:LEU:HD11	10	1.33	0.25	1.31
(1,118)	1:A:57:MET:HE1	1:A:92:LEU:HD12	10	1.33	0.25	1.31
(1,118)	1:A:57:MET:HE1	1:A:92:LEU:HD13	10	1.33	0.25	1.31
(1,118)	1:A:57:MET:HE2	1:A:92:LEU:HD11	10	1.33	0.25	1.31
(1,118)	1:A:57:MET:HE2	1:A:92:LEU:HD12	10	1.33	0.25	1.31
(1,118)	1:A:57:MET:HE2	1:A:92:LEU:HD13	10	1.33	0.25	1.31
(1,118)	1:A:57:MET:HE3	1:A:92:LEU:HD11	10	1.33	0.25	1.31
(1,118)	1:A:57:MET:HE3	1:A:92:LEU:HD12	10	1.33	0.25	1.31
(1,118)	1:A:57:MET:HE3	1:A:92:LEU:HD13	10	1.33	0.25	1.31
(1,119)	1:A:57:MET:HE1	1:A:92:LEU:HD11	10	1.33	0.25	1.31
(1,119)	1:A:57:MET:HE1	1:A:92:LEU:HD12	10	1.33	0.25	1.31
(1,119)	1:A:57:MET:HE1	1:A:92:LEU:HD13	10	1.33	0.25	1.31
(1,119)	1:A:57:MET:HE2	1:A:92:LEU:HD11	10	1.33	0.25	1.31
(1,119)	1:A:57:MET:HE2	1:A:92:LEU:HD12	10	1.33	0.25	1.31
(1,119)	1:A:57:MET:HE2	1:A:92:LEU:HD13	10	1.33	0.25	1.31
(1,119)	1:A:57:MET:HE3	1:A:92:LEU:HD11	10	1.33	0.25	1.31
(1,119)	1:A:57:MET:HE3	1:A:92:LEU:HD12	10	1.33	0.25	1.31
(1,119)	1:A:57:MET:HE3	1:A:92:LEU:HD13	10	1.33	0.25	1.31
(1,1134)	1:A:91:SER:H	1:A:92:LEU:HB2	10	1.28	0.48	1.52
(1,1223)	1:A:5:SER:H	1:A:7:MET:HE1	10	1.27	0.2	1.31
(1,1223)	1:A:5:SER:H	1:A:7:MET:HE2	10	1.27	0.2	1.31
(1,1223)	1:A:5:SER:H	1:A:7:MET:HE3	10	1.27	0.2	1.31
(1,1109)	1:A:7:MET:HG2	1:A:32:LYS:H	10	1.25	0.3	1.28
(1,1300)	1:A:28:LYS:HG3	1:A:30:GLY:H	10	1.24	0.09	1.27
(1,1108)	1:A:49:GLU:HB3	1:A:54:SER:H	10	1.22	0.33	1.19
(1,227)	1:A:4:LEU:HB3	1:A:30:GLY:HA2	10	1.19	0.24	1.23
(1,614)	1:A:67:VAL:H	1:A:96:GLY:H	10	1.14	0.18	1.13
(1,1259)	1:A:38:ASN:HD22	1:A:96:GLY:H	10	1.11	0.28	1.18
(1,1069)	1:A:5:SER:H	1:A:32:LYS:H	10	1.04	0.27	1.08
(1,1125)	1:A:83:LEU:HG	1:A:84:GLN:H	10	1.01	0.39	0.96
(1,82)	1:A:28:LYS:HG3	1:A:29:LEU:HG	10	1.0	0.23	1.06
(1,408)	1:A:72:PHE:HA	1:A:87:LEU:HA	10	0.98	0.21	0.98
(1,802)	1:A:53:MET:HE1	1:A:58:GLU:H	10	0.96	0.14	0.94
(1,802)	1:A:53:MET:HE2	1:A:58:GLU:H	10	0.96	0.14	0.94
(1,802)	1:A:53:MET:HE3	1:A:58:GLU:H	10	0.96	0.14	0.94
(1,480)	1:A:49:GLU:HB2	1:A:57:MET:HG3	10	0.93	0.17	1.01

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)	Median (Å)
(1,1607)	1:A:91:SER:HB2	1:A:92:LEU:HD11	10	0.91	0.2	1.01
(1,1607)	1:A:91:SER:HB2	1:A:92:LEU:HD12	10	0.91	0.2	1.01
(1,1607)	1:A:91:SER:HB2	1:A:92:LEU:HD13	10	0.91	0.2	1.01
(1,1607)	1:A:91:SER:HB3	1:A:92:LEU:HD11	10	0.91	0.2	1.01
(1,1607)	1:A:91:SER:HB3	1:A:92:LEU:HD12	10	0.91	0.2	1.01
(1,1607)	1:A:91:SER:HB3	1:A:92:LEU:HD13	10	0.91	0.2	1.01
(1,108)	1:A:9:ILE:HA	1:A:10:LEU:HD11	10	0.76	0.07	0.79
(1,108)	1:A:9:ILE:HA	1:A:10:LEU:HD12	10	0.76	0.07	0.79
(1,108)	1:A:9:ILE:HA	1:A:10:LEU:HD13	10	0.76	0.07	0.79
(1,600)	1:A:65:VAL:HG21	1:A:66:ARG:H	10	0.69	0.06	0.68
(1,600)	1:A:65:VAL:HG22	1:A:66:ARG:H	10	0.69	0.06	0.68
(1,600)	1:A:65:VAL:HG23	1:A:66:ARG:H	10	0.69	0.06	0.68
(1,43)	1:A:63:ALA:HA	1:A:65:VAL:HG11	10	0.68	0.07	0.69
(1,43)	1:A:63:ALA:HA	1:A:65:VAL:HG12	10	0.68	0.07	0.69
(1,43)	1:A:63:ALA:HA	1:A:65:VAL:HG13	10	0.68	0.07	0.69
(1,44)	1:A:63:ALA:HA	1:A:65:VAL:HG11	10	0.68	0.07	0.69
(1,44)	1:A:63:ALA:HA	1:A:65:VAL:HG12	10	0.68	0.07	0.69
(1,44)	1:A:63:ALA:HA	1:A:65:VAL:HG13	10	0.68	0.07	0.69
(1,224)	1:A:4:LEU:HB2	1:A:30:GLY:HA2	10	0.66	0.09	0.67
(1,582)	1:A:10:LEU:H	1:A:42:LEU:HD21	10	0.65	0.22	0.6
(1,582)	1:A:10:LEU:H	1:A:42:LEU:HD22	10	0.65	0.22	0.6
(1,582)	1:A:10:LEU:H	1:A:42:LEU:HD23	10	0.65	0.22	0.6
(1,1093)	1:A:90:HIS:HB3	1:A:91:SER:H	10	0.64	0.28	0.59
(1,1264)	1:A:94:SER:HA	1:A:96:GLY:H	10	0.61	0.18	0.56
(1,665)	1:A:65:VAL:HG11	1:A:97:ALA:H	10	0.52	0.19	0.48
(1,665)	1:A:65:VAL:HG12	1:A:97:ALA:H	10	0.52	0.19	0.48
(1,665)	1:A:65:VAL:HG13	1:A:97:ALA:H	10	0.52	0.19	0.48
(1,281)	1:A:72:PHE:HB2	1:A:86:LEU:HB3	10	0.5	0.15	0.5
(1,648)	1:A:65:VAL:HB	1:A:67:VAL:H	10	0.43	0.12	0.42
(1,943)	1:A:75:ASP:H	1:A:76:VAL:HB	10	0.42	0.03	0.42
(1,320)	1:A:53:MET:HE1	1:A:57:MET:HA	10	0.38	0.05	0.38
(1,320)	1:A:53:MET:HE2	1:A:57:MET:HA	10	0.38	0.05	0.38
(1,320)	1:A:53:MET:HE3	1:A:57:MET:HA	10	0.38	0.05	0.38
(1,607)	1:A:66:ARG:H	1:A:97:ALA:H	10	0.36	0.11	0.36
(1,935)	1:A:76:VAL:H	1:A:76:VAL:HB	10	0.33	0.0	0.33
(1,1414)	1:A:23:LYS:HE2	1:A:27:GLU:HG3	9	1.91	0.29	1.91
(1,1414)	1:A:23:LYS:HE3	1:A:27:GLU:HG3	9	1.91	0.29	1.91
(1,765)	1:A:38:ASN:HD22	1:A:98:GLU:H	9	1.26	0.61	1.18
(1,865)	1:A:18:ASN:HD22	1:A:20:ASP:H	9	0.86	0.15	0.91
(1,769)	1:A:15:LEU:HA	1:A:70:GLU:H	9	0.82	0.28	0.73
(1,156)	1:A:68:VAL:H	1:A:92:LEU:HD21	9	0.7	0.26	0.71
(1,156)	1:A:68:VAL:H	1:A:92:LEU:HD22	9	0.7	0.26	0.71

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)	Median (Å)
(1,156)	1:A:68:VAL:H	1:A:92:LEU:HD23	9	0.7	0.26	0.71
(1,157)	1:A:68:VAL:H	1:A:92:LEU:HD21	9	0.7	0.26	0.71
(1,157)	1:A:68:VAL:H	1:A:92:LEU:HD22	9	0.7	0.26	0.71
(1,157)	1:A:68:VAL:H	1:A:92:LEU:HD23	9	0.7	0.26	0.71
(1,634)	1:A:69:CYS:HB2	1:A:92:LEU:H	9	0.64	0.41	0.79
(1,756)	1:A:34:THR:H	1:A:40:ALA:H	9	0.64	0.22	0.59
(1,649)	1:A:9:ILE:H	1:A:33:LEU:HG	9	0.49	0.21	0.4
(1,481)	1:A:49:GLU:HB3	1:A:57:MET:HG3	9	0.47	0.13	0.48
(1,109)	1:A:28:LYS:HG3	1:A:29:LEU:HA	9	0.42	0.14	0.44
(1,1344)	1:A:9:ILE:HG12	1:A:32:LYS:HB3	9	0.28	0.09	0.31
(1,1344)	1:A:9:ILE:HG13	1:A:32:LYS:HB3	9	0.28	0.09	0.31
(1,1028)	1:A:23:LYS:H	1:A:23:LYS:HB3	9	0.24	0.02	0.24
(1,1623)	1:A:99:VAL:H	1:A:100:LYS:HD2	8	1.33	0.7	1.3
(1,1623)	1:A:99:VAL:H	1:A:100:LYS:HD3	8	1.33	0.7	1.3
(1,1060)	1:A:6:ASN:H	1:A:32:LYS:H	8	1.13	0.23	1.19
(1,619)	1:A:38:ASN:HD21	1:A:97:ALA:H	8	0.57	0.28	0.52
(1,1062)	1:A:7:MET:H	1:A:32:LYS:H	8	0.46	0.14	0.5
(1,1384)	1:A:18:ASN:HD21	1:A:20:ASP:H	8	0.39	0.09	0.4
(1,1384)	1:A:18:ASN:HD22	1:A:20:ASP:H	8	0.39	0.09	0.4
(1,683)	1:A:12:LEU:H	1:A:43:CYS:HA	8	0.36	0.15	0.38
(1,983)	1:A:11:THR:H	1:A:43:CYS:HA	8	0.27	0.06	0.25
(1,1051)	1:A:63:ALA:H	1:A:65:VAL:HG11	8	0.22	0.09	0.23
(1,1051)	1:A:63:ALA:H	1:A:65:VAL:HG12	8	0.22	0.09	0.23
(1,1051)	1:A:63:ALA:H	1:A:65:VAL:HG13	8	0.22	0.09	0.23
(1,1052)	1:A:63:ALA:H	1:A:65:VAL:HG11	8	0.22	0.09	0.23
(1,1052)	1:A:63:ALA:H	1:A:65:VAL:HG12	8	0.22	0.09	0.23
(1,1052)	1:A:63:ALA:H	1:A:65:VAL:HG13	8	0.22	0.09	0.23
(1,590)	1:A:42:LEU:HA	1:A:44:ILE:H	8	0.18	0.05	0.18
(1,1507)	1:A:58:GLU:HG2	1:A:59:GLU:H	7	0.85	0.03	0.85
(1,1507)	1:A:58:GLU:HG3	1:A:59:GLU:H	7	0.85	0.03	0.85
(1,476)	1:A:69:CYS:HB3	1:A:71:ASP:HA	7	0.81	0.41	1.04
(1,621)	1:A:38:ASN:HD22	1:A:97:ALA:H	7	0.39	0.15	0.4
(1,1166)	1:A:4:LEU:H	1:A:30:GLY:HA3	7	0.31	0.15	0.38
(1,1606)	1:A:91:SER:HB2	1:A:92:LEU:HG	7	0.25	0.05	0.23
(1,1606)	1:A:91:SER:HB3	1:A:92:LEU:HG	7	0.25	0.05	0.23
(1,790)	1:A:50:VAL:H	1:A:57:MET:HG3	7	0.18	0.04	0.19
(1,1048)	1:A:4:LEU:HD11	1:A:7:MET:H	6	1.11	0.24	1.23
(1,1048)	1:A:4:LEU:HD12	1:A:7:MET:H	6	1.11	0.24	1.23
(1,1048)	1:A:4:LEU:HD13	1:A:7:MET:H	6	1.11	0.24	1.23
(1,1447)	1:A:45:SER:HB2	1:A:46:THR:H	6	0.28	0.08	0.29
(1,1447)	1:A:45:SER:HB3	1:A:46:THR:H	6	0.28	0.08	0.29
(1,768)	1:A:11:THR:HA	1:A:45:SER:H	6	0.27	0.11	0.24

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)	Median (Å)
(1,310)	1:A:53:MET:HE1	1:A:61:LYS:H	6	0.25	0.12	0.21
(1,310)	1:A:53:MET:HE2	1:A:61:LYS:H	6	0.25	0.12	0.21
(1,310)	1:A:53:MET:HE3	1:A:61:LYS:H	6	0.25	0.12	0.21
(1,783)	1:A:57:MET:HG3	1:A:58:GLU:H	6	0.16	0.02	0.15
(1,1293)	1:A:30:GLY:H	1:A:31:GLY:H	6	0.12	0.01	0.12
(1,446)	1:A:4:LEU:HD11	1:A:7:MET:HB2	5	0.5	0.14	0.48
(1,446)	1:A:4:LEU:HD12	1:A:7:MET:HB2	5	0.5	0.14	0.48
(1,446)	1:A:4:LEU:HD13	1:A:7:MET:HB2	5	0.5	0.14	0.48
(1,1446)	1:A:45:SER:H	1:A:70:GLU:HG2	5	0.41	0.16	0.39
(1,1446)	1:A:45:SER:H	1:A:70:GLU:HG3	5	0.41	0.16	0.39
(1,1396)	1:A:19:LYS:HD2	1:A:21:GLU:H	5	0.41	0.24	0.36
(1,1396)	1:A:19:LYS:HD3	1:A:21:GLU:H	5	0.41	0.24	0.36
(1,353)	1:A:7:MET:HE1	1:A:42:LEU:HD21	5	0.37	0.02	0.37
(1,353)	1:A:7:MET:HE1	1:A:42:LEU:HD22	5	0.37	0.02	0.37
(1,353)	1:A:7:MET:HE1	1:A:42:LEU:HD23	5	0.37	0.02	0.37
(1,353)	1:A:7:MET:HE2	1:A:42:LEU:HD21	5	0.37	0.02	0.37
(1,353)	1:A:7:MET:HE2	1:A:42:LEU:HD22	5	0.37	0.02	0.37
(1,353)	1:A:7:MET:HE2	1:A:42:LEU:HD23	5	0.37	0.02	0.37
(1,353)	1:A:7:MET:HE3	1:A:42:LEU:HD21	5	0.37	0.02	0.37
(1,353)	1:A:7:MET:HE3	1:A:42:LEU:HD22	5	0.37	0.02	0.37
(1,353)	1:A:7:MET:HE3	1:A:42:LEU:HD23	5	0.37	0.02	0.37
(1,736)	1:A:15:LEU:HD11	1:A:22:ALA:H	5	0.31	0.16	0.29
(1,736)	1:A:15:LEU:HD12	1:A:22:ALA:H	5	0.31	0.16	0.29
(1,736)	1:A:15:LEU:HD13	1:A:22:ALA:H	5	0.31	0.16	0.29
(1,737)	1:A:15:LEU:HD11	1:A:22:ALA:H	5	0.31	0.16	0.29
(1,737)	1:A:15:LEU:HD12	1:A:22:ALA:H	5	0.31	0.16	0.29
(1,737)	1:A:15:LEU:HD13	1:A:22:ALA:H	5	0.31	0.16	0.29
(1,304)	1:A:50:VAL:H	1:A:53:MET:HE1	5	0.29	0.2	0.23
(1,304)	1:A:50:VAL:H	1:A:53:MET:HE2	5	0.29	0.2	0.23
(1,304)	1:A:50:VAL:H	1:A:53:MET:HE3	5	0.29	0.2	0.23
(1,1301)	1:A:4:LEU:HB3	1:A:30:GLY:H	5	0.22	0.13	0.17
(1,907)	1:A:72:PHE:HB2	1:A:76:VAL:H	5	0.22	0.04	0.21
(1,129)	1:A:42:LEU:HD11	1:A:43:CYS:H	5	0.17	0.07	0.13
(1,129)	1:A:42:LEU:HD12	1:A:43:CYS:H	5	0.17	0.07	0.13
(1,129)	1:A:42:LEU:HD13	1:A:43:CYS:H	5	0.17	0.07	0.13
(1,784)	1:A:57:MET:HG2	1:A:58:GLU:H	5	0.12	0.01	0.11
(1,1540)	1:A:70:GLU:HG2	1:A:71:ASP:HA	4	0.82	0.03	0.83
(1,1540)	1:A:70:GLU:HG3	1:A:71:ASP:HA	4	0.82	0.03	0.83
(1,347)	1:A:25:MET:HE1	1:A:29:LEU:HD21	4	0.6	0.23	0.6
(1,347)	1:A:25:MET:HE1	1:A:29:LEU:HD22	4	0.6	0.23	0.6
(1,347)	1:A:25:MET:HE1	1:A:29:LEU:HD23	4	0.6	0.23	0.6
(1,347)	1:A:25:MET:HE2	1:A:29:LEU:HD21	4	0.6	0.23	0.6

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)	Median (Å)
(1,347)	1:A:25:MET:HE2	1:A:29:LEU:HD22	4	0.6	0.23	0.6
(1,347)	1:A:25:MET:HE2	1:A:29:LEU:HD23	4	0.6	0.23	0.6
(1,347)	1:A:25:MET:HE3	1:A:29:LEU:HD21	4	0.6	0.23	0.6
(1,347)	1:A:25:MET:HE3	1:A:29:LEU:HD22	4	0.6	0.23	0.6
(1,347)	1:A:25:MET:HE3	1:A:29:LEU:HD23	4	0.6	0.23	0.6
(1,1485)	1:A:52:LYS:HD2	1:A:54:SER:H	4	0.33	0.08	0.35
(1,1485)	1:A:52:LYS:HD3	1:A:54:SER:H	4	0.33	0.08	0.35
(1,799)	1:A:70:GLU:H	1:A:70:GLU:HB3	4	0.3	0.02	0.3
(1,900)	1:A:45:SER:HB3	1:A:68:VAL:H	4	0.24	0.08	0.24
(1,1426)	1:A:28:LYS:HD2	1:A:29:LEU:H	4	0.16	0.04	0.14
(1,1426)	1:A:28:LYS:HD3	1:A:29:LEU:H	4	0.16	0.04	0.14
(1,1116)	1:A:73:LEU:H	1:A:74:GLN:HG2	3	1.21	0.02	1.23
(1,1550)	1:A:74:GLN:HA	1:A:74:GLN:HE21	3	0.95	0.23	0.8
(1,1550)	1:A:74:GLN:HA	1:A:74:GLN:HE22	3	0.95	0.23	0.8
(1,85)	1:A:9:ILE:HD11	1:A:42:LEU:HD21	3	0.9	0.64	0.92
(1,85)	1:A:9:ILE:HD11	1:A:42:LEU:HD22	3	0.9	0.64	0.92
(1,85)	1:A:9:ILE:HD11	1:A:42:LEU:HD23	3	0.9	0.64	0.92
(1,85)	1:A:9:ILE:HD12	1:A:42:LEU:HD21	3	0.9	0.64	0.92
(1,85)	1:A:9:ILE:HD12	1:A:42:LEU:HD22	3	0.9	0.64	0.92
(1,85)	1:A:9:ILE:HD12	1:A:42:LEU:HD23	3	0.9	0.64	0.92
(1,85)	1:A:9:ILE:HD13	1:A:42:LEU:HD21	3	0.9	0.64	0.92
(1,85)	1:A:9:ILE:HD13	1:A:42:LEU:HD22	3	0.9	0.64	0.92
(1,85)	1:A:9:ILE:HD13	1:A:42:LEU:HD23	3	0.9	0.64	0.92
(1,86)	1:A:9:ILE:HD11	1:A:42:LEU:HD21	3	0.9	0.64	0.92
(1,86)	1:A:9:ILE:HD11	1:A:42:LEU:HD22	3	0.9	0.64	0.92
(1,86)	1:A:9:ILE:HD11	1:A:42:LEU:HD23	3	0.9	0.64	0.92
(1,86)	1:A:9:ILE:HD12	1:A:42:LEU:HD21	3	0.9	0.64	0.92
(1,86)	1:A:9:ILE:HD12	1:A:42:LEU:HD22	3	0.9	0.64	0.92
(1,86)	1:A:9:ILE:HD12	1:A:42:LEU:HD23	3	0.9	0.64	0.92
(1,86)	1:A:9:ILE:HD13	1:A:42:LEU:HD21	3	0.9	0.64	0.92
(1,86)	1:A:9:ILE:HD13	1:A:42:LEU:HD22	3	0.9	0.64	0.92
(1,86)	1:A:9:ILE:HD13	1:A:42:LEU:HD23	3	0.9	0.64	0.92
(1,1119)	1:A:74:GLN:H	1:A:74:GLN:HG2	3	0.5	0.06	0.53
(1,1395)	1:A:19:LYS:HD2	1:A:20:ASP:HA	3	0.42	0.23	0.41
(1,1395)	1:A:19:LYS:HD3	1:A:20:ASP:HA	3	0.42	0.23	0.41
(1,288)	1:A:53:MET:HE1	1:A:61:LYS:HE3	3	0.33	0.07	0.34
(1,288)	1:A:53:MET:HE2	1:A:61:LYS:HE3	3	0.33	0.07	0.34
(1,288)	1:A:53:MET:HE3	1:A:61:LYS:HE3	3	0.33	0.07	0.34
(1,926)	1:A:74:GLN:HG2	1:A:75:ASP:H	3	0.26	0.06	0.29
(1,291)	1:A:9:ILE:HG21	1:A:42:LEU:HD21	3	0.24	0.13	0.19
(1,291)	1:A:9:ILE:HG21	1:A:42:LEU:HD22	3	0.24	0.13	0.19
(1,291)	1:A:9:ILE:HG21	1:A:42:LEU:HD23	3	0.24	0.13	0.19

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)	Median (Å)
(1,291)	1:A:9:ILE:HG22	1:A:42:LEU:HD21	3	0.24	0.13	0.19
(1,291)	1:A:9:ILE:HG22	1:A:42:LEU:HD22	3	0.24	0.13	0.19
(1,291)	1:A:9:ILE:HG22	1:A:42:LEU:HD23	3	0.24	0.13	0.19
(1,291)	1:A:9:ILE:HG23	1:A:42:LEU:HD21	3	0.24	0.13	0.19
(1,291)	1:A:9:ILE:HG23	1:A:42:LEU:HD22	3	0.24	0.13	0.19
(1,291)	1:A:9:ILE:HG23	1:A:42:LEU:HD23	3	0.24	0.13	0.19
(1,292)	1:A:9:ILE:HG21	1:A:42:LEU:HD21	3	0.24	0.13	0.19
(1,292)	1:A:9:ILE:HG21	1:A:42:LEU:HD22	3	0.24	0.13	0.19
(1,292)	1:A:9:ILE:HG21	1:A:42:LEU:HD23	3	0.24	0.13	0.19
(1,292)	1:A:9:ILE:HG22	1:A:42:LEU:HD21	3	0.24	0.13	0.19
(1,292)	1:A:9:ILE:HG22	1:A:42:LEU:HD22	3	0.24	0.13	0.19
(1,292)	1:A:9:ILE:HG22	1:A:42:LEU:HD23	3	0.24	0.13	0.19
(1,292)	1:A:9:ILE:HG23	1:A:42:LEU:HD21	3	0.24	0.13	0.19
(1,292)	1:A:9:ILE:HG23	1:A:42:LEU:HD22	3	0.24	0.13	0.19
(1,292)	1:A:9:ILE:HG23	1:A:42:LEU:HD23	3	0.24	0.13	0.19
(1,1047)	1:A:10:LEU:HD11	1:A:34:THR:H	3	0.23	0.07	0.25
(1,1047)	1:A:10:LEU:HD12	1:A:34:THR:H	3	0.23	0.07	0.25
(1,1047)	1:A:10:LEU:HD13	1:A:34:THR:H	3	0.23	0.07	0.25
(1,1252)	1:A:92:LEU:HD11	1:A:93:SER:H	3	0.21	0.07	0.26
(1,1252)	1:A:92:LEU:HD12	1:A:93:SER:H	3	0.21	0.07	0.26
(1,1252)	1:A:92:LEU:HD13	1:A:93:SER:H	3	0.21	0.07	0.26
(1,179)	1:A:15:LEU:HA	1:A:46:THR:HG21	3	0.2	0.1	0.16
(1,179)	1:A:15:LEU:HA	1:A:46:THR:HG22	3	0.2	0.1	0.16
(1,179)	1:A:15:LEU:HA	1:A:46:THR:HG23	3	0.2	0.1	0.16
(1,180)	1:A:15:LEU:HA	1:A:46:THR:HG21	3	0.2	0.1	0.16
(1,180)	1:A:15:LEU:HA	1:A:46:THR:HG22	3	0.2	0.1	0.16
(1,180)	1:A:15:LEU:HA	1:A:46:THR:HG23	3	0.2	0.1	0.16
(1,601)	1:A:15:LEU:H	1:A:15:LEU:HD21	3	0.18	0.05	0.17
(1,601)	1:A:15:LEU:H	1:A:15:LEU:HD22	3	0.18	0.05	0.17
(1,601)	1:A:15:LEU:H	1:A:15:LEU:HD23	3	0.18	0.05	0.17
(1,602)	1:A:15:LEU:H	1:A:15:LEU:HD21	3	0.18	0.05	0.17
(1,602)	1:A:15:LEU:H	1:A:15:LEU:HD22	3	0.18	0.05	0.17
(1,602)	1:A:15:LEU:H	1:A:15:LEU:HD23	3	0.18	0.05	0.17
(1,1215)	1:A:5:SER:H	1:A:31:GLY:HA2	3	0.16	0.04	0.17
(1,1034)	1:A:33:LEU:HG	1:A:34:THR:H	3	0.12	0.01	0.11
(1,287)	1:A:53:MET:HE1	1:A:61:LYS:HE2	2	1.04	0.34	1.04
(1,287)	1:A:53:MET:HE2	1:A:61:LYS:HE2	2	1.04	0.34	1.04
(1,287)	1:A:53:MET:HE3	1:A:61:LYS:HE2	2	1.04	0.34	1.04
(1,930)	1:A:68:VAL:H	1:A:92:LEU:HG	2	0.37	0.22	0.37
(1,296)	1:A:53:MET:HE1	1:A:54:SER:H	2	0.36	0.18	0.36
(1,296)	1:A:53:MET:HE2	1:A:54:SER:H	2	0.36	0.18	0.36
(1,296)	1:A:53:MET:HE3	1:A:54:SER:H	2	0.36	0.18	0.36

Continued on next page...

Continued from previous page...

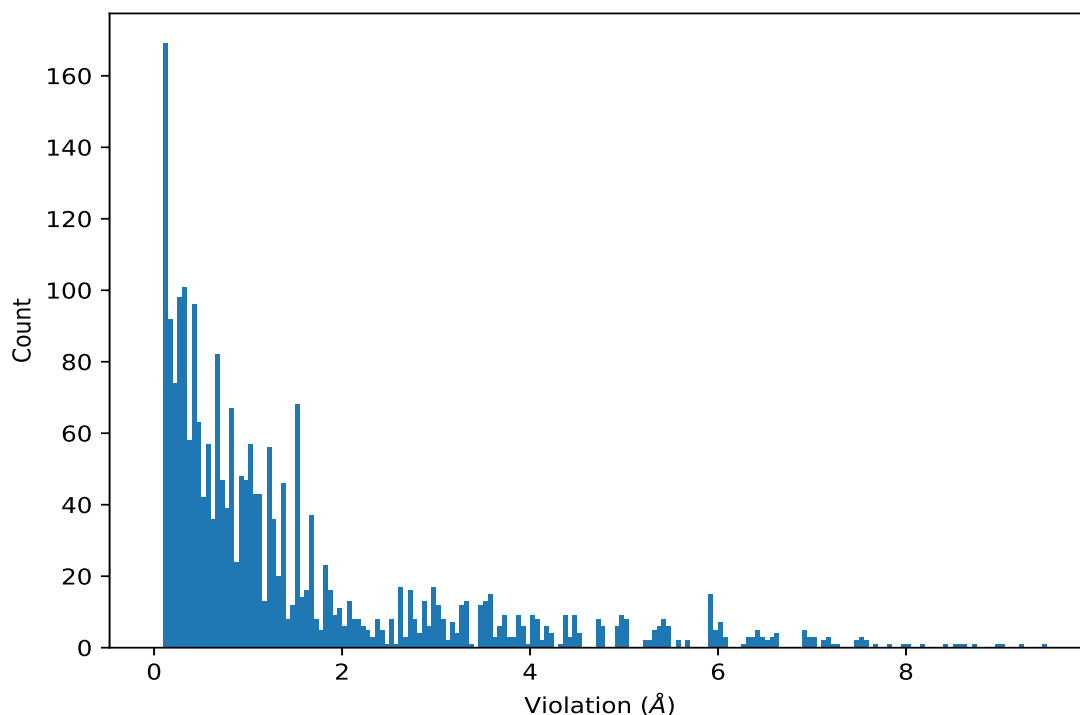
Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)	Median (Å)
(1,1136)	1:A:41:SER:H	1:A:42:LEU:HD21	2	0.35	0.06	0.35
(1,1136)	1:A:41:SER:H	1:A:42:LEU:HD22	2	0.35	0.06	0.35
(1,1136)	1:A:41:SER:H	1:A:42:LEU:HD23	2	0.35	0.06	0.35
(1,1137)	1:A:41:SER:H	1:A:42:LEU:HD21	2	0.35	0.06	0.35
(1,1137)	1:A:41:SER:H	1:A:42:LEU:HD22	2	0.35	0.06	0.35
(1,1137)	1:A:41:SER:H	1:A:42:LEU:HD23	2	0.35	0.06	0.35
(1,837)	1:A:12:LEU:HD21	1:A:61:LYS:H	2	0.29	0.18	0.29
(1,837)	1:A:12:LEU:HD22	1:A:61:LYS:H	2	0.29	0.18	0.29
(1,837)	1:A:12:LEU:HD23	1:A:61:LYS:H	2	0.29	0.18	0.29
(1,1276)	1:A:4:LEU:HG	1:A:31:GLY:H	2	0.26	0.1	0.26
(1,505)	1:A:22:ALA:HA	1:A:25:MET:HA	2	0.24	0.04	0.24
(1,1346)	1:A:12:LEU:H	1:A:45:SER:HB2	2	0.22	0.04	0.22
(1,1346)	1:A:12:LEU:H	1:A:45:SER:HB3	2	0.22	0.04	0.22
(1,893)	1:A:79:SER:HB2	1:A:81:LYS:H	2	0.21	0.02	0.21
(1,1127)	1:A:28:LYS:HD2	1:A:29:LEU:H	2	0.2	0.02	0.2
(1,1617)	1:A:97:ALA:HA	1:A:98:GLU:HB2	2	0.16	0.02	0.16
(1,1617)	1:A:97:ALA:HA	1:A:98:GLU:HB3	2	0.16	0.02	0.16

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)
(1,1211)	1:A:5:SER:H	1:A:84:GLN:HE22	2	9.49
(1,1211)	1:A:5:SER:H	1:A:84:GLN:HE22	6	9.21
(1,1211)	1:A:5:SER:H	1:A:84:GLN:HE22	8	9.01
(1,1211)	1:A:5:SER:H	1:A:84:GLN:HE22	5	8.98
(1,1211)	1:A:5:SER:H	1:A:84:GLN:HE22	4	8.74
(1,1212)	1:A:5:SER:H	1:A:84:GLN:HE21	7	8.64
(1,1212)	1:A:5:SER:H	1:A:84:GLN:HE21	2	8.56
(1,1211)	1:A:5:SER:H	1:A:84:GLN:HE22	10	8.5
(1,1211)	1:A:5:SER:H	1:A:84:GLN:HE22	1	8.4
(1,1212)	1:A:5:SER:H	1:A:84:GLN:HE21	6	8.15
(1,1212)	1:A:5:SER:H	1:A:84:GLN:HE21	8	8.04
(1,1212)	1:A:5:SER:H	1:A:84:GLN:HE21	5	7.96
(1,1211)	1:A:5:SER:H	1:A:84:GLN:HE22	9	7.81
(1,1212)	1:A:5:SER:H	1:A:84:GLN:HE21	10	7.68
(1,1212)	1:A:5:SER:H	1:A:84:GLN:HE21	4	7.57
(1,1212)	1:A:5:SER:H	1:A:84:GLN:HE21	1	7.56

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1232)	1:A:4:LEU:HD11	1:A:84:GLN:HE22	2	7.52
(1,1232)	1:A:4:LEU:HD12	1:A:84:GLN:HE22	2	7.52
(1,1232)	1:A:4:LEU:HD13	1:A:84:GLN:HE22	2	7.52
(1,1321)	1:A:5:SER:H	1:A:84:GLN:HE21	2	7.45
(1,1321)	1:A:5:SER:H	1:A:84:GLN:HE22	2	7.45
(1,1212)	1:A:5:SER:H	1:A:84:GLN:HE21	3	7.25
(1,1211)	1:A:5:SER:H	1:A:84:GLN:HE22	7	7.22
(1,1235)	1:A:4:LEU:HD11	1:A:84:GLN:HE21	7	7.19
(1,1235)	1:A:4:LEU:HD12	1:A:84:GLN:HE21	7	7.19
(1,1235)	1:A:4:LEU:HD13	1:A:84:GLN:HE21	7	7.19
(1,1321)	1:A:5:SER:H	1:A:84:GLN:HE21	6	7.13
(1,1321)	1:A:5:SER:H	1:A:84:GLN:HE22	6	7.13
(1,1235)	1:A:4:LEU:HD11	1:A:84:GLN:HE21	2	7.02
(1,1235)	1:A:4:LEU:HD12	1:A:84:GLN:HE21	2	7.02
(1,1235)	1:A:4:LEU:HD13	1:A:84:GLN:HE21	2	7.02
(1,1321)	1:A:5:SER:H	1:A:84:GLN:HE21	8	6.99
(1,1321)	1:A:5:SER:H	1:A:84:GLN:HE22	8	6.99
(1,1212)	1:A:5:SER:H	1:A:84:GLN:HE21	9	6.98
(1,1321)	1:A:5:SER:H	1:A:84:GLN:HE21	5	6.94
(1,1321)	1:A:5:SER:H	1:A:84:GLN:HE22	5	6.94
(1,1232)	1:A:4:LEU:HD11	1:A:84:GLN:HE22	10	6.91
(1,1232)	1:A:4:LEU:HD12	1:A:84:GLN:HE22	10	6.91
(1,1232)	1:A:4:LEU:HD13	1:A:84:GLN:HE22	10	6.91
(1,1321)	1:A:5:SER:H	1:A:84:GLN:HE21	4	6.64
(1,1321)	1:A:5:SER:H	1:A:84:GLN:HE22	4	6.64
(1,1321)	1:A:5:SER:H	1:A:84:GLN:HE21	10	6.62
(1,1321)	1:A:5:SER:H	1:A:84:GLN:HE22	10	6.62
(1,1235)	1:A:4:LEU:HD11	1:A:84:GLN:HE21	10	6.56
(1,1235)	1:A:4:LEU:HD12	1:A:84:GLN:HE21	10	6.56
(1,1235)	1:A:4:LEU:HD13	1:A:84:GLN:HE21	10	6.56
(1,1321)	1:A:5:SER:H	1:A:84:GLN:HE21	1	6.52
(1,1321)	1:A:5:SER:H	1:A:84:GLN:HE22	1	6.52
(1,1229)	1:A:4:LEU:HD21	1:A:84:GLN:HE22	5	6.49
(1,1229)	1:A:4:LEU:HD22	1:A:84:GLN:HE22	5	6.49
(1,1229)	1:A:4:LEU:HD23	1:A:84:GLN:HE22	5	6.49
(1,1232)	1:A:4:LEU:HD11	1:A:84:GLN:HE22	7	6.44
(1,1232)	1:A:4:LEU:HD12	1:A:84:GLN:HE22	7	6.44
(1,1232)	1:A:4:LEU:HD13	1:A:84:GLN:HE22	7	6.44
(1,1321)	1:A:5:SER:H	1:A:84:GLN:HE21	7	6.4
(1,1321)	1:A:5:SER:H	1:A:84:GLN:HE22	7	6.4
(1,1235)	1:A:4:LEU:HD11	1:A:84:GLN:HE21	3	6.38
(1,1235)	1:A:4:LEU:HD12	1:A:84:GLN:HE21	3	6.38

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1235)	1:A:4:LEU:HD13	1:A:84:GLN:HE21	3	6.38
(1,1232)	1:A:4:LEU:HD11	1:A:84:GLN:HE22	9	6.33
(1,1232)	1:A:4:LEU:HD12	1:A:84:GLN:HE22	9	6.33
(1,1232)	1:A:4:LEU:HD13	1:A:84:GLN:HE22	9	6.33
(1,1211)	1:A:5:SER:H	1:A:84:GLN:HE22	3	6.27
(1,1232)	1:A:4:LEU:HD11	1:A:84:GLN:HE22	3	6.1
(1,1232)	1:A:4:LEU:HD12	1:A:84:GLN:HE22	3	6.1
(1,1232)	1:A:4:LEU:HD13	1:A:84:GLN:HE22	3	6.1
(1,1317)	1:A:4:LEU:H	1:A:84:GLN:HE21	6	6.05
(1,1317)	1:A:4:LEU:H	1:A:84:GLN:HE22	6	6.05
(1,1234)	1:A:4:LEU:HD21	1:A:84:GLN:HE21	5	6.03
(1,1234)	1:A:4:LEU:HD22	1:A:84:GLN:HE21	5	6.03
(1,1234)	1:A:4:LEU:HD23	1:A:84:GLN:HE21	5	6.03
(1,1321)	1:A:5:SER:H	1:A:84:GLN:HE21	9	6.0
(1,1321)	1:A:5:SER:H	1:A:84:GLN:HE22	9	6.0
(1,1235)	1:A:4:LEU:HD11	1:A:84:GLN:HE21	9	5.98
(1,1235)	1:A:4:LEU:HD12	1:A:84:GLN:HE21	9	5.98
(1,1235)	1:A:4:LEU:HD13	1:A:84:GLN:HE21	9	5.98
(1,1317)	1:A:4:LEU:H	1:A:84:GLN:HE21	2	5.95
(1,1317)	1:A:4:LEU:H	1:A:84:GLN:HE22	2	5.95
(1,1318)	1:A:4:LEU:HD11	1:A:84:GLN:HE21	2	5.92
(1,1318)	1:A:4:LEU:HD11	1:A:84:GLN:HE22	2	5.92
(1,1318)	1:A:4:LEU:HD12	1:A:84:GLN:HE21	2	5.92
(1,1318)	1:A:4:LEU:HD12	1:A:84:GLN:HE22	2	5.92
(1,1318)	1:A:4:LEU:HD13	1:A:84:GLN:HE21	2	5.92
(1,1318)	1:A:4:LEU:HD13	1:A:84:GLN:HE22	2	5.92
(1,1319)	1:A:4:LEU:HD21	1:A:84:GLN:HE21	5	5.91
(1,1319)	1:A:4:LEU:HD21	1:A:84:GLN:HE22	5	5.91
(1,1319)	1:A:4:LEU:HD22	1:A:84:GLN:HE21	5	5.91
(1,1319)	1:A:4:LEU:HD22	1:A:84:GLN:HE22	5	5.91
(1,1319)	1:A:4:LEU:HD23	1:A:84:GLN:HE21	5	5.91
(1,1319)	1:A:4:LEU:HD23	1:A:84:GLN:HE22	5	5.91
(1,1232)	1:A:4:LEU:HD11	1:A:84:GLN:HE22	6	5.9
(1,1232)	1:A:4:LEU:HD12	1:A:84:GLN:HE22	6	5.9
(1,1232)	1:A:4:LEU:HD13	1:A:84:GLN:HE22	6	5.9
(1,1317)	1:A:4:LEU:H	1:A:84:GLN:HE21	8	5.67
(1,1317)	1:A:4:LEU:H	1:A:84:GLN:HE22	8	5.67
(1,1317)	1:A:4:LEU:H	1:A:84:GLN:HE21	5	5.58
(1,1317)	1:A:4:LEU:H	1:A:84:GLN:HE22	5	5.58
(1,1318)	1:A:4:LEU:HD11	1:A:84:GLN:HE21	7	5.49
(1,1318)	1:A:4:LEU:HD11	1:A:84:GLN:HE22	7	5.49
(1,1318)	1:A:4:LEU:HD12	1:A:84:GLN:HE21	7	5.49

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1318)	1:A:4:LEU:HD12	1:A:84:GLN:HE22	7	5.49
(1,1318)	1:A:4:LEU:HD13	1:A:84:GLN:HE21	7	5.49
(1,1318)	1:A:4:LEU:HD13	1:A:84:GLN:HE22	7	5.49
(1,1318)	1:A:4:LEU:HD11	1:A:84:GLN:HE21	10	5.44
(1,1318)	1:A:4:LEU:HD11	1:A:84:GLN:HE22	10	5.44
(1,1318)	1:A:4:LEU:HD12	1:A:84:GLN:HE21	10	5.44
(1,1318)	1:A:4:LEU:HD12	1:A:84:GLN:HE22	10	5.44
(1,1318)	1:A:4:LEU:HD13	1:A:84:GLN:HE21	10	5.44
(1,1318)	1:A:4:LEU:HD13	1:A:84:GLN:HE22	10	5.44
(1,1321)	1:A:5:SER:H	1:A:84:GLN:HE21	3	5.41
(1,1321)	1:A:5:SER:H	1:A:84:GLN:HE22	3	5.41
(1,1235)	1:A:4:LEU:HD11	1:A:84:GLN:HE21	6	5.37
(1,1235)	1:A:4:LEU:HD12	1:A:84:GLN:HE21	6	5.37
(1,1235)	1:A:4:LEU:HD13	1:A:84:GLN:HE21	6	5.37
(1,1232)	1:A:4:LEU:HD11	1:A:84:GLN:HE22	8	5.36
(1,1232)	1:A:4:LEU:HD12	1:A:84:GLN:HE22	8	5.36
(1,1232)	1:A:4:LEU:HD13	1:A:84:GLN:HE22	8	5.36
(1,1317)	1:A:4:LEU:H	1:A:84:GLN:HE21	4	5.32
(1,1317)	1:A:4:LEU:H	1:A:84:GLN:HE22	4	5.32
(1,1232)	1:A:4:LEU:HD11	1:A:84:GLN:HE22	5	5.31
(1,1232)	1:A:4:LEU:HD12	1:A:84:GLN:HE22	5	5.31
(1,1232)	1:A:4:LEU:HD13	1:A:84:GLN:HE22	5	5.31
(1,1317)	1:A:4:LEU:H	1:A:84:GLN:HE21	1	5.28
(1,1317)	1:A:4:LEU:H	1:A:84:GLN:HE22	1	5.28
(1,1317)	1:A:4:LEU:H	1:A:84:GLN:HE21	10	5.24
(1,1317)	1:A:4:LEU:H	1:A:84:GLN:HE22	10	5.24
(1,1317)	1:A:4:LEU:H	1:A:84:GLN:HE21	7	5.02
(1,1317)	1:A:4:LEU:H	1:A:84:GLN:HE22	7	5.02
(1,1318)	1:A:4:LEU:HD11	1:A:84:GLN:HE21	3	5.01
(1,1318)	1:A:4:LEU:HD11	1:A:84:GLN:HE22	3	5.01
(1,1318)	1:A:4:LEU:HD12	1:A:84:GLN:HE21	3	5.01
(1,1318)	1:A:4:LEU:HD12	1:A:84:GLN:HE22	3	5.01
(1,1318)	1:A:4:LEU:HD13	1:A:84:GLN:HE21	3	5.01
(1,1318)	1:A:4:LEU:HD13	1:A:84:GLN:HE22	3	5.01
(1,1235)	1:A:4:LEU:HD11	1:A:84:GLN:HE21	8	4.98
(1,1235)	1:A:4:LEU:HD12	1:A:84:GLN:HE21	8	4.98
(1,1235)	1:A:4:LEU:HD13	1:A:84:GLN:HE21	8	4.98
(1,1229)	1:A:4:LEU:HD21	1:A:84:GLN:HE22	6	4.97
(1,1229)	1:A:4:LEU:HD22	1:A:84:GLN:HE22	6	4.97
(1,1229)	1:A:4:LEU:HD23	1:A:84:GLN:HE22	6	4.97
(1,1232)	1:A:4:LEU:HD11	1:A:84:GLN:HE22	4	4.95
(1,1232)	1:A:4:LEU:HD12	1:A:84:GLN:HE22	4	4.95

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1232)	1:A:4:LEU:HD13	1:A:84:GLN:HE22	4	4.95
(1,1318)	1:A:4:LEU:HD11	1:A:84:GLN:HE21	9	4.93
(1,1318)	1:A:4:LEU:HD11	1:A:84:GLN:HE22	9	4.93
(1,1318)	1:A:4:LEU:HD12	1:A:84:GLN:HE21	9	4.93
(1,1318)	1:A:4:LEU:HD12	1:A:84:GLN:HE22	9	4.93
(1,1318)	1:A:4:LEU:HD13	1:A:84:GLN:HE21	9	4.93
(1,1318)	1:A:4:LEU:HD13	1:A:84:GLN:HE22	9	4.93
(1,309)	1:A:7:MET:HE1	1:A:84:GLN:HE22	2	4.79
(1,309)	1:A:7:MET:HE2	1:A:84:GLN:HE22	2	4.79
(1,309)	1:A:7:MET:HE3	1:A:84:GLN:HE22	2	4.79
(1,309)	1:A:7:MET:HE1	1:A:84:GLN:HE22	6	4.76
(1,309)	1:A:7:MET:HE2	1:A:84:GLN:HE22	6	4.76
(1,309)	1:A:7:MET:HE3	1:A:84:GLN:HE22	6	4.76
(1,1317)	1:A:4:LEU:H	1:A:84:GLN:HE21	9	4.71
(1,1317)	1:A:4:LEU:H	1:A:84:GLN:HE22	9	4.71
(1,315)	1:A:7:MET:HE1	1:A:84:GLN:HE21	2	4.7
(1,315)	1:A:7:MET:HE2	1:A:84:GLN:HE21	2	4.7
(1,315)	1:A:7:MET:HE3	1:A:84:GLN:HE21	2	4.7
(1,1235)	1:A:4:LEU:HD11	1:A:84:GLN:HE21	5	4.7
(1,1235)	1:A:4:LEU:HD12	1:A:84:GLN:HE21	5	4.7
(1,1235)	1:A:4:LEU:HD13	1:A:84:GLN:HE21	5	4.7
(1,315)	1:A:7:MET:HE1	1:A:84:GLN:HE21	6	4.53
(1,315)	1:A:7:MET:HE2	1:A:84:GLN:HE21	6	4.53
(1,315)	1:A:7:MET:HE3	1:A:84:GLN:HE21	6	4.53
(1,284)	1:A:72:PHE:HB2	1:A:87:LEU:HB2	10	4.53
(1,1232)	1:A:4:LEU:HD11	1:A:84:GLN:HE22	1	4.48
(1,1232)	1:A:4:LEU:HD12	1:A:84:GLN:HE22	1	4.48
(1,1232)	1:A:4:LEU:HD13	1:A:84:GLN:HE22	1	4.48
(1,1318)	1:A:4:LEU:HD11	1:A:84:GLN:HE21	6	4.45
(1,1318)	1:A:4:LEU:HD11	1:A:84:GLN:HE22	6	4.45
(1,1318)	1:A:4:LEU:HD12	1:A:84:GLN:HE21	6	4.45
(1,1318)	1:A:4:LEU:HD12	1:A:84:GLN:HE22	6	4.45
(1,1318)	1:A:4:LEU:HD13	1:A:84:GLN:HE21	6	4.45
(1,1318)	1:A:4:LEU:HD13	1:A:84:GLN:HE22	6	4.45
(1,1229)	1:A:4:LEU:HD21	1:A:84:GLN:HE22	8	4.4
(1,1229)	1:A:4:LEU:HD22	1:A:84:GLN:HE22	8	4.4
(1,1229)	1:A:4:LEU:HD23	1:A:84:GLN:HE22	8	4.4
(1,1235)	1:A:4:LEU:HD11	1:A:84:GLN:HE21	4	4.39
(1,1235)	1:A:4:LEU:HD12	1:A:84:GLN:HE21	4	4.39
(1,1235)	1:A:4:LEU:HD13	1:A:84:GLN:HE21	4	4.39
(1,1319)	1:A:4:LEU:HD21	1:A:84:GLN:HE21	6	4.38
(1,1319)	1:A:4:LEU:HD21	1:A:84:GLN:HE22	6	4.38

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1319)	1:A:4:LEU:HD22	1:A:84:GLN:HE21	6	4.38
(1,1319)	1:A:4:LEU:HD22	1:A:84:GLN:HE22	6	4.38
(1,1319)	1:A:4:LEU:HD23	1:A:84:GLN:HE21	6	4.38
(1,1319)	1:A:4:LEU:HD23	1:A:84:GLN:HE22	6	4.38
(1,170)	1:A:89:ALA:H	1:A:92:LEU:HB2	4	4.31
(1,170)	1:A:89:ALA:H	1:A:92:LEU:HB2	2	4.23
(1,1235)	1:A:4:LEU:HD11	1:A:84:GLN:HE21	1	4.21
(1,1235)	1:A:4:LEU:HD12	1:A:84:GLN:HE21	1	4.21
(1,1235)	1:A:4:LEU:HD13	1:A:84:GLN:HE21	1	4.21
(1,1317)	1:A:4:LEU:H	1:A:84:GLN:HE21	3	4.18
(1,1317)	1:A:4:LEU:H	1:A:84:GLN:HE22	3	4.18
(1,1234)	1:A:4:LEU:HD21	1:A:84:GLN:HE21	6	4.18
(1,1234)	1:A:4:LEU:HD22	1:A:84:GLN:HE21	6	4.18
(1,1234)	1:A:4:LEU:HD23	1:A:84:GLN:HE21	6	4.18
(1,170)	1:A:89:ALA:H	1:A:92:LEU:HB2	1	4.16
(1,170)	1:A:89:ALA:H	1:A:92:LEU:HB2	3	4.14
(1,170)	1:A:89:ALA:H	1:A:92:LEU:HB2	8	4.13
(1,170)	1:A:89:ALA:H	1:A:92:LEU:HB2	7	4.09
(1,170)	1:A:89:ALA:H	1:A:92:LEU:HB2	10	4.09
(1,1318)	1:A:4:LEU:HD11	1:A:84:GLN:HE21	8	4.05
(1,1318)	1:A:4:LEU:HD11	1:A:84:GLN:HE22	8	4.05
(1,1318)	1:A:4:LEU:HD12	1:A:84:GLN:HE21	8	4.05
(1,1318)	1:A:4:LEU:HD12	1:A:84:GLN:HE22	8	4.05
(1,1318)	1:A:4:LEU:HD13	1:A:84:GLN:HE21	8	4.05
(1,1318)	1:A:4:LEU:HD13	1:A:84:GLN:HE22	8	4.05
(1,1229)	1:A:4:LEU:HD21	1:A:84:GLN:HE22	4	4.03
(1,1229)	1:A:4:LEU:HD22	1:A:84:GLN:HE22	4	4.03
(1,1229)	1:A:4:LEU:HD23	1:A:84:GLN:HE22	4	4.03
(1,1229)	1:A:4:LEU:HD21	1:A:84:GLN:HE22	2	4.02
(1,1229)	1:A:4:LEU:HD22	1:A:84:GLN:HE22	2	4.02
(1,1229)	1:A:4:LEU:HD23	1:A:84:GLN:HE22	2	4.02
(1,309)	1:A:7:MET:HE1	1:A:84:GLN:HE22	5	4.0
(1,309)	1:A:7:MET:HE2	1:A:84:GLN:HE22	5	4.0
(1,309)	1:A:7:MET:HE3	1:A:84:GLN:HE22	5	4.0
(1,284)	1:A:72:PHE:HB2	1:A:87:LEU:HB2	9	3.97
(1,1319)	1:A:4:LEU:HD21	1:A:84:GLN:HE21	8	3.94
(1,1319)	1:A:4:LEU:HD21	1:A:84:GLN:HE22	8	3.94
(1,1319)	1:A:4:LEU:HD22	1:A:84:GLN:HE21	8	3.94
(1,1319)	1:A:4:LEU:HD22	1:A:84:GLN:HE22	8	3.94
(1,1319)	1:A:4:LEU:HD23	1:A:84:GLN:HE21	8	3.94
(1,1319)	1:A:4:LEU:HD23	1:A:84:GLN:HE22	8	3.94
(1,315)	1:A:7:MET:HE1	1:A:84:GLN:HE21	5	3.89

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,315)	1:A:7:MET:HE2	1:A:84:GLN:HE21	5	3.89
(1,315)	1:A:7:MET:HE3	1:A:84:GLN:HE21	5	3.89
(1,1318)	1:A:4:LEU:HD11	1:A:84:GLN:HE21	5	3.88
(1,1318)	1:A:4:LEU:HD11	1:A:84:GLN:HE22	5	3.88
(1,1318)	1:A:4:LEU:HD12	1:A:84:GLN:HE21	5	3.88
(1,1318)	1:A:4:LEU:HD12	1:A:84:GLN:HE22	5	3.88
(1,1318)	1:A:4:LEU:HD13	1:A:84:GLN:HE21	5	3.88
(1,1318)	1:A:4:LEU:HD13	1:A:84:GLN:HE22	5	3.88
(1,1229)	1:A:4:LEU:HD21	1:A:84:GLN:HE22	1	3.83
(1,1229)	1:A:4:LEU:HD22	1:A:84:GLN:HE22	1	3.83
(1,1229)	1:A:4:LEU:HD23	1:A:84:GLN:HE22	1	3.83
(1,1234)	1:A:4:LEU:HD21	1:A:84:GLN:HE21	7	3.79
(1,1234)	1:A:4:LEU:HD22	1:A:84:GLN:HE21	7	3.79
(1,1234)	1:A:4:LEU:HD23	1:A:84:GLN:HE21	7	3.79
(1,1234)	1:A:4:LEU:HD21	1:A:84:GLN:HE21	8	3.74
(1,1234)	1:A:4:LEU:HD22	1:A:84:GLN:HE21	8	3.74
(1,1234)	1:A:4:LEU:HD23	1:A:84:GLN:HE21	8	3.74
(1,1319)	1:A:4:LEU:HD21	1:A:84:GLN:HE21	2	3.7
(1,1319)	1:A:4:LEU:HD21	1:A:84:GLN:HE22	2	3.7
(1,1319)	1:A:4:LEU:HD22	1:A:84:GLN:HE21	2	3.7
(1,1319)	1:A:4:LEU:HD22	1:A:84:GLN:HE22	2	3.7
(1,1319)	1:A:4:LEU:HD23	1:A:84:GLN:HE21	2	3.7
(1,1319)	1:A:4:LEU:HD23	1:A:84:GLN:HE22	2	3.7
(1,1327)	1:A:7:MET:HE1	1:A:84:GLN:HE21	2	3.68
(1,1327)	1:A:7:MET:HE1	1:A:84:GLN:HE22	2	3.68
(1,1327)	1:A:7:MET:HE2	1:A:84:GLN:HE21	2	3.68
(1,1327)	1:A:7:MET:HE2	1:A:84:GLN:HE22	2	3.68
(1,1327)	1:A:7:MET:HE3	1:A:84:GLN:HE21	2	3.68
(1,1327)	1:A:7:MET:HE3	1:A:84:GLN:HE22	2	3.68
(1,315)	1:A:7:MET:HE1	1:A:84:GLN:HE21	10	3.62
(1,315)	1:A:7:MET:HE2	1:A:84:GLN:HE21	10	3.62
(1,315)	1:A:7:MET:HE3	1:A:84:GLN:HE21	10	3.62
(1,309)	1:A:7:MET:HE1	1:A:84:GLN:HE22	8	3.59
(1,309)	1:A:7:MET:HE2	1:A:84:GLN:HE22	8	3.59
(1,309)	1:A:7:MET:HE3	1:A:84:GLN:HE22	8	3.59
(1,1327)	1:A:7:MET:HE1	1:A:84:GLN:HE21	6	3.59
(1,1327)	1:A:7:MET:HE1	1:A:84:GLN:HE22	6	3.59
(1,1327)	1:A:7:MET:HE2	1:A:84:GLN:HE21	6	3.59
(1,1327)	1:A:7:MET:HE2	1:A:84:GLN:HE22	6	3.59
(1,1327)	1:A:7:MET:HE3	1:A:84:GLN:HE21	6	3.59
(1,1327)	1:A:7:MET:HE3	1:A:84:GLN:HE22	6	3.59
(1,1318)	1:A:4:LEU:HD11	1:A:84:GLN:HE21	4	3.59

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1318)	1:A:4:LEU:HD11	1:A:84:GLN:HE22	4	3.59
(1,1318)	1:A:4:LEU:HD12	1:A:84:GLN:HE21	4	3.59
(1,1318)	1:A:4:LEU:HD12	1:A:84:GLN:HE22	4	3.59
(1,1318)	1:A:4:LEU:HD13	1:A:84:GLN:HE21	4	3.59
(1,1318)	1:A:4:LEU:HD13	1:A:84:GLN:HE22	4	3.59
(1,1234)	1:A:4:LEU:HD21	1:A:84:GLN:HE21	2	3.54
(1,1234)	1:A:4:LEU:HD22	1:A:84:GLN:HE21	2	3.54
(1,1234)	1:A:4:LEU:HD23	1:A:84:GLN:HE21	2	3.54
(1,1319)	1:A:4:LEU:HD21	1:A:84:GLN:HE21	4	3.52
(1,1319)	1:A:4:LEU:HD21	1:A:84:GLN:HE22	4	3.52
(1,1319)	1:A:4:LEU:HD22	1:A:84:GLN:HE21	4	3.52
(1,1319)	1:A:4:LEU:HD22	1:A:84:GLN:HE22	4	3.52
(1,1319)	1:A:4:LEU:HD23	1:A:84:GLN:HE21	4	3.52
(1,1319)	1:A:4:LEU:HD23	1:A:84:GLN:HE22	4	3.52
(1,315)	1:A:7:MET:HE1	1:A:84:GLN:HE21	8	3.51
(1,315)	1:A:7:MET:HE2	1:A:84:GLN:HE21	8	3.51
(1,315)	1:A:7:MET:HE3	1:A:84:GLN:HE21	8	3.51
(1,285)	1:A:72:PHE:HB2	1:A:87:LEU:HB3	10	3.5
(1,309)	1:A:7:MET:HE1	1:A:84:GLN:HE22	10	3.49
(1,309)	1:A:7:MET:HE2	1:A:84:GLN:HE22	10	3.49
(1,309)	1:A:7:MET:HE3	1:A:84:GLN:HE22	10	3.49
(1,1319)	1:A:4:LEU:HD21	1:A:84:GLN:HE21	1	3.47
(1,1319)	1:A:4:LEU:HD21	1:A:84:GLN:HE22	1	3.47
(1,1319)	1:A:4:LEU:HD22	1:A:84:GLN:HE21	1	3.47
(1,1319)	1:A:4:LEU:HD22	1:A:84:GLN:HE22	1	3.47
(1,1319)	1:A:4:LEU:HD23	1:A:84:GLN:HE21	1	3.47
(1,1319)	1:A:4:LEU:HD23	1:A:84:GLN:HE22	1	3.47
(1,1229)	1:A:4:LEU:HD21	1:A:84:GLN:HE22	10	3.47
(1,1229)	1:A:4:LEU:HD22	1:A:84:GLN:HE22	10	3.47
(1,1229)	1:A:4:LEU:HD23	1:A:84:GLN:HE22	10	3.47
(1,284)	1:A:72:PHE:HB2	1:A:87:LEU:HB2	6	3.38
(1,1319)	1:A:4:LEU:HD21	1:A:84:GLN:HE21	7	3.34
(1,1319)	1:A:4:LEU:HD21	1:A:84:GLN:HE22	7	3.34
(1,1319)	1:A:4:LEU:HD22	1:A:84:GLN:HE21	7	3.34
(1,1319)	1:A:4:LEU:HD22	1:A:84:GLN:HE22	7	3.34
(1,1319)	1:A:4:LEU:HD23	1:A:84:GLN:HE21	7	3.34
(1,1319)	1:A:4:LEU:HD23	1:A:84:GLN:HE22	7	3.34
(1,1085)	1:A:6:ASN:HA	1:A:32:LYS:H	9	3.34
(1,1318)	1:A:4:LEU:HD11	1:A:84:GLN:HE21	1	3.32
(1,1318)	1:A:4:LEU:HD11	1:A:84:GLN:HE22	1	3.32
(1,1318)	1:A:4:LEU:HD12	1:A:84:GLN:HE21	1	3.32
(1,1318)	1:A:4:LEU:HD12	1:A:84:GLN:HE22	1	3.32

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1318)	1:A:4:LEU:HD13	1:A:84:GLN:HE21	1	3.32
(1,1318)	1:A:4:LEU:HD13	1:A:84:GLN:HE22	1	3.32
(1,1319)	1:A:4:LEU:HD21	1:A:84:GLN:HE21	10	3.3
(1,1319)	1:A:4:LEU:HD21	1:A:84:GLN:HE22	10	3.3
(1,1319)	1:A:4:LEU:HD22	1:A:84:GLN:HE21	10	3.3
(1,1319)	1:A:4:LEU:HD22	1:A:84:GLN:HE22	10	3.3
(1,1319)	1:A:4:LEU:HD23	1:A:84:GLN:HE21	10	3.3
(1,1319)	1:A:4:LEU:HD23	1:A:84:GLN:HE22	10	3.3
(1,315)	1:A:7:MET:HE1	1:A:84:GLN:HE21	7	3.26
(1,315)	1:A:7:MET:HE2	1:A:84:GLN:HE21	7	3.26
(1,315)	1:A:7:MET:HE3	1:A:84:GLN:HE21	7	3.26
(1,1234)	1:A:4:LEU:HD21	1:A:84:GLN:HE21	1	3.25
(1,1234)	1:A:4:LEU:HD22	1:A:84:GLN:HE21	1	3.25
(1,1234)	1:A:4:LEU:HD23	1:A:84:GLN:HE21	1	3.25
(1,1085)	1:A:6:ASN:HA	1:A:32:LYS:H	1	3.22
(1,1234)	1:A:4:LEU:HD21	1:A:84:GLN:HE21	4	3.21
(1,1234)	1:A:4:LEU:HD22	1:A:84:GLN:HE21	4	3.21
(1,1234)	1:A:4:LEU:HD23	1:A:84:GLN:HE21	4	3.21
(1,1234)	1:A:4:LEU:HD21	1:A:84:GLN:HE21	10	3.18
(1,1234)	1:A:4:LEU:HD22	1:A:84:GLN:HE21	10	3.18
(1,1234)	1:A:4:LEU:HD23	1:A:84:GLN:HE21	10	3.18
(1,309)	1:A:7:MET:HE1	1:A:84:GLN:HE22	3	3.17
(1,309)	1:A:7:MET:HE2	1:A:84:GLN:HE22	3	3.17
(1,309)	1:A:7:MET:HE3	1:A:84:GLN:HE22	3	3.17
(1,1085)	1:A:6:ASN:HA	1:A:32:LYS:H	8	3.16
(1,902)	1:A:72:PHE:HB3	1:A:87:LEU:H	10	3.14
(1,902)	1:A:72:PHE:HB3	1:A:87:LEU:H	2	3.1
(1,170)	1:A:89:ALA:H	1:A:92:LEU:HB2	9	3.08
(1,1413)	1:A:23:LYS:HE2	1:A:27:GLU:H	5	3.08
(1,1413)	1:A:23:LYS:HE3	1:A:27:GLU:H	5	3.08
(1,1085)	1:A:6:ASN:HA	1:A:32:LYS:H	5	3.08
(1,1085)	1:A:6:ASN:HA	1:A:32:LYS:H	7	3.08
(1,309)	1:A:7:MET:HE1	1:A:84:GLN:HE22	4	3.06
(1,309)	1:A:7:MET:HE2	1:A:84:GLN:HE22	4	3.06
(1,309)	1:A:7:MET:HE3	1:A:84:GLN:HE22	4	3.06
(1,284)	1:A:72:PHE:HB2	1:A:87:LEU:HB2	8	3.04
(1,1229)	1:A:4:LEU:HD21	1:A:84:GLN:HE22	7	3.04
(1,1229)	1:A:4:LEU:HD22	1:A:84:GLN:HE22	7	3.04
(1,1229)	1:A:4:LEU:HD23	1:A:84:GLN:HE22	7	3.04
(1,1413)	1:A:23:LYS:HE2	1:A:27:GLU:H	1	3.03
(1,1413)	1:A:23:LYS:HE3	1:A:27:GLU:H	1	3.03
(1,902)	1:A:72:PHE:HB3	1:A:87:LEU:H	8	3.02

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,315)	1:A:7:MET:HE1	1:A:84:GLN:HE21	3	3.02
(1,315)	1:A:7:MET:HE2	1:A:84:GLN:HE21	3	3.02
(1,315)	1:A:7:MET:HE3	1:A:84:GLN:HE21	3	3.02
(1,1413)	1:A:23:LYS:HE2	1:A:27:GLU:H	8	3.01
(1,1413)	1:A:23:LYS:HE3	1:A:27:GLU:H	8	3.01
(1,1413)	1:A:23:LYS:HE2	1:A:27:GLU:H	4	2.99
(1,1413)	1:A:23:LYS:HE3	1:A:27:GLU:H	4	2.99
(1,902)	1:A:72:PHE:HB3	1:A:87:LEU:H	6	2.97
(1,902)	1:A:72:PHE:HB3	1:A:87:LEU:H	9	2.97
(1,331)	1:A:72:PHE:HB3	1:A:87:LEU:HA	10	2.97
(1,1234)	1:A:4:LEU:HD21	1:A:84:GLN:HE21	3	2.97
(1,1234)	1:A:4:LEU:HD22	1:A:84:GLN:HE21	3	2.97
(1,1234)	1:A:4:LEU:HD23	1:A:84:GLN:HE21	3	2.97
(1,1327)	1:A:7:MET:HE1	1:A:84:GLN:HE21	5	2.96
(1,1327)	1:A:7:MET:HE1	1:A:84:GLN:HE22	5	2.96
(1,1327)	1:A:7:MET:HE2	1:A:84:GLN:HE21	5	2.96
(1,1327)	1:A:7:MET:HE2	1:A:84:GLN:HE22	5	2.96
(1,1327)	1:A:7:MET:HE3	1:A:84:GLN:HE21	5	2.96
(1,1327)	1:A:7:MET:HE3	1:A:84:GLN:HE22	5	2.96
(1,1085)	1:A:6:ASN:HA	1:A:32:LYS:H	3	2.96
(1,1085)	1:A:6:ASN:HA	1:A:32:LYS:H	10	2.96
(1,902)	1:A:72:PHE:HB3	1:A:87:LEU:H	7	2.95
(1,1543)	1:A:72:PHE:HB2	1:A:87:LEU:HB2	10	2.94
(1,1543)	1:A:72:PHE:HB2	1:A:87:LEU:HB3	10	2.94
(1,285)	1:A:72:PHE:HB2	1:A:87:LEU:HB3	9	2.92
(1,315)	1:A:7:MET:HE1	1:A:84:GLN:HE21	9	2.91
(1,315)	1:A:7:MET:HE2	1:A:84:GLN:HE21	9	2.91
(1,315)	1:A:7:MET:HE3	1:A:84:GLN:HE21	9	2.91
(1,1319)	1:A:4:LEU:HD21	1:A:84:GLN:HE21	3	2.88
(1,1319)	1:A:4:LEU:HD21	1:A:84:GLN:HE22	3	2.88
(1,1319)	1:A:4:LEU:HD22	1:A:84:GLN:HE21	3	2.88
(1,1319)	1:A:4:LEU:HD22	1:A:84:GLN:HE22	3	2.88
(1,1319)	1:A:4:LEU:HD23	1:A:84:GLN:HE21	3	2.88
(1,1319)	1:A:4:LEU:HD23	1:A:84:GLN:HE22	3	2.88
(1,315)	1:A:7:MET:HE1	1:A:84:GLN:HE21	4	2.86
(1,315)	1:A:7:MET:HE2	1:A:84:GLN:HE21	4	2.86
(1,315)	1:A:7:MET:HE3	1:A:84:GLN:HE21	4	2.86
(1,902)	1:A:72:PHE:HB3	1:A:87:LEU:H	3	2.85
(1,331)	1:A:72:PHE:HB3	1:A:87:LEU:HA	6	2.85
(1,1413)	1:A:23:LYS:HE2	1:A:27:GLU:H	3	2.85
(1,1413)	1:A:23:LYS:HE3	1:A:27:GLU:H	3	2.85
(1,284)	1:A:72:PHE:HB2	1:A:87:LEU:HB2	2	2.84

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1229)	1:A:4:LEU:HD21	1:A:84:GLN:HE22	9	2.84
(1,1229)	1:A:4:LEU:HD22	1:A:84:GLN:HE22	9	2.84
(1,1229)	1:A:4:LEU:HD23	1:A:84:GLN:HE22	9	2.84
(1,739)	1:A:16:SER:H	1:A:45:SER:H	5	2.79
(1,309)	1:A:7:MET:HE1	1:A:84:GLN:HE22	7	2.78
(1,309)	1:A:7:MET:HE2	1:A:84:GLN:HE22	7	2.78
(1,309)	1:A:7:MET:HE3	1:A:84:GLN:HE22	7	2.78
(1,309)	1:A:7:MET:HE1	1:A:84:GLN:HE22	9	2.77
(1,309)	1:A:7:MET:HE2	1:A:84:GLN:HE22	9	2.77
(1,309)	1:A:7:MET:HE3	1:A:84:GLN:HE22	9	2.77
(1,170)	1:A:89:ALA:H	1:A:92:LEU:HB2	5	2.76
(1,773)	1:A:15:LEU:HA	1:A:45:SER:H	5	2.74
(1,1229)	1:A:4:LEU:HD21	1:A:84:GLN:HE22	3	2.74
(1,1229)	1:A:4:LEU:HD22	1:A:84:GLN:HE22	3	2.74
(1,1229)	1:A:4:LEU:HD23	1:A:84:GLN:HE22	3	2.74
(1,1085)	1:A:6:ASN:HA	1:A:32:LYS:H	2	2.74
(1,1413)	1:A:23:LYS:HE2	1:A:27:GLU:H	10	2.73
(1,1413)	1:A:23:LYS:HE3	1:A:27:GLU:H	10	2.73
(1,1085)	1:A:6:ASN:HA	1:A:32:LYS:H	6	2.72
(1,170)	1:A:89:ALA:H	1:A:92:LEU:HB2	6	2.71
(1,1319)	1:A:4:LEU:HD21	1:A:84:GLN:HE21	9	2.71
(1,1319)	1:A:4:LEU:HD21	1:A:84:GLN:HE22	9	2.71
(1,1319)	1:A:4:LEU:HD22	1:A:84:GLN:HE21	9	2.71
(1,1319)	1:A:4:LEU:HD22	1:A:84:GLN:HE22	9	2.71
(1,1319)	1:A:4:LEU:HD23	1:A:84:GLN:HE21	9	2.71
(1,1319)	1:A:4:LEU:HD23	1:A:84:GLN:HE22	9	2.71
(1,1085)	1:A:6:ASN:HA	1:A:32:LYS:H	4	2.7
(1,902)	1:A:72:PHE:HB3	1:A:87:LEU:H	1	2.66
(1,1413)	1:A:23:LYS:HE2	1:A:27:GLU:H	7	2.66
(1,1413)	1:A:23:LYS:HE3	1:A:27:GLU:H	7	2.66
(1,1413)	1:A:23:LYS:HE2	1:A:27:GLU:H	6	2.64
(1,1413)	1:A:23:LYS:HE3	1:A:27:GLU:H	6	2.64
(1,331)	1:A:72:PHE:HB3	1:A:87:LEU:HA	2	2.63
(1,1327)	1:A:7:MET:HE1	1:A:84:GLN:HE21	8	2.62
(1,1327)	1:A:7:MET:HE1	1:A:84:GLN:HE22	8	2.62
(1,1327)	1:A:7:MET:HE2	1:A:84:GLN:HE21	8	2.62
(1,1327)	1:A:7:MET:HE2	1:A:84:GLN:HE22	8	2.62
(1,1327)	1:A:7:MET:HE3	1:A:84:GLN:HE21	8	2.62
(1,1327)	1:A:7:MET:HE3	1:A:84:GLN:HE22	8	2.62
(1,1327)	1:A:7:MET:HE1	1:A:84:GLN:HE21	10	2.62
(1,1327)	1:A:7:MET:HE1	1:A:84:GLN:HE22	10	2.62
(1,1327)	1:A:7:MET:HE2	1:A:84:GLN:HE21	10	2.62

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1327)	1:A:7:MET:HE2	1:A:84:GLN:HE22	10	2.62
(1,1327)	1:A:7:MET:HE3	1:A:84:GLN:HE21	10	2.62
(1,1327)	1:A:7:MET:HE3	1:A:84:GLN:HE22	10	2.62
(1,331)	1:A:72:PHE:HB3	1:A:87:LEU:HA	8	2.61
(1,285)	1:A:72:PHE:HB2	1:A:87:LEU:HB3	6	2.6
(1,739)	1:A:16:SER:H	1:A:45:SER:H	9	2.56
(1,331)	1:A:72:PHE:HB3	1:A:87:LEU:HA	9	2.53
(1,315)	1:A:7:MET:HE1	1:A:84:GLN:HE21	1	2.53
(1,315)	1:A:7:MET:HE2	1:A:84:GLN:HE21	1	2.53
(1,315)	1:A:7:MET:HE3	1:A:84:GLN:HE21	1	2.53
(1,902)	1:A:72:PHE:HB3	1:A:87:LEU:H	5	2.52
(1,1234)	1:A:4:LEU:HD21	1:A:84:GLN:HE21	9	2.5
(1,1234)	1:A:4:LEU:HD22	1:A:84:GLN:HE21	9	2.5
(1,1234)	1:A:4:LEU:HD23	1:A:84:GLN:HE21	9	2.5
(1,284)	1:A:72:PHE:HB2	1:A:87:LEU:HB2	7	2.48
(1,1543)	1:A:72:PHE:HB2	1:A:87:LEU:HB2	9	2.43
(1,1543)	1:A:72:PHE:HB2	1:A:87:LEU:HB3	9	2.43
(1,309)	1:A:7:MET:HE1	1:A:84:GLN:HE22	1	2.41
(1,309)	1:A:7:MET:HE2	1:A:84:GLN:HE22	1	2.41
(1,309)	1:A:7:MET:HE3	1:A:84:GLN:HE22	1	2.41
(1,1414)	1:A:23:LYS:HE2	1:A:27:GLU:HG3	4	2.4
(1,1414)	1:A:23:LYS:HE3	1:A:27:GLU:HG3	4	2.4
(1,331)	1:A:72:PHE:HB3	1:A:87:LEU:HA	7	2.38
(1,284)	1:A:72:PHE:HB2	1:A:87:LEU:HB2	1	2.37
(1,902)	1:A:72:PHE:HB3	1:A:87:LEU:H	4	2.36
(1,739)	1:A:16:SER:H	1:A:45:SER:H	3	2.35
(1,1413)	1:A:23:LYS:HE2	1:A:27:GLU:H	2	2.35
(1,1413)	1:A:23:LYS:HE3	1:A:27:GLU:H	2	2.35
(1,284)	1:A:72:PHE:HB2	1:A:87:LEU:HB2	3	2.33
(1,1623)	1:A:99:VAL:H	1:A:100:LYS:HD2	3	2.31
(1,1623)	1:A:99:VAL:H	1:A:100:LYS:HD3	3	2.31
(1,1623)	1:A:99:VAL:H	1:A:100:LYS:HD2	5	2.28
(1,1623)	1:A:99:VAL:H	1:A:100:LYS:HD3	5	2.28
(1,331)	1:A:72:PHE:HB3	1:A:87:LEU:HA	1	2.25
(1,331)	1:A:72:PHE:HB3	1:A:87:LEU:HA	3	2.25
(1,282)	1:A:72:PHE:HB2	1:A:86:LEU:HB2	8	2.25
(1,1327)	1:A:7:MET:HE1	1:A:84:GLN:HE21	3	2.21
(1,1327)	1:A:7:MET:HE1	1:A:84:GLN:HE22	3	2.21
(1,1327)	1:A:7:MET:HE2	1:A:84:GLN:HE21	3	2.21
(1,1327)	1:A:7:MET:HE2	1:A:84:GLN:HE22	3	2.21
(1,1327)	1:A:7:MET:HE3	1:A:84:GLN:HE21	3	2.21
(1,1327)	1:A:7:MET:HE3	1:A:84:GLN:HE22	3	2.21

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,285)	1:A:72:PHE:HB2	1:A:87:LEU:HB3	8	2.19
(1,284)	1:A:72:PHE:HB2	1:A:87:LEU:HB2	5	2.19
(1,1414)	1:A:23:LYS:HE2	1:A:27:GLU:HG3	5	2.18
(1,1414)	1:A:23:LYS:HE3	1:A:27:GLU:HG3	5	2.18
(1,282)	1:A:72:PHE:HB2	1:A:86:LEU:HB2	3	2.16
(1,369)	1:A:76:VAL:HA	1:A:83:LEU:HA	6	2.15
(1,1414)	1:A:23:LYS:HE2	1:A:27:GLU:HG3	1	2.15
(1,1414)	1:A:23:LYS:HE3	1:A:27:GLU:HG3	1	2.15
(1,284)	1:A:72:PHE:HB2	1:A:87:LEU:HB2	4	2.13
(1,1327)	1:A:7:MET:HE1	1:A:84:GLN:HE21	7	2.12
(1,1327)	1:A:7:MET:HE1	1:A:84:GLN:HE22	7	2.12
(1,1327)	1:A:7:MET:HE2	1:A:84:GLN:HE21	7	2.12
(1,1327)	1:A:7:MET:HE2	1:A:84:GLN:HE22	7	2.12
(1,1327)	1:A:7:MET:HE3	1:A:84:GLN:HE21	7	2.12
(1,1327)	1:A:7:MET:HE3	1:A:84:GLN:HE22	7	2.12
(1,1177)	1:A:52:LYS:HE2	1:A:54:SER:H	9	2.12
(1,282)	1:A:72:PHE:HB2	1:A:86:LEU:HB2	2	2.09
(1,1327)	1:A:7:MET:HE1	1:A:84:GLN:HE21	4	2.09
(1,1327)	1:A:7:MET:HE1	1:A:84:GLN:HE22	4	2.09
(1,1327)	1:A:7:MET:HE2	1:A:84:GLN:HE21	4	2.09
(1,1327)	1:A:7:MET:HE2	1:A:84:GLN:HE22	4	2.09
(1,1327)	1:A:7:MET:HE3	1:A:84:GLN:HE21	4	2.09
(1,1327)	1:A:7:MET:HE3	1:A:84:GLN:HE22	4	2.09
(1,155)	1:A:68:VAL:H	1:A:92:LEU:HD21	6	2.08
(1,155)	1:A:68:VAL:H	1:A:92:LEU:HD22	6	2.08
(1,155)	1:A:68:VAL:H	1:A:92:LEU:HD23	6	2.08
(1,369)	1:A:76:VAL:HA	1:A:83:LEU:HA	8	2.06
(1,1543)	1:A:72:PHE:HB2	1:A:87:LEU:HB2	6	2.06
(1,1543)	1:A:72:PHE:HB2	1:A:87:LEU:HB3	6	2.06
(1,331)	1:A:72:PHE:HB3	1:A:87:LEU:HA	5	2.04
(1,1414)	1:A:23:LYS:HE2	1:A:27:GLU:HG3	10	2.04
(1,1414)	1:A:23:LYS:HE3	1:A:27:GLU:HG3	10	2.04
(1,901)	1:A:72:PHE:HB2	1:A:87:LEU:H	10	2.01
(1,331)	1:A:72:PHE:HB3	1:A:87:LEU:HA	4	2.01
(1,901)	1:A:72:PHE:HB2	1:A:87:LEU:H	6	2.0
(1,155)	1:A:68:VAL:H	1:A:92:LEU:HD21	5	1.99
(1,155)	1:A:68:VAL:H	1:A:92:LEU:HD22	5	1.99
(1,155)	1:A:68:VAL:H	1:A:92:LEU:HD23	5	1.99
(1,1327)	1:A:7:MET:HE1	1:A:84:GLN:HE21	9	1.99
(1,1327)	1:A:7:MET:HE1	1:A:84:GLN:HE22	9	1.99
(1,1327)	1:A:7:MET:HE2	1:A:84:GLN:HE21	9	1.99
(1,1327)	1:A:7:MET:HE2	1:A:84:GLN:HE22	9	1.99

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1327)	1:A:7:MET:HE3	1:A:84:GLN:HE21	9	1.99
(1,1327)	1:A:7:MET:HE3	1:A:84:GLN:HE22	9	1.99
(1,765)	1:A:38:ASN:HD22	1:A:98:GLU:H	1	1.98
(1,739)	1:A:16:SER:H	1:A:45:SER:H	7	1.97
(1,285)	1:A:72:PHE:HB2	1:A:87:LEU:HB3	2	1.94
(1,285)	1:A:72:PHE:HB2	1:A:87:LEU:HB3	7	1.94
(1,282)	1:A:72:PHE:HB2	1:A:86:LEU:HB2	6	1.94
(1,739)	1:A:16:SER:H	1:A:45:SER:H	1	1.93
(1,1222)	1:A:5:SER:H	1:A:7:MET:HB3	5	1.93
(1,901)	1:A:72:PHE:HB2	1:A:87:LEU:H	8	1.92
(1,282)	1:A:72:PHE:HB2	1:A:86:LEU:HB2	9	1.92
(1,1414)	1:A:23:LYS:HE2	1:A:27:GLU:HG3	8	1.91
(1,1414)	1:A:23:LYS:HE3	1:A:27:GLU:HG3	8	1.91
(1,369)	1:A:76:VAL:HA	1:A:83:LEU:HA	1	1.9
(1,282)	1:A:72:PHE:HB2	1:A:86:LEU:HB2	1	1.9
(1,1414)	1:A:23:LYS:HE2	1:A:27:GLU:HG3	3	1.9
(1,1414)	1:A:23:LYS:HE3	1:A:27:GLU:HG3	3	1.9
(1,901)	1:A:72:PHE:HB2	1:A:87:LEU:H	2	1.89
(1,155)	1:A:68:VAL:H	1:A:92:LEU:HD21	9	1.89
(1,155)	1:A:68:VAL:H	1:A:92:LEU:HD22	9	1.89
(1,155)	1:A:68:VAL:H	1:A:92:LEU:HD23	9	1.89
(1,1222)	1:A:5:SER:H	1:A:7:MET:HB3	2	1.89
(1,282)	1:A:72:PHE:HB2	1:A:86:LEU:HB2	7	1.88
(1,1178)	1:A:52:LYS:HE3	1:A:54:SER:H	6	1.87
(1,1108)	1:A:49:GLU:HB3	1:A:54:SER:H	2	1.87
(1,765)	1:A:38:ASN:HD22	1:A:98:GLU:H	5	1.86
(1,739)	1:A:16:SER:H	1:A:45:SER:H	10	1.86
(1,282)	1:A:72:PHE:HB2	1:A:86:LEU:HB2	10	1.86
(1,765)	1:A:38:ASN:HD22	1:A:98:GLU:H	10	1.85
(1,285)	1:A:72:PHE:HB2	1:A:87:LEU:HB3	3	1.83
(1,765)	1:A:38:ASN:HD22	1:A:98:GLU:H	6	1.81
(1,1222)	1:A:5:SER:H	1:A:7:MET:HB3	9	1.81
(1,119)	1:A:57:MET:HE1	1:A:92:LEU:HD11	10	1.81
(1,119)	1:A:57:MET:HE1	1:A:92:LEU:HD12	10	1.81
(1,119)	1:A:57:MET:HE1	1:A:92:LEU:HD13	10	1.81
(1,119)	1:A:57:MET:HE2	1:A:92:LEU:HD11	10	1.81
(1,119)	1:A:57:MET:HE2	1:A:92:LEU:HD12	10	1.81
(1,119)	1:A:57:MET:HE2	1:A:92:LEU:HD13	10	1.81
(1,119)	1:A:57:MET:HE3	1:A:92:LEU:HD11	10	1.81
(1,119)	1:A:57:MET:HE3	1:A:92:LEU:HD12	10	1.81
(1,119)	1:A:57:MET:HE3	1:A:92:LEU:HD13	10	1.81
(1,118)	1:A:57:MET:HE1	1:A:92:LEU:HD11	10	1.81

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,118)	1:A:57:MET:HE1	1:A:92:LEU:HD12	10	1.81
(1,118)	1:A:57:MET:HE1	1:A:92:LEU:HD13	10	1.81
(1,118)	1:A:57:MET:HE2	1:A:92:LEU:HD11	10	1.81
(1,118)	1:A:57:MET:HE2	1:A:92:LEU:HD12	10	1.81
(1,118)	1:A:57:MET:HE2	1:A:92:LEU:HD13	10	1.81
(1,118)	1:A:57:MET:HE3	1:A:92:LEU:HD11	10	1.81
(1,118)	1:A:57:MET:HE3	1:A:92:LEU:HD12	10	1.81
(1,118)	1:A:57:MET:HE3	1:A:92:LEU:HD13	10	1.81
(1,1222)	1:A:5:SER:H	1:A:7:MET:HB3	1	1.8
(1,1177)	1:A:52:LYS:HE2	1:A:54:SER:H	3	1.8
(1,155)	1:A:68:VAL:H	1:A:92:LEU:HD21	4	1.78
(1,155)	1:A:68:VAL:H	1:A:92:LEU:HD22	4	1.78
(1,155)	1:A:68:VAL:H	1:A:92:LEU:HD23	4	1.78
(1,285)	1:A:72:PHE:HB2	1:A:87:LEU:HB3	5	1.77
(1,773)	1:A:15:LEU:HA	1:A:45:SER:H	9	1.75
(1,1134)	1:A:91:SER:H	1:A:92:LEU:HB2	3	1.73
(1,901)	1:A:72:PHE:HB2	1:A:87:LEU:H	3	1.72
(1,155)	1:A:68:VAL:H	1:A:92:LEU:HD21	8	1.71
(1,155)	1:A:68:VAL:H	1:A:92:LEU:HD22	8	1.71
(1,155)	1:A:68:VAL:H	1:A:92:LEU:HD23	8	1.71
(1,1543)	1:A:72:PHE:HB2	1:A:87:LEU:HB2	8	1.71
(1,1543)	1:A:72:PHE:HB2	1:A:87:LEU:HB3	8	1.71
(1,1109)	1:A:7:MET:HG2	1:A:32:LYS:H	5	1.71
(1,369)	1:A:76:VAL:HA	1:A:83:LEU:HA	10	1.69
(1,1111)	1:A:7:MET:HB3	1:A:32:LYS:H	7	1.69
(1,369)	1:A:76:VAL:HA	1:A:83:LEU:HA	7	1.68
(1,285)	1:A:72:PHE:HB2	1:A:87:LEU:HB3	1	1.68
(1,1134)	1:A:91:SER:H	1:A:92:LEU:HB2	1	1.68
(1,901)	1:A:72:PHE:HB2	1:A:87:LEU:H	9	1.67
(1,86)	1:A:9:ILE:HD11	1:A:42:LEU:HD21	6	1.67
(1,86)	1:A:9:ILE:HD11	1:A:42:LEU:HD22	6	1.67
(1,86)	1:A:9:ILE:HD11	1:A:42:LEU:HD23	6	1.67
(1,86)	1:A:9:ILE:HD12	1:A:42:LEU:HD21	6	1.67
(1,86)	1:A:9:ILE:HD12	1:A:42:LEU:HD22	6	1.67
(1,86)	1:A:9:ILE:HD12	1:A:42:LEU:HD23	6	1.67
(1,86)	1:A:9:ILE:HD13	1:A:42:LEU:HD21	6	1.67
(1,86)	1:A:9:ILE:HD13	1:A:42:LEU:HD22	6	1.67
(1,86)	1:A:9:ILE:HD13	1:A:42:LEU:HD23	6	1.67
(1,85)	1:A:9:ILE:HD11	1:A:42:LEU:HD21	6	1.67
(1,85)	1:A:9:ILE:HD11	1:A:42:LEU:HD22	6	1.67
(1,85)	1:A:9:ILE:HD11	1:A:42:LEU:HD23	6	1.67
(1,85)	1:A:9:ILE:HD12	1:A:42:LEU:HD21	6	1.67

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,85)	1:A:9:ILE:HD12	1:A:42:LEU:HD22	6	1.67
(1,85)	1:A:9:ILE:HD12	1:A:42:LEU:HD23	6	1.67
(1,85)	1:A:9:ILE:HD13	1:A:42:LEU:HD21	6	1.67
(1,85)	1:A:9:ILE:HD13	1:A:42:LEU:HD22	6	1.67
(1,85)	1:A:9:ILE:HD13	1:A:42:LEU:HD23	6	1.67
(1,1222)	1:A:5:SER:H	1:A:7:MET:HB3	4	1.67
(1,369)	1:A:76:VAL:HA	1:A:83:LEU:HA	5	1.66
(1,155)	1:A:68:VAL:H	1:A:92:LEU:HD21	1	1.66
(1,155)	1:A:68:VAL:H	1:A:92:LEU:HD22	1	1.66
(1,155)	1:A:68:VAL:H	1:A:92:LEU:HD23	1	1.66
(1,1327)	1:A:7:MET:HE1	1:A:84:GLN:HE21	1	1.66
(1,1327)	1:A:7:MET:HE1	1:A:84:GLN:HE22	1	1.66
(1,1327)	1:A:7:MET:HE2	1:A:84:GLN:HE21	1	1.66
(1,1327)	1:A:7:MET:HE2	1:A:84:GLN:HE22	1	1.66
(1,1327)	1:A:7:MET:HE3	1:A:84:GLN:HE21	1	1.66
(1,1327)	1:A:7:MET:HE3	1:A:84:GLN:HE22	1	1.66
(1,1178)	1:A:52:LYS:HE3	1:A:54:SER:H	1	1.66
(1,1108)	1:A:49:GLU:HB3	1:A:54:SER:H	9	1.66
(1,1111)	1:A:7:MET:HB3	1:A:32:LYS:H	8	1.65
(1,227)	1:A:4:LEU:HB3	1:A:30:GLY:HA2	2	1.64
(1,1177)	1:A:52:LYS:HE2	1:A:54:SER:H	7	1.64
(1,1111)	1:A:7:MET:HB3	1:A:32:LYS:H	1	1.64
(1,773)	1:A:15:LEU:HA	1:A:45:SER:H	3	1.63
(1,1109)	1:A:7:MET:HG2	1:A:32:LYS:H	9	1.63
(1,901)	1:A:72:PHE:HB2	1:A:87:LEU:H	7	1.62
(1,1623)	1:A:99:VAL:H	1:A:100:LYS:HD2	2	1.62
(1,1623)	1:A:99:VAL:H	1:A:100:LYS:HD3	2	1.62
(1,282)	1:A:72:PHE:HB2	1:A:86:LEU:HB2	5	1.61
(1,1111)	1:A:7:MET:HB3	1:A:32:LYS:H	5	1.61
(1,773)	1:A:15:LEU:HA	1:A:45:SER:H	7	1.6
(1,739)	1:A:16:SER:H	1:A:45:SER:H	6	1.6
(1,1414)	1:A:23:LYS:HE2	1:A:27:GLU:HG3	6	1.6
(1,1414)	1:A:23:LYS:HE3	1:A:27:GLU:HG3	6	1.6
(1,1134)	1:A:91:SER:H	1:A:92:LEU:HB2	2	1.6
(1,1223)	1:A:5:SER:H	1:A:7:MET:HE1	1	1.59
(1,1223)	1:A:5:SER:H	1:A:7:MET:HE2	1	1.59
(1,1223)	1:A:5:SER:H	1:A:7:MET:HE3	1	1.59
(1,1222)	1:A:5:SER:H	1:A:7:MET:HB3	3	1.59
(1,1177)	1:A:52:LYS:HE2	1:A:54:SER:H	6	1.59
(1,369)	1:A:76:VAL:HA	1:A:83:LEU:HA	2	1.58
(1,1177)	1:A:52:LYS:HE2	1:A:54:SER:H	2	1.57
(1,1134)	1:A:91:SER:H	1:A:92:LEU:HB2	4	1.57

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,901)	1:A:72:PHE:HB2	1:A:87:LEU:H	1	1.56
(1,282)	1:A:72:PHE:HB2	1:A:86:LEU:HB2	4	1.56
(1,1222)	1:A:5:SER:H	1:A:7:MET:HB3	7	1.56
(1,1222)	1:A:5:SER:H	1:A:7:MET:HB3	8	1.56
(1,1134)	1:A:91:SER:H	1:A:92:LEU:HB2	8	1.56
(1,1125)	1:A:83:LEU:HG	1:A:84:GLN:H	8	1.55
(1,285)	1:A:72:PHE:HB2	1:A:87:LEU:HB3	4	1.54
(1,1414)	1:A:23:LYS:HE2	1:A:27:GLU:HG3	7	1.54
(1,1414)	1:A:23:LYS:HE3	1:A:27:GLU:HG3	7	1.54
(1,119)	1:A:57:MET:HE1	1:A:92:LEU:HD11	4	1.54
(1,119)	1:A:57:MET:HE1	1:A:92:LEU:HD12	4	1.54
(1,119)	1:A:57:MET:HE1	1:A:92:LEU:HD13	4	1.54
(1,119)	1:A:57:MET:HE2	1:A:92:LEU:HD11	4	1.54
(1,119)	1:A:57:MET:HE2	1:A:92:LEU:HD12	4	1.54
(1,119)	1:A:57:MET:HE2	1:A:92:LEU:HD13	4	1.54
(1,119)	1:A:57:MET:HE3	1:A:92:LEU:HD11	4	1.54
(1,119)	1:A:57:MET:HE3	1:A:92:LEU:HD12	4	1.54
(1,119)	1:A:57:MET:HE3	1:A:92:LEU:HD13	4	1.54
(1,118)	1:A:57:MET:HE1	1:A:92:LEU:HD11	4	1.54
(1,118)	1:A:57:MET:HE1	1:A:92:LEU:HD12	4	1.54
(1,118)	1:A:57:MET:HE1	1:A:92:LEU:HD13	4	1.54
(1,118)	1:A:57:MET:HE2	1:A:92:LEU:HD11	4	1.54
(1,118)	1:A:57:MET:HE2	1:A:92:LEU:HD12	4	1.54
(1,118)	1:A:57:MET:HE2	1:A:92:LEU:HD13	4	1.54
(1,118)	1:A:57:MET:HE3	1:A:92:LEU:HD11	4	1.54
(1,118)	1:A:57:MET:HE3	1:A:92:LEU:HD12	4	1.54
(1,118)	1:A:57:MET:HE3	1:A:92:LEU:HD13	4	1.54
(1,1111)	1:A:7:MET:HB3	1:A:32:LYS:H	9	1.54
(1,119)	1:A:57:MET:HE1	1:A:92:LEU:HD11	8	1.52
(1,119)	1:A:57:MET:HE1	1:A:92:LEU:HD12	8	1.52
(1,119)	1:A:57:MET:HE1	1:A:92:LEU:HD13	8	1.52
(1,119)	1:A:57:MET:HE2	1:A:92:LEU:HD11	8	1.52
(1,119)	1:A:57:MET:HE2	1:A:92:LEU:HD12	8	1.52
(1,119)	1:A:57:MET:HE2	1:A:92:LEU:HD13	8	1.52
(1,119)	1:A:57:MET:HE3	1:A:92:LEU:HD11	8	1.52
(1,119)	1:A:57:MET:HE3	1:A:92:LEU:HD12	8	1.52
(1,119)	1:A:57:MET:HE3	1:A:92:LEU:HD13	8	1.52
(1,118)	1:A:57:MET:HE1	1:A:92:LEU:HD11	8	1.52
(1,118)	1:A:57:MET:HE1	1:A:92:LEU:HD12	8	1.52
(1,118)	1:A:57:MET:HE1	1:A:92:LEU:HD13	8	1.52
(1,118)	1:A:57:MET:HE2	1:A:92:LEU:HD11	8	1.52
(1,118)	1:A:57:MET:HE2	1:A:92:LEU:HD12	8	1.52

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,118)	1:A:57:MET:HE2	1:A:92:LEU:HD13	8	1.52
(1,118)	1:A:57:MET:HE3	1:A:92:LEU:HD11	8	1.52
(1,118)	1:A:57:MET:HE3	1:A:92:LEU:HD12	8	1.52
(1,118)	1:A:57:MET:HE3	1:A:92:LEU:HD13	8	1.52
(1,1414)	1:A:23:LYS:HE2	1:A:27:GLU:HG3	2	1.51
(1,1414)	1:A:23:LYS:HE3	1:A:27:GLU:HG3	2	1.51
(1,1223)	1:A:5:SER:H	1:A:7:MET:HE1	4	1.51
(1,1223)	1:A:5:SER:H	1:A:7:MET:HE2	4	1.51
(1,1223)	1:A:5:SER:H	1:A:7:MET:HE3	4	1.51
(1,119)	1:A:57:MET:HE1	1:A:92:LEU:HD11	6	1.51
(1,119)	1:A:57:MET:HE1	1:A:92:LEU:HD12	6	1.51
(1,119)	1:A:57:MET:HE1	1:A:92:LEU:HD13	6	1.51
(1,119)	1:A:57:MET:HE2	1:A:92:LEU:HD11	6	1.51
(1,119)	1:A:57:MET:HE2	1:A:92:LEU:HD12	6	1.51
(1,119)	1:A:57:MET:HE2	1:A:92:LEU:HD13	6	1.51
(1,119)	1:A:57:MET:HE3	1:A:92:LEU:HD11	6	1.51
(1,119)	1:A:57:MET:HE3	1:A:92:LEU:HD12	6	1.51
(1,119)	1:A:57:MET:HE3	1:A:92:LEU:HD13	6	1.51
(1,118)	1:A:57:MET:HE1	1:A:92:LEU:HD11	6	1.51
(1,118)	1:A:57:MET:HE1	1:A:92:LEU:HD12	6	1.51
(1,118)	1:A:57:MET:HE1	1:A:92:LEU:HD13	6	1.51
(1,118)	1:A:57:MET:HE2	1:A:92:LEU:HD11	6	1.51
(1,118)	1:A:57:MET:HE2	1:A:92:LEU:HD12	6	1.51
(1,118)	1:A:57:MET:HE2	1:A:92:LEU:HD13	6	1.51
(1,118)	1:A:57:MET:HE3	1:A:92:LEU:HD11	6	1.51
(1,118)	1:A:57:MET:HE3	1:A:92:LEU:HD12	6	1.51
(1,118)	1:A:57:MET:HE3	1:A:92:LEU:HD13	6	1.51
(1,1543)	1:A:72:PHE:HB2	1:A:87:LEU:HB2	2	1.5
(1,1543)	1:A:72:PHE:HB2	1:A:87:LEU:HB3	2	1.5
(1,1222)	1:A:5:SER:H	1:A:7:MET:HB3	10	1.5
(1,1125)	1:A:83:LEU:HG	1:A:84:GLN:H	10	1.5
(1,1111)	1:A:7:MET:HB3	1:A:32:LYS:H	3	1.5
(1,369)	1:A:76:VAL:HA	1:A:83:LEU:HA	4	1.49
(1,1178)	1:A:52:LYS:HE3	1:A:54:SER:H	9	1.49
(1,1134)	1:A:91:SER:H	1:A:92:LEU:HB2	7	1.49
(1,1177)	1:A:52:LYS:HE2	1:A:54:SER:H	4	1.48
(1,1134)	1:A:91:SER:H	1:A:92:LEU:HB2	10	1.48
(1,739)	1:A:16:SER:H	1:A:45:SER:H	2	1.47
(1,155)	1:A:68:VAL:H	1:A:92:LEU:HD21	2	1.47
(1,155)	1:A:68:VAL:H	1:A:92:LEU:HD22	2	1.47
(1,155)	1:A:68:VAL:H	1:A:92:LEU:HD23	2	1.47
(1,155)	1:A:68:VAL:H	1:A:92:LEU:HD21	3	1.47

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,155)	1:A:68:VAL:H	1:A:92:LEU:HD22	3	1.47
(1,155)	1:A:68:VAL:H	1:A:92:LEU:HD23	3	1.47
(1,1413)	1:A:23:LYS:HE2	1:A:27:GLU:H	9	1.45
(1,1413)	1:A:23:LYS:HE3	1:A:27:GLU:H	9	1.45
(1,1109)	1:A:7:MET:HG2	1:A:32:LYS:H	7	1.45
(1,1060)	1:A:6:ASN:H	1:A:32:LYS:H	7	1.44
(1,739)	1:A:16:SER:H	1:A:45:SER:H	8	1.43
(1,1125)	1:A:83:LEU:HG	1:A:84:GLN:H	6	1.43
(1,769)	1:A:15:LEU:HA	1:A:70:GLU:H	5	1.42
(1,1259)	1:A:38:ASN:HD22	1:A:96:GLY:H	1	1.42
(1,1144)	1:A:4:LEU:HD11	1:A:32:LYS:H	5	1.4
(1,1144)	1:A:4:LEU:HD12	1:A:32:LYS:H	5	1.4
(1,1144)	1:A:4:LEU:HD13	1:A:32:LYS:H	5	1.4
(1,614)	1:A:67:VAL:H	1:A:96:GLY:H	6	1.39
(1,1543)	1:A:72:PHE:HB2	1:A:87:LEU:HB2	7	1.39
(1,1543)	1:A:72:PHE:HB2	1:A:87:LEU:HB3	7	1.39
(1,1109)	1:A:7:MET:HG2	1:A:32:LYS:H	2	1.39
(1,1069)	1:A:5:SER:H	1:A:32:LYS:H	10	1.39
(1,773)	1:A:15:LEU:HA	1:A:45:SER:H	10	1.38
(1,287)	1:A:53:MET:HE1	1:A:61:LYS:HE2	8	1.38
(1,287)	1:A:53:MET:HE2	1:A:61:LYS:HE2	8	1.38
(1,287)	1:A:53:MET:HE3	1:A:61:LYS:HE2	8	1.38
(1,1111)	1:A:7:MET:HB3	1:A:32:LYS:H	10	1.38
(1,369)	1:A:76:VAL:HA	1:A:83:LEU:HA	3	1.37
(1,227)	1:A:4:LEU:HB3	1:A:30:GLY:HA2	3	1.37
(1,1223)	1:A:5:SER:H	1:A:7:MET:HE1	10	1.37
(1,1223)	1:A:5:SER:H	1:A:7:MET:HE2	10	1.37
(1,1223)	1:A:5:SER:H	1:A:7:MET:HE3	10	1.37
(1,119)	1:A:57:MET:HE1	1:A:92:LEU:HD11	1	1.37
(1,119)	1:A:57:MET:HE1	1:A:92:LEU:HD12	1	1.37
(1,119)	1:A:57:MET:HE1	1:A:92:LEU:HD13	1	1.37
(1,119)	1:A:57:MET:HE2	1:A:92:LEU:HD11	1	1.37
(1,119)	1:A:57:MET:HE2	1:A:92:LEU:HD12	1	1.37
(1,119)	1:A:57:MET:HE2	1:A:92:LEU:HD13	1	1.37
(1,119)	1:A:57:MET:HE3	1:A:92:LEU:HD11	1	1.37
(1,119)	1:A:57:MET:HE3	1:A:92:LEU:HD12	1	1.37
(1,119)	1:A:57:MET:HE3	1:A:92:LEU:HD13	1	1.37
(1,118)	1:A:57:MET:HE1	1:A:92:LEU:HD11	1	1.37
(1,118)	1:A:57:MET:HE1	1:A:92:LEU:HD12	1	1.37
(1,118)	1:A:57:MET:HE1	1:A:92:LEU:HD13	1	1.37
(1,118)	1:A:57:MET:HE2	1:A:92:LEU:HD11	1	1.37
(1,118)	1:A:57:MET:HE2	1:A:92:LEU:HD12	1	1.37

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,118)	1:A:57:MET:HE2	1:A:92:LEU:HD13	1	1.37
(1,118)	1:A:57:MET:HE3	1:A:92:LEU:HD11	1	1.37
(1,118)	1:A:57:MET:HE3	1:A:92:LEU:HD12	1	1.37
(1,118)	1:A:57:MET:HE3	1:A:92:LEU:HD13	1	1.37
(1,901)	1:A:72:PHE:HB2	1:A:87:LEU:H	5	1.36
(1,82)	1:A:28:LYS:HG3	1:A:29:LEU:HG	8	1.36
(1,1223)	1:A:5:SER:H	1:A:7:MET:HE1	3	1.36
(1,1223)	1:A:5:SER:H	1:A:7:MET:HE2	3	1.36
(1,1223)	1:A:5:SER:H	1:A:7:MET:HE3	3	1.36
(1,1069)	1:A:5:SER:H	1:A:32:LYS:H	6	1.36
(1,634)	1:A:69:CYS:HB2	1:A:92:LEU:H	9	1.35
(1,614)	1:A:67:VAL:H	1:A:96:GLY:H	8	1.35
(1,227)	1:A:4:LEU:HB3	1:A:30:GLY:HA2	7	1.35
(1,1060)	1:A:6:ASN:H	1:A:32:LYS:H	9	1.35
(1,227)	1:A:4:LEU:HB3	1:A:30:GLY:HA2	10	1.34
(1,1178)	1:A:52:LYS:HE3	1:A:54:SER:H	8	1.34
(1,1108)	1:A:49:GLU:HB3	1:A:54:SER:H	8	1.34
(1,227)	1:A:4:LEU:HB3	1:A:30:GLY:HA2	9	1.33
(1,1623)	1:A:99:VAL:H	1:A:100:LYS:HD2	1	1.33
(1,1623)	1:A:99:VAL:H	1:A:100:LYS:HD3	1	1.33
(1,1300)	1:A:28:LYS:HG3	1:A:30:GLY:H	10	1.33
(1,1178)	1:A:52:LYS:HE3	1:A:54:SER:H	2	1.33
(1,1178)	1:A:52:LYS:HE3	1:A:54:SER:H	10	1.33
(1,1223)	1:A:5:SER:H	1:A:7:MET:HE1	7	1.32
(1,1223)	1:A:5:SER:H	1:A:7:MET:HE2	7	1.32
(1,1223)	1:A:5:SER:H	1:A:7:MET:HE3	7	1.32
(1,1048)	1:A:4:LEU:HD11	1:A:7:MET:H	10	1.32
(1,1048)	1:A:4:LEU:HD12	1:A:7:MET:H	10	1.32
(1,1048)	1:A:4:LEU:HD13	1:A:7:MET:H	10	1.32
(1,773)	1:A:15:LEU:HA	1:A:45:SER:H	6	1.31
(1,408)	1:A:72:PHE:HA	1:A:87:LEU:HA	10	1.31
(1,1259)	1:A:38:ASN:HD22	1:A:96:GLY:H	3	1.31
(1,1300)	1:A:28:LYS:HG3	1:A:30:GLY:H	9	1.3
(1,1109)	1:A:7:MET:HG2	1:A:32:LYS:H	3	1.3
(1,1300)	1:A:28:LYS:HG3	1:A:30:GLY:H	4	1.29
(1,1223)	1:A:5:SER:H	1:A:7:MET:HE1	9	1.29
(1,1223)	1:A:5:SER:H	1:A:7:MET:HE2	9	1.29
(1,1223)	1:A:5:SER:H	1:A:7:MET:HE3	9	1.29
(1,1222)	1:A:5:SER:H	1:A:7:MET:HB3	6	1.29
(1,901)	1:A:72:PHE:HB2	1:A:87:LEU:H	4	1.28
(1,1543)	1:A:72:PHE:HB2	1:A:87:LEU:HB2	3	1.28
(1,1543)	1:A:72:PHE:HB2	1:A:87:LEU:HB3	3	1.28

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1300)	1:A:28:LYS:HG3	1:A:30:GLY:H	6	1.28
(1,1300)	1:A:28:LYS:HG3	1:A:30:GLY:H	8	1.28
(1,1259)	1:A:38:ASN:HD22	1:A:96:GLY:H	6	1.28
(1,1069)	1:A:5:SER:H	1:A:32:LYS:H	9	1.28
(1,1060)	1:A:6:ASN:H	1:A:32:LYS:H	1	1.28
(1,1060)	1:A:6:ASN:H	1:A:32:LYS:H	3	1.28
(1,1048)	1:A:4:LEU:HD11	1:A:7:MET:H	2	1.28
(1,1048)	1:A:4:LEU:HD12	1:A:7:MET:H	2	1.28
(1,1048)	1:A:4:LEU:HD13	1:A:7:MET:H	2	1.28
(1,614)	1:A:67:VAL:H	1:A:96:GLY:H	4	1.27
(1,1550)	1:A:74:GLN:HA	1:A:74:GLN:HE21	5	1.27
(1,1550)	1:A:74:GLN:HA	1:A:74:GLN:HE22	5	1.27
(1,1300)	1:A:28:LYS:HG3	1:A:30:GLY:H	3	1.27
(1,1259)	1:A:38:ASN:HD22	1:A:96:GLY:H	2	1.27
(1,1223)	1:A:5:SER:H	1:A:7:MET:HE1	8	1.27
(1,1223)	1:A:5:SER:H	1:A:7:MET:HE2	8	1.27
(1,1223)	1:A:5:SER:H	1:A:7:MET:HE3	8	1.27
(1,1177)	1:A:52:LYS:HE2	1:A:54:SER:H	5	1.27
(1,802)	1:A:53:MET:HE1	1:A:58:GLU:H	4	1.26
(1,802)	1:A:53:MET:HE2	1:A:58:GLU:H	4	1.26
(1,802)	1:A:53:MET:HE3	1:A:58:GLU:H	4	1.26
(1,1623)	1:A:99:VAL:H	1:A:100:LYS:HD2	9	1.26
(1,1623)	1:A:99:VAL:H	1:A:100:LYS:HD3	9	1.26
(1,1300)	1:A:28:LYS:HG3	1:A:30:GLY:H	1	1.26
(1,1111)	1:A:7:MET:HB3	1:A:32:LYS:H	2	1.26
(1,1109)	1:A:7:MET:HG2	1:A:32:LYS:H	1	1.26
(1,1178)	1:A:52:LYS:HE3	1:A:54:SER:H	3	1.25
(1,1109)	1:A:7:MET:HG2	1:A:32:LYS:H	8	1.25
(1,369)	1:A:76:VAL:HA	1:A:83:LEU:HA	9	1.24
(1,119)	1:A:57:MET:HE1	1:A:92:LEU:HD11	9	1.24
(1,119)	1:A:57:MET:HE1	1:A:92:LEU:HD12	9	1.24
(1,119)	1:A:57:MET:HE1	1:A:92:LEU:HD13	9	1.24
(1,119)	1:A:57:MET:HE2	1:A:92:LEU:HD11	9	1.24
(1,119)	1:A:57:MET:HE2	1:A:92:LEU:HD12	9	1.24
(1,119)	1:A:57:MET:HE2	1:A:92:LEU:HD13	9	1.24
(1,119)	1:A:57:MET:HE3	1:A:92:LEU:HD11	9	1.24
(1,119)	1:A:57:MET:HE3	1:A:92:LEU:HD12	9	1.24
(1,119)	1:A:57:MET:HE3	1:A:92:LEU:HD13	9	1.24
(1,118)	1:A:57:MET:HE1	1:A:92:LEU:HD11	9	1.24
(1,118)	1:A:57:MET:HE1	1:A:92:LEU:HD12	9	1.24
(1,118)	1:A:57:MET:HE1	1:A:92:LEU:HD13	9	1.24
(1,118)	1:A:57:MET:HE2	1:A:92:LEU:HD11	9	1.24

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,118)	1:A:57:MET:HE2	1:A:92:LEU:HD12	9	1.24
(1,118)	1:A:57:MET:HE2	1:A:92:LEU:HD13	9	1.24
(1,118)	1:A:57:MET:HE3	1:A:92:LEU:HD11	9	1.24
(1,118)	1:A:57:MET:HE3	1:A:92:LEU:HD12	9	1.24
(1,118)	1:A:57:MET:HE3	1:A:92:LEU:HD13	9	1.24
(1,1108)	1:A:49:GLU:HB3	1:A:54:SER:H	6	1.24
(1,1048)	1:A:4:LEU:HD11	1:A:7:MET:H	7	1.24
(1,1048)	1:A:4:LEU:HD12	1:A:7:MET:H	7	1.24
(1,1048)	1:A:4:LEU:HD13	1:A:7:MET:H	7	1.24
(1,614)	1:A:67:VAL:H	1:A:96:GLY:H	9	1.23
(1,119)	1:A:57:MET:HE1	1:A:92:LEU:HD11	2	1.23
(1,119)	1:A:57:MET:HE1	1:A:92:LEU:HD12	2	1.23
(1,119)	1:A:57:MET:HE1	1:A:92:LEU:HD13	2	1.23
(1,119)	1:A:57:MET:HE2	1:A:92:LEU:HD11	2	1.23
(1,119)	1:A:57:MET:HE2	1:A:92:LEU:HD12	2	1.23
(1,119)	1:A:57:MET:HE2	1:A:92:LEU:HD13	2	1.23
(1,119)	1:A:57:MET:HE3	1:A:92:LEU:HD11	2	1.23
(1,119)	1:A:57:MET:HE3	1:A:92:LEU:HD12	2	1.23
(1,119)	1:A:57:MET:HE3	1:A:92:LEU:HD13	2	1.23
(1,118)	1:A:57:MET:HE1	1:A:92:LEU:HD11	2	1.23
(1,118)	1:A:57:MET:HE1	1:A:92:LEU:HD12	2	1.23
(1,118)	1:A:57:MET:HE1	1:A:92:LEU:HD13	2	1.23
(1,118)	1:A:57:MET:HE2	1:A:92:LEU:HD11	2	1.23
(1,118)	1:A:57:MET:HE2	1:A:92:LEU:HD12	2	1.23
(1,118)	1:A:57:MET:HE2	1:A:92:LEU:HD13	2	1.23
(1,118)	1:A:57:MET:HE3	1:A:92:LEU:HD11	2	1.23
(1,118)	1:A:57:MET:HE3	1:A:92:LEU:HD12	2	1.23
(1,118)	1:A:57:MET:HE3	1:A:92:LEU:HD13	2	1.23
(1,1116)	1:A:73:LEU:H	1:A:74:GLN:HG2	6	1.23
(1,1116)	1:A:73:LEU:H	1:A:74:GLN:HG2	9	1.23
(1,1111)	1:A:7:MET:HB3	1:A:32:LYS:H	6	1.23
(1,773)	1:A:15:LEU:HA	1:A:45:SER:H	2	1.22
(1,155)	1:A:68:VAL:H	1:A:92:LEU:HD21	10	1.22
(1,155)	1:A:68:VAL:H	1:A:92:LEU:HD22	10	1.22
(1,155)	1:A:68:VAL:H	1:A:92:LEU:HD23	10	1.22
(1,408)	1:A:72:PHE:HA	1:A:87:LEU:HA	6	1.21
(1,1543)	1:A:72:PHE:HB2	1:A:87:LEU:HB2	1	1.21
(1,1543)	1:A:72:PHE:HB2	1:A:87:LEU:HB3	1	1.21
(1,1259)	1:A:38:ASN:HD22	1:A:96:GLY:H	5	1.21
(1,1048)	1:A:4:LEU:HD11	1:A:7:MET:H	3	1.21
(1,1048)	1:A:4:LEU:HD12	1:A:7:MET:H	3	1.21
(1,1048)	1:A:4:LEU:HD13	1:A:7:MET:H	3	1.21

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,773)	1:A:15:LEU:HA	1:A:45:SER:H	1	1.2
(1,1543)	1:A:72:PHE:HB2	1:A:87:LEU:HB2	5	1.2
(1,1543)	1:A:72:PHE:HB2	1:A:87:LEU:HB3	5	1.2
(1,1111)	1:A:7:MET:HB3	1:A:32:LYS:H	4	1.2
(1,1108)	1:A:49:GLU:HB3	1:A:54:SER:H	4	1.2
(1,1300)	1:A:28:LYS:HG3	1:A:30:GLY:H	2	1.19
(1,82)	1:A:28:LYS:HG3	1:A:29:LEU:HG	5	1.18
(1,765)	1:A:38:ASN:HD22	1:A:98:GLU:H	8	1.18
(1,1116)	1:A:73:LEU:H	1:A:74:GLN:HG2	5	1.18
(1,1108)	1:A:49:GLU:HB3	1:A:54:SER:H	3	1.18
(1,82)	1:A:28:LYS:HG3	1:A:29:LEU:HG	3	1.16
(1,82)	1:A:28:LYS:HG3	1:A:29:LEU:HG	4	1.16
(1,1259)	1:A:38:ASN:HD22	1:A:96:GLY:H	8	1.16
(1,82)	1:A:28:LYS:HG3	1:A:29:LEU:HG	6	1.15
(1,769)	1:A:15:LEU:HA	1:A:70:GLU:H	9	1.15
(1,1607)	1:A:91:SER:HB2	1:A:92:LEU:HD11	10	1.15
(1,1607)	1:A:91:SER:HB2	1:A:92:LEU:HD12	10	1.15
(1,1607)	1:A:91:SER:HB2	1:A:92:LEU:HD13	10	1.15
(1,1607)	1:A:91:SER:HB3	1:A:92:LEU:HD11	10	1.15
(1,1607)	1:A:91:SER:HB3	1:A:92:LEU:HD12	10	1.15
(1,1607)	1:A:91:SER:HB3	1:A:92:LEU:HD13	10	1.15
(1,614)	1:A:67:VAL:H	1:A:96:GLY:H	2	1.14
(1,227)	1:A:4:LEU:HB3	1:A:30:GLY:HA2	1	1.13
(1,1264)	1:A:94:SER:HA	1:A:96:GLY:H	5	1.13
(1,1069)	1:A:5:SER:H	1:A:32:LYS:H	8	1.13
(1,614)	1:A:67:VAL:H	1:A:96:GLY:H	3	1.12
(1,408)	1:A:72:PHE:HA	1:A:87:LEU:HA	2	1.12
(1,1300)	1:A:28:LYS:HG3	1:A:30:GLY:H	5	1.12
(1,119)	1:A:57:MET:HE1	1:A:92:LEU:HD11	7	1.12
(1,119)	1:A:57:MET:HE1	1:A:92:LEU:HD12	7	1.12
(1,119)	1:A:57:MET:HE1	1:A:92:LEU:HD13	7	1.12
(1,119)	1:A:57:MET:HE2	1:A:92:LEU:HD11	7	1.12
(1,119)	1:A:57:MET:HE2	1:A:92:LEU:HD12	7	1.12
(1,119)	1:A:57:MET:HE2	1:A:92:LEU:HD13	7	1.12
(1,119)	1:A:57:MET:HE3	1:A:92:LEU:HD11	7	1.12
(1,119)	1:A:57:MET:HE3	1:A:92:LEU:HD12	7	1.12
(1,119)	1:A:57:MET:HE3	1:A:92:LEU:HD13	7	1.12
(1,118)	1:A:57:MET:HE1	1:A:92:LEU:HD11	7	1.12
(1,118)	1:A:57:MET:HE1	1:A:92:LEU:HD12	7	1.12
(1,118)	1:A:57:MET:HE1	1:A:92:LEU:HD13	7	1.12
(1,118)	1:A:57:MET:HE2	1:A:92:LEU:HD11	7	1.12
(1,118)	1:A:57:MET:HE2	1:A:92:LEU:HD12	7	1.12

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,118)	1:A:57:MET:HE2	1:A:92:LEU:HD13	7	1.12
(1,118)	1:A:57:MET:HE3	1:A:92:LEU:HD11	7	1.12
(1,118)	1:A:57:MET:HE3	1:A:92:LEU:HD12	7	1.12
(1,118)	1:A:57:MET:HE3	1:A:92:LEU:HD13	7	1.12
(1,1108)	1:A:49:GLU:HB3	1:A:54:SER:H	7	1.12
(1,619)	1:A:38:ASN:HD21	1:A:97:ALA:H	7	1.11
(1,480)	1:A:49:GLU:HB2	1:A:57:MET:HG3	4	1.11
(1,476)	1:A:69:CYS:HB3	1:A:71:ASP:HA	8	1.11
(1,1259)	1:A:38:ASN:HD22	1:A:96:GLY:H	9	1.11
(1,1259)	1:A:38:ASN:HD22	1:A:96:GLY:H	10	1.11
(1,1069)	1:A:5:SER:H	1:A:32:LYS:H	5	1.11
(1,480)	1:A:49:GLU:HB2	1:A:57:MET:HG3	9	1.1
(1,476)	1:A:69:CYS:HB3	1:A:71:ASP:HA	9	1.1
(1,1060)	1:A:6:ASN:H	1:A:32:LYS:H	8	1.1
(1,582)	1:A:10:LEU:H	1:A:42:LEU:HD21	1	1.09
(1,582)	1:A:10:LEU:H	1:A:42:LEU:HD22	1	1.09
(1,582)	1:A:10:LEU:H	1:A:42:LEU:HD23	1	1.09
(1,1223)	1:A:5:SER:H	1:A:7:MET:HE1	5	1.09
(1,1223)	1:A:5:SER:H	1:A:7:MET:HE2	5	1.09
(1,1223)	1:A:5:SER:H	1:A:7:MET:HE3	5	1.09
(1,1178)	1:A:52:LYS:HE3	1:A:54:SER:H	4	1.09
(1,1125)	1:A:83:LEU:HG	1:A:84:GLN:H	9	1.09
(1,480)	1:A:49:GLU:HB2	1:A:57:MET:HG3	8	1.08
(1,476)	1:A:69:CYS:HB3	1:A:71:ASP:HA	3	1.08
(1,408)	1:A:72:PHE:HA	1:A:87:LEU:HA	9	1.08
(1,157)	1:A:68:VAL:H	1:A:92:LEU:HD21	6	1.08
(1,157)	1:A:68:VAL:H	1:A:92:LEU:HD22	6	1.08
(1,157)	1:A:68:VAL:H	1:A:92:LEU:HD23	6	1.08
(1,156)	1:A:68:VAL:H	1:A:92:LEU:HD21	6	1.08
(1,156)	1:A:68:VAL:H	1:A:92:LEU:HD22	6	1.08
(1,156)	1:A:68:VAL:H	1:A:92:LEU:HD23	6	1.08
(1,802)	1:A:53:MET:HE1	1:A:58:GLU:H	7	1.07
(1,802)	1:A:53:MET:HE2	1:A:58:GLU:H	7	1.07
(1,802)	1:A:53:MET:HE3	1:A:58:GLU:H	7	1.07
(1,634)	1:A:69:CYS:HB2	1:A:92:LEU:H	10	1.07
(1,614)	1:A:67:VAL:H	1:A:96:GLY:H	7	1.06
(1,480)	1:A:49:GLU:HB2	1:A:57:MET:HG3	2	1.06
(1,1607)	1:A:91:SER:HB2	1:A:92:LEU:HD11	7	1.06
(1,1607)	1:A:91:SER:HB2	1:A:92:LEU:HD12	7	1.06
(1,1607)	1:A:91:SER:HB2	1:A:92:LEU:HD13	7	1.06
(1,1607)	1:A:91:SER:HB3	1:A:92:LEU:HD11	7	1.06
(1,1607)	1:A:91:SER:HB3	1:A:92:LEU:HD12	7	1.06

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1607)	1:A:91:SER:HB3	1:A:92:LEU:HD13	7	1.06
(1,1093)	1:A:90:HIS:HB3	1:A:91:SER:H	10	1.06
(1,865)	1:A:18:ASN:HD22	1:A:20:ASP:H	10	1.05
(1,765)	1:A:38:ASN:HD22	1:A:98:GLU:H	2	1.05
(1,614)	1:A:67:VAL:H	1:A:96:GLY:H	1	1.05
(1,480)	1:A:49:GLU:HB2	1:A:57:MET:HG3	7	1.05
(1,1607)	1:A:91:SER:HB2	1:A:92:LEU:HD11	4	1.05
(1,1607)	1:A:91:SER:HB2	1:A:92:LEU:HD12	4	1.05
(1,1607)	1:A:91:SER:HB2	1:A:92:LEU:HD13	4	1.05
(1,1607)	1:A:91:SER:HB3	1:A:92:LEU:HD11	4	1.05
(1,1607)	1:A:91:SER:HB3	1:A:92:LEU:HD12	4	1.05
(1,1607)	1:A:91:SER:HB3	1:A:92:LEU:HD13	4	1.05
(1,1543)	1:A:72:PHE:HB2	1:A:87:LEU:HB2	4	1.05
(1,1543)	1:A:72:PHE:HB2	1:A:87:LEU:HB3	4	1.05
(1,1178)	1:A:52:LYS:HE3	1:A:54:SER:H	5	1.05
(1,802)	1:A:53:MET:HE1	1:A:58:GLU:H	5	1.04
(1,802)	1:A:53:MET:HE2	1:A:58:GLU:H	5	1.04
(1,802)	1:A:53:MET:HE3	1:A:58:GLU:H	5	1.04
(1,614)	1:A:67:VAL:H	1:A:96:GLY:H	10	1.04
(1,476)	1:A:69:CYS:HB3	1:A:71:ASP:HA	1	1.04
(1,1607)	1:A:91:SER:HB2	1:A:92:LEU:HD11	2	1.04
(1,1607)	1:A:91:SER:HB2	1:A:92:LEU:HD12	2	1.04
(1,1607)	1:A:91:SER:HB2	1:A:92:LEU:HD13	2	1.04
(1,1607)	1:A:91:SER:HB3	1:A:92:LEU:HD11	2	1.04
(1,1607)	1:A:91:SER:HB3	1:A:92:LEU:HD12	2	1.04
(1,1607)	1:A:91:SER:HB3	1:A:92:LEU:HD13	2	1.04
(1,1300)	1:A:28:LYS:HG3	1:A:30:GLY:H	7	1.04
(1,1178)	1:A:52:LYS:HE3	1:A:54:SER:H	7	1.04
(1,1177)	1:A:52:LYS:HE2	1:A:54:SER:H	8	1.04
(1,1069)	1:A:5:SER:H	1:A:32:LYS:H	1	1.04
(1,802)	1:A:53:MET:HE1	1:A:58:GLU:H	3	1.03
(1,802)	1:A:53:MET:HE2	1:A:58:GLU:H	3	1.03
(1,802)	1:A:53:MET:HE3	1:A:58:GLU:H	3	1.03
(1,476)	1:A:69:CYS:HB3	1:A:71:ASP:HA	10	1.03
(1,1607)	1:A:91:SER:HB2	1:A:92:LEU:HD11	1	1.03
(1,1607)	1:A:91:SER:HB2	1:A:92:LEU:HD12	1	1.03
(1,1607)	1:A:91:SER:HB2	1:A:92:LEU:HD13	1	1.03
(1,1607)	1:A:91:SER:HB3	1:A:92:LEU:HD11	1	1.03
(1,1607)	1:A:91:SER:HB3	1:A:92:LEU:HD12	1	1.03
(1,1607)	1:A:91:SER:HB3	1:A:92:LEU:HD13	1	1.03
(1,1177)	1:A:52:LYS:HE2	1:A:54:SER:H	10	1.02
(1,582)	1:A:10:LEU:H	1:A:42:LEU:HD21	8	1.01

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,582)	1:A:10:LEU:H	1:A:42:LEU:HD22	8	1.01
(1,582)	1:A:10:LEU:H	1:A:42:LEU:HD23	8	1.01
(1,408)	1:A:72:PHE:HA	1:A:87:LEU:HA	8	1.01
(1,802)	1:A:53:MET:HE1	1:A:58:GLU:H	8	1.0
(1,802)	1:A:53:MET:HE2	1:A:58:GLU:H	8	1.0
(1,802)	1:A:53:MET:HE3	1:A:58:GLU:H	8	1.0
(1,1623)	1:A:99:VAL:H	1:A:100:LYS:HD2	7	1.0
(1,1623)	1:A:99:VAL:H	1:A:100:LYS:HD3	7	1.0
(1,155)	1:A:68:VAL:H	1:A:92:LEU:HD21	7	1.0
(1,155)	1:A:68:VAL:H	1:A:92:LEU:HD22	7	1.0
(1,155)	1:A:68:VAL:H	1:A:92:LEU:HD23	7	1.0
(1,119)	1:A:57:MET:HE1	1:A:92:LEU:HD11	3	1.0
(1,119)	1:A:57:MET:HE1	1:A:92:LEU:HD12	3	1.0
(1,119)	1:A:57:MET:HE1	1:A:92:LEU:HD13	3	1.0
(1,119)	1:A:57:MET:HE2	1:A:92:LEU:HD11	3	1.0
(1,119)	1:A:57:MET:HE2	1:A:92:LEU:HD12	3	1.0
(1,119)	1:A:57:MET:HE2	1:A:92:LEU:HD13	3	1.0
(1,119)	1:A:57:MET:HE3	1:A:92:LEU:HD11	3	1.0
(1,119)	1:A:57:MET:HE3	1:A:92:LEU:HD12	3	1.0
(1,119)	1:A:57:MET:HE3	1:A:92:LEU:HD13	3	1.0
(1,118)	1:A:57:MET:HE1	1:A:92:LEU:HD11	3	1.0
(1,118)	1:A:57:MET:HE1	1:A:92:LEU:HD12	3	1.0
(1,118)	1:A:57:MET:HE1	1:A:92:LEU:HD13	3	1.0
(1,118)	1:A:57:MET:HE2	1:A:92:LEU:HD11	3	1.0
(1,118)	1:A:57:MET:HE2	1:A:92:LEU:HD12	3	1.0
(1,118)	1:A:57:MET:HE2	1:A:92:LEU:HD13	3	1.0
(1,118)	1:A:57:MET:HE3	1:A:92:LEU:HD11	3	1.0
(1,118)	1:A:57:MET:HE3	1:A:92:LEU:HD12	3	1.0
(1,118)	1:A:57:MET:HE3	1:A:92:LEU:HD13	3	1.0
(1,1108)	1:A:49:GLU:HB3	1:A:54:SER:H	1	1.0
(1,1607)	1:A:91:SER:HB2	1:A:92:LEU:HD11	8	0.99
(1,1607)	1:A:91:SER:HB2	1:A:92:LEU:HD12	8	0.99
(1,1607)	1:A:91:SER:HB2	1:A:92:LEU:HD13	8	0.99
(1,1607)	1:A:91:SER:HB3	1:A:92:LEU:HD11	8	0.99
(1,1607)	1:A:91:SER:HB3	1:A:92:LEU:HD12	8	0.99
(1,1607)	1:A:91:SER:HB3	1:A:92:LEU:HD13	8	0.99
(1,157)	1:A:68:VAL:H	1:A:92:LEU:HD21	5	0.99
(1,157)	1:A:68:VAL:H	1:A:92:LEU:HD22	5	0.99
(1,157)	1:A:68:VAL:H	1:A:92:LEU:HD23	5	0.99
(1,156)	1:A:68:VAL:H	1:A:92:LEU:HD21	5	0.99
(1,156)	1:A:68:VAL:H	1:A:92:LEU:HD22	5	0.99
(1,156)	1:A:68:VAL:H	1:A:92:LEU:HD23	5	0.99

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,119)	1:A:57:MET:HE1	1:A:92:LEU:HD11	5	0.98
(1,119)	1:A:57:MET:HE1	1:A:92:LEU:HD12	5	0.98
(1,119)	1:A:57:MET:HE1	1:A:92:LEU:HD13	5	0.98
(1,119)	1:A:57:MET:HE2	1:A:92:LEU:HD11	5	0.98
(1,119)	1:A:57:MET:HE2	1:A:92:LEU:HD12	5	0.98
(1,119)	1:A:57:MET:HE2	1:A:92:LEU:HD13	5	0.98
(1,119)	1:A:57:MET:HE3	1:A:92:LEU:HD11	5	0.98
(1,119)	1:A:57:MET:HE3	1:A:92:LEU:HD12	5	0.98
(1,119)	1:A:57:MET:HE3	1:A:92:LEU:HD13	5	0.98
(1,118)	1:A:57:MET:HE1	1:A:92:LEU:HD11	5	0.98
(1,118)	1:A:57:MET:HE1	1:A:92:LEU:HD12	5	0.98
(1,118)	1:A:57:MET:HE1	1:A:92:LEU:HD13	5	0.98
(1,118)	1:A:57:MET:HE2	1:A:92:LEU:HD11	5	0.98
(1,118)	1:A:57:MET:HE2	1:A:92:LEU:HD12	5	0.98
(1,118)	1:A:57:MET:HE2	1:A:92:LEU:HD13	5	0.98
(1,118)	1:A:57:MET:HE3	1:A:92:LEU:HD11	5	0.98
(1,118)	1:A:57:MET:HE3	1:A:92:LEU:HD12	5	0.98
(1,118)	1:A:57:MET:HE3	1:A:92:LEU:HD13	5	0.98
(1,1048)	1:A:4:LEU:HD11	1:A:7:MET:H	9	0.98
(1,1048)	1:A:4:LEU:HD12	1:A:7:MET:H	9	0.98
(1,1048)	1:A:4:LEU:HD13	1:A:7:MET:H	9	0.98
(1,865)	1:A:18:ASN:HD22	1:A:20:ASP:H	6	0.97
(1,865)	1:A:18:ASN:HD22	1:A:20:ASP:H	7	0.97
(1,480)	1:A:49:GLU:HB2	1:A:57:MET:HG3	3	0.97
(1,227)	1:A:4:LEU:HB3	1:A:30:GLY:HA2	4	0.97
(1,1125)	1:A:83:LEU:HG	1:A:84:GLN:H	1	0.97
(1,82)	1:A:28:LYS:HG3	1:A:29:LEU:HG	1	0.96
(1,408)	1:A:72:PHE:HA	1:A:87:LEU:HA	3	0.96
(1,1223)	1:A:5:SER:H	1:A:7:MET:HE1	2	0.96
(1,1223)	1:A:5:SER:H	1:A:7:MET:HE2	2	0.96
(1,1223)	1:A:5:SER:H	1:A:7:MET:HE3	2	0.96
(1,1223)	1:A:5:SER:H	1:A:7:MET:HE1	6	0.96
(1,1223)	1:A:5:SER:H	1:A:7:MET:HE2	6	0.96
(1,1223)	1:A:5:SER:H	1:A:7:MET:HE3	6	0.96
(1,1093)	1:A:90:HIS:HB3	1:A:91:SER:H	6	0.96
(1,82)	1:A:28:LYS:HG3	1:A:29:LEU:HG	2	0.95
(1,408)	1:A:72:PHE:HA	1:A:87:LEU:HA	7	0.95
(1,1125)	1:A:83:LEU:HG	1:A:84:GLN:H	4	0.95
(1,1108)	1:A:49:GLU:HB3	1:A:54:SER:H	5	0.95
(1,1060)	1:A:6:ASN:H	1:A:32:LYS:H	5	0.95
(1,756)	1:A:34:THR:H	1:A:40:ALA:H	6	0.94
(1,1093)	1:A:90:HIS:HB3	1:A:91:SER:H	9	0.94

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,665)	1:A:65:VAL:HG11	1:A:97:ALA:H	7	0.93
(1,665)	1:A:65:VAL:HG12	1:A:97:ALA:H	7	0.93
(1,665)	1:A:65:VAL:HG13	1:A:97:ALA:H	7	0.93
(1,347)	1:A:25:MET:HE1	1:A:29:LEU:HD21	7	0.93
(1,347)	1:A:25:MET:HE1	1:A:29:LEU:HD22	7	0.93
(1,347)	1:A:25:MET:HE1	1:A:29:LEU:HD23	7	0.93
(1,347)	1:A:25:MET:HE2	1:A:29:LEU:HD21	7	0.93
(1,347)	1:A:25:MET:HE2	1:A:29:LEU:HD22	7	0.93
(1,347)	1:A:25:MET:HE2	1:A:29:LEU:HD23	7	0.93
(1,347)	1:A:25:MET:HE3	1:A:29:LEU:HD21	7	0.93
(1,347)	1:A:25:MET:HE3	1:A:29:LEU:HD22	7	0.93
(1,347)	1:A:25:MET:HE3	1:A:29:LEU:HD23	7	0.93
(1,227)	1:A:4:LEU:HB3	1:A:30:GLY:HA2	8	0.93
(1,865)	1:A:18:ASN:HD22	1:A:20:ASP:H	3	0.92
(1,86)	1:A:9:ILE:HD11	1:A:42:LEU:HD21	8	0.92
(1,86)	1:A:9:ILE:HD11	1:A:42:LEU:HD22	8	0.92
(1,86)	1:A:9:ILE:HD11	1:A:42:LEU:HD23	8	0.92
(1,86)	1:A:9:ILE:HD12	1:A:42:LEU:HD21	8	0.92
(1,86)	1:A:9:ILE:HD12	1:A:42:LEU:HD22	8	0.92
(1,86)	1:A:9:ILE:HD12	1:A:42:LEU:HD23	8	0.92
(1,86)	1:A:9:ILE:HD13	1:A:42:LEU:HD21	8	0.92
(1,86)	1:A:9:ILE:HD13	1:A:42:LEU:HD22	8	0.92
(1,86)	1:A:9:ILE:HD13	1:A:42:LEU:HD23	8	0.92
(1,85)	1:A:9:ILE:HD11	1:A:42:LEU:HD21	8	0.92
(1,85)	1:A:9:ILE:HD11	1:A:42:LEU:HD22	8	0.92
(1,85)	1:A:9:ILE:HD11	1:A:42:LEU:HD23	8	0.92
(1,85)	1:A:9:ILE:HD12	1:A:42:LEU:HD21	8	0.92
(1,85)	1:A:9:ILE:HD12	1:A:42:LEU:HD22	8	0.92
(1,85)	1:A:9:ILE:HD12	1:A:42:LEU:HD23	8	0.92
(1,85)	1:A:9:ILE:HD13	1:A:42:LEU:HD21	8	0.92
(1,85)	1:A:9:ILE:HD13	1:A:42:LEU:HD22	8	0.92
(1,85)	1:A:9:ILE:HD13	1:A:42:LEU:HD23	8	0.92
(1,739)	1:A:16:SER:H	1:A:45:SER:H	4	0.92
(1,227)	1:A:4:LEU:HB3	1:A:30:GLY:HA2	6	0.92
(1,1069)	1:A:5:SER:H	1:A:32:LYS:H	3	0.92
(1,865)	1:A:18:ASN:HD22	1:A:20:ASP:H	2	0.91
(1,773)	1:A:15:LEU:HA	1:A:45:SER:H	8	0.91
(1,1125)	1:A:83:LEU:HG	1:A:84:GLN:H	3	0.91
(1,1069)	1:A:5:SER:H	1:A:32:LYS:H	7	0.91
(1,1507)	1:A:58:GLU:HG2	1:A:59:GLU:H	4	0.9
(1,1507)	1:A:58:GLU:HG3	1:A:59:GLU:H	4	0.9
(1,769)	1:A:15:LEU:HA	1:A:70:GLU:H	2	0.89

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,756)	1:A:34:THR:H	1:A:40:ALA:H	2	0.89
(1,157)	1:A:68:VAL:H	1:A:92:LEU:HD21	9	0.89
(1,157)	1:A:68:VAL:H	1:A:92:LEU:HD22	9	0.89
(1,157)	1:A:68:VAL:H	1:A:92:LEU:HD23	9	0.89
(1,156)	1:A:68:VAL:H	1:A:92:LEU:HD21	9	0.89
(1,156)	1:A:68:VAL:H	1:A:92:LEU:HD22	9	0.89
(1,156)	1:A:68:VAL:H	1:A:92:LEU:HD23	9	0.89
(1,1259)	1:A:38:ASN:HD22	1:A:96:GLY:H	4	0.89
(1,1060)	1:A:6:ASN:H	1:A:32:LYS:H	4	0.89
(1,802)	1:A:53:MET:HE1	1:A:58:GLU:H	10	0.88
(1,802)	1:A:53:MET:HE2	1:A:58:GLU:H	10	0.88
(1,802)	1:A:53:MET:HE3	1:A:58:GLU:H	10	0.88
(1,227)	1:A:4:LEU:HB3	1:A:30:GLY:HA2	5	0.88
(1,1507)	1:A:58:GLU:HG2	1:A:59:GLU:H	2	0.88
(1,1507)	1:A:58:GLU:HG3	1:A:59:GLU:H	2	0.88
(1,802)	1:A:53:MET:HE1	1:A:58:GLU:H	6	0.87
(1,802)	1:A:53:MET:HE2	1:A:58:GLU:H	6	0.87
(1,802)	1:A:53:MET:HE3	1:A:58:GLU:H	6	0.87
(1,1109)	1:A:7:MET:HG2	1:A:32:LYS:H	4	0.87
(1,1109)	1:A:7:MET:HG2	1:A:32:LYS:H	6	0.87
(1,408)	1:A:72:PHE:HA	1:A:87:LEU:HA	1	0.86
(1,1125)	1:A:83:LEU:HG	1:A:84:GLN:H	2	0.86
(1,1069)	1:A:5:SER:H	1:A:32:LYS:H	4	0.86
(1,802)	1:A:53:MET:HE1	1:A:58:GLU:H	1	0.85
(1,802)	1:A:53:MET:HE2	1:A:58:GLU:H	1	0.85
(1,802)	1:A:53:MET:HE3	1:A:58:GLU:H	1	0.85
(1,480)	1:A:49:GLU:HB2	1:A:57:MET:HG3	6	0.85
(1,1507)	1:A:58:GLU:HG2	1:A:59:GLU:H	5	0.85
(1,1507)	1:A:58:GLU:HG3	1:A:59:GLU:H	5	0.85
(1,1507)	1:A:58:GLU:HG2	1:A:59:GLU:H	8	0.85
(1,1507)	1:A:58:GLU:HG3	1:A:59:GLU:H	8	0.85
(1,108)	1:A:9:ILE:HA	1:A:10:LEU:HD11	2	0.85
(1,108)	1:A:9:ILE:HA	1:A:10:LEU:HD12	2	0.85
(1,108)	1:A:9:ILE:HA	1:A:10:LEU:HD13	2	0.85
(1,108)	1:A:9:ILE:HA	1:A:10:LEU:HD11	7	0.85
(1,108)	1:A:9:ILE:HA	1:A:10:LEU:HD12	7	0.85
(1,108)	1:A:9:ILE:HA	1:A:10:LEU:HD13	7	0.85
(1,865)	1:A:18:ASN:HD22	1:A:20:ASP:H	1	0.84
(1,769)	1:A:15:LEU:HA	1:A:70:GLU:H	10	0.84
(1,756)	1:A:34:THR:H	1:A:40:ALA:H	8	0.84
(1,634)	1:A:69:CYS:HB2	1:A:92:LEU:H	6	0.84
(1,619)	1:A:38:ASN:HD21	1:A:97:ALA:H	1	0.84

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1607)	1:A:91:SER:HB2	1:A:92:LEU:HD11	3	0.84
(1,1607)	1:A:91:SER:HB2	1:A:92:LEU:HD12	3	0.84
(1,1607)	1:A:91:SER:HB2	1:A:92:LEU:HD13	3	0.84
(1,1607)	1:A:91:SER:HB3	1:A:92:LEU:HD11	3	0.84
(1,1607)	1:A:91:SER:HB3	1:A:92:LEU:HD12	3	0.84
(1,1607)	1:A:91:SER:HB3	1:A:92:LEU:HD13	3	0.84
(1,1540)	1:A:70:GLU:HG2	1:A:71:ASP:HA	6	0.84
(1,1540)	1:A:70:GLU:HG3	1:A:71:ASP:HA	6	0.84
(1,1507)	1:A:58:GLU:HG2	1:A:59:GLU:H	3	0.84
(1,1507)	1:A:58:GLU:HG3	1:A:59:GLU:H	3	0.84
(1,1093)	1:A:90:HIS:HB3	1:A:91:SER:H	7	0.84
(1,634)	1:A:69:CYS:HB2	1:A:92:LEU:H	1	0.83
(1,1540)	1:A:70:GLU:HG2	1:A:71:ASP:HA	4	0.83
(1,1540)	1:A:70:GLU:HG3	1:A:71:ASP:HA	4	0.83
(1,1540)	1:A:70:GLU:HG2	1:A:71:ASP:HA	8	0.83
(1,1540)	1:A:70:GLU:HG3	1:A:71:ASP:HA	8	0.83
(1,1507)	1:A:58:GLU:HG2	1:A:59:GLU:H	1	0.83
(1,1507)	1:A:58:GLU:HG3	1:A:59:GLU:H	1	0.83
(1,865)	1:A:18:ASN:HD22	1:A:20:ASP:H	5	0.82
(1,802)	1:A:53:MET:HE1	1:A:58:GLU:H	2	0.82
(1,802)	1:A:53:MET:HE2	1:A:58:GLU:H	2	0.82
(1,802)	1:A:53:MET:HE3	1:A:58:GLU:H	2	0.82
(1,480)	1:A:49:GLU:HB2	1:A:57:MET:HG3	1	0.82
(1,224)	1:A:4:LEU:HB2	1:A:30:GLY:HA2	5	0.82
(1,1507)	1:A:58:GLU:HG2	1:A:59:GLU:H	10	0.82
(1,1507)	1:A:58:GLU:HG3	1:A:59:GLU:H	10	0.82
(1,1396)	1:A:19:LYS:HD2	1:A:21:GLU:H	8	0.82
(1,1396)	1:A:19:LYS:HD3	1:A:21:GLU:H	8	0.82
(1,1177)	1:A:52:LYS:HE2	1:A:54:SER:H	1	0.82
(1,1134)	1:A:91:SER:H	1:A:92:LEU:HB2	5	0.82
(1,802)	1:A:53:MET:HE1	1:A:58:GLU:H	9	0.81
(1,802)	1:A:53:MET:HE2	1:A:58:GLU:H	9	0.81
(1,802)	1:A:53:MET:HE3	1:A:58:GLU:H	9	0.81
(1,1109)	1:A:7:MET:HG2	1:A:32:LYS:H	10	0.81
(1,108)	1:A:9:ILE:HA	1:A:10:LEU:HD11	5	0.81
(1,108)	1:A:9:ILE:HA	1:A:10:LEU:HD12	5	0.81
(1,108)	1:A:9:ILE:HA	1:A:10:LEU:HD13	5	0.81
(1,108)	1:A:9:ILE:HA	1:A:10:LEU:HD11	8	0.81
(1,108)	1:A:9:ILE:HA	1:A:10:LEU:HD12	8	0.81
(1,108)	1:A:9:ILE:HA	1:A:10:LEU:HD13	8	0.81
(1,773)	1:A:15:LEU:HA	1:A:45:SER:H	4	0.8
(1,765)	1:A:38:ASN:HD22	1:A:98:GLU:H	9	0.8

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,756)	1:A:34:THR:H	1:A:40:ALA:H	5	0.8
(1,1550)	1:A:74:GLN:HA	1:A:74:GLN:HE21	6	0.8
(1,1550)	1:A:74:GLN:HA	1:A:74:GLN:HE22	6	0.8
(1,108)	1:A:9:ILE:HA	1:A:10:LEU:HD11	10	0.8
(1,108)	1:A:9:ILE:HA	1:A:10:LEU:HD12	10	0.8
(1,108)	1:A:9:ILE:HA	1:A:10:LEU:HD13	10	0.8
(1,634)	1:A:69:CYS:HB2	1:A:92:LEU:H	8	0.79
(1,600)	1:A:65:VAL:HG21	1:A:66:ARG:H	3	0.79
(1,600)	1:A:65:VAL:HG22	1:A:66:ARG:H	3	0.79
(1,600)	1:A:65:VAL:HG23	1:A:66:ARG:H	3	0.79
(1,44)	1:A:63:ALA:HA	1:A:65:VAL:HG11	10	0.79
(1,44)	1:A:63:ALA:HA	1:A:65:VAL:HG12	10	0.79
(1,44)	1:A:63:ALA:HA	1:A:65:VAL:HG13	10	0.79
(1,43)	1:A:63:ALA:HA	1:A:65:VAL:HG11	10	0.79
(1,43)	1:A:63:ALA:HA	1:A:65:VAL:HG12	10	0.79
(1,43)	1:A:63:ALA:HA	1:A:65:VAL:HG13	10	0.79
(1,82)	1:A:28:LYS:HG3	1:A:29:LEU:HG	9	0.78
(1,157)	1:A:68:VAL:H	1:A:92:LEU:HD21	4	0.78
(1,157)	1:A:68:VAL:H	1:A:92:LEU:HD22	4	0.78
(1,157)	1:A:68:VAL:H	1:A:92:LEU:HD23	4	0.78
(1,156)	1:A:68:VAL:H	1:A:92:LEU:HD21	4	0.78
(1,156)	1:A:68:VAL:H	1:A:92:LEU:HD22	4	0.78
(1,156)	1:A:68:VAL:H	1:A:92:LEU:HD23	4	0.78
(1,108)	1:A:9:ILE:HA	1:A:10:LEU:HD11	4	0.78
(1,108)	1:A:9:ILE:HA	1:A:10:LEU:HD12	4	0.78
(1,108)	1:A:9:ILE:HA	1:A:10:LEU:HD13	4	0.78
(1,1550)	1:A:74:GLN:HA	1:A:74:GLN:HE21	9	0.77
(1,1550)	1:A:74:GLN:HA	1:A:74:GLN:HE22	9	0.77
(1,1060)	1:A:6:ASN:H	1:A:32:LYS:H	2	0.77
(1,408)	1:A:72:PHE:HA	1:A:87:LEU:HA	5	0.76
(1,1540)	1:A:70:GLU:HG2	1:A:71:ASP:HA	10	0.76
(1,1540)	1:A:70:GLU:HG3	1:A:71:ASP:HA	10	0.76
(1,649)	1:A:9:ILE:H	1:A:33:LEU:HG	8	0.75
(1,600)	1:A:65:VAL:HG21	1:A:66:ARG:H	6	0.75
(1,600)	1:A:65:VAL:HG22	1:A:66:ARG:H	6	0.75
(1,600)	1:A:65:VAL:HG23	1:A:66:ARG:H	6	0.75
(1,44)	1:A:63:ALA:HA	1:A:65:VAL:HG11	7	0.75
(1,44)	1:A:63:ALA:HA	1:A:65:VAL:HG12	7	0.75
(1,44)	1:A:63:ALA:HA	1:A:65:VAL:HG13	7	0.75
(1,43)	1:A:63:ALA:HA	1:A:65:VAL:HG11	7	0.75
(1,43)	1:A:63:ALA:HA	1:A:65:VAL:HG12	7	0.75
(1,43)	1:A:63:ALA:HA	1:A:65:VAL:HG13	7	0.75

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,108)	1:A:9:ILE:HA	1:A:10:LEU:HD11	3	0.75
(1,108)	1:A:9:ILE:HA	1:A:10:LEU:HD12	3	0.75
(1,108)	1:A:9:ILE:HA	1:A:10:LEU:HD13	3	0.75
(1,865)	1:A:18:ASN:HD22	1:A:20:ASP:H	9	0.74
(1,649)	1:A:9:ILE:H	1:A:33:LEU:HG	7	0.74
(1,600)	1:A:65:VAL:HG21	1:A:66:ARG:H	8	0.74
(1,600)	1:A:65:VAL:HG22	1:A:66:ARG:H	8	0.74
(1,600)	1:A:65:VAL:HG23	1:A:66:ARG:H	8	0.74
(1,769)	1:A:15:LEU:HA	1:A:70:GLU:H	4	0.73
(1,600)	1:A:65:VAL:HG21	1:A:66:ARG:H	10	0.73
(1,600)	1:A:65:VAL:HG22	1:A:66:ARG:H	10	0.73
(1,600)	1:A:65:VAL:HG23	1:A:66:ARG:H	10	0.73
(1,44)	1:A:63:ALA:HA	1:A:65:VAL:HG11	8	0.73
(1,44)	1:A:63:ALA:HA	1:A:65:VAL:HG12	8	0.73
(1,44)	1:A:63:ALA:HA	1:A:65:VAL:HG13	8	0.73
(1,43)	1:A:63:ALA:HA	1:A:65:VAL:HG11	8	0.73
(1,43)	1:A:63:ALA:HA	1:A:65:VAL:HG12	8	0.73
(1,43)	1:A:63:ALA:HA	1:A:65:VAL:HG13	8	0.73
(1,1607)	1:A:91:SER:HB2	1:A:92:LEU:HD11	6	0.73
(1,1607)	1:A:91:SER:HB2	1:A:92:LEU:HD12	6	0.73
(1,1607)	1:A:91:SER:HB2	1:A:92:LEU:HD13	6	0.73
(1,1607)	1:A:91:SER:HB3	1:A:92:LEU:HD11	6	0.73
(1,1607)	1:A:91:SER:HB3	1:A:92:LEU:HD12	6	0.73
(1,1607)	1:A:91:SER:HB3	1:A:92:LEU:HD13	6	0.73
(1,600)	1:A:65:VAL:HG21	1:A:66:ARG:H	9	0.72
(1,600)	1:A:65:VAL:HG22	1:A:66:ARG:H	9	0.72
(1,600)	1:A:65:VAL:HG23	1:A:66:ARG:H	9	0.72
(1,480)	1:A:49:GLU:HB2	1:A:57:MET:HG3	5	0.72
(1,281)	1:A:72:PHE:HB2	1:A:86:LEU:HB3	3	0.72
(1,224)	1:A:4:LEU:HB2	1:A:30:GLY:HA2	1	0.72
(1,224)	1:A:4:LEU:HB2	1:A:30:GLY:HA2	4	0.72
(1,82)	1:A:28:LYS:HG3	1:A:29:LEU:HG	7	0.71
(1,614)	1:A:67:VAL:H	1:A:96:GLY:H	5	0.71
(1,44)	1:A:63:ALA:HA	1:A:65:VAL:HG11	9	0.71
(1,44)	1:A:63:ALA:HA	1:A:65:VAL:HG12	9	0.71
(1,44)	1:A:63:ALA:HA	1:A:65:VAL:HG13	9	0.71
(1,43)	1:A:63:ALA:HA	1:A:65:VAL:HG11	9	0.71
(1,43)	1:A:63:ALA:HA	1:A:65:VAL:HG12	9	0.71
(1,43)	1:A:63:ALA:HA	1:A:65:VAL:HG13	9	0.71
(1,224)	1:A:4:LEU:HB2	1:A:30:GLY:HA2	8	0.71
(1,1623)	1:A:99:VAL:H	1:A:100:LYS:HD2	10	0.71
(1,1623)	1:A:99:VAL:H	1:A:100:LYS:HD3	10	0.71

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,157)	1:A:68:VAL:H	1:A:92:LEU:HD21	8	0.71
(1,157)	1:A:68:VAL:H	1:A:92:LEU:HD22	8	0.71
(1,157)	1:A:68:VAL:H	1:A:92:LEU:HD23	8	0.71
(1,156)	1:A:68:VAL:H	1:A:92:LEU:HD21	8	0.71
(1,156)	1:A:68:VAL:H	1:A:92:LEU:HD22	8	0.71
(1,156)	1:A:68:VAL:H	1:A:92:LEU:HD23	8	0.71
(1,1395)	1:A:19:LYS:HD2	1:A:20:ASP:HA	4	0.71
(1,1395)	1:A:19:LYS:HD3	1:A:20:ASP:HA	4	0.71
(1,649)	1:A:9:ILE:H	1:A:33:LEU:HG	1	0.7
(1,44)	1:A:63:ALA:HA	1:A:65:VAL:HG11	3	0.7
(1,44)	1:A:63:ALA:HA	1:A:65:VAL:HG12	3	0.7
(1,44)	1:A:63:ALA:HA	1:A:65:VAL:HG13	3	0.7
(1,43)	1:A:63:ALA:HA	1:A:65:VAL:HG11	3	0.7
(1,43)	1:A:63:ALA:HA	1:A:65:VAL:HG12	3	0.7
(1,43)	1:A:63:ALA:HA	1:A:65:VAL:HG13	3	0.7
(1,287)	1:A:53:MET:HE1	1:A:61:LYS:HE2	2	0.7
(1,287)	1:A:53:MET:HE2	1:A:61:LYS:HE2	2	0.7
(1,287)	1:A:53:MET:HE3	1:A:61:LYS:HE2	2	0.7
(1,1093)	1:A:90:HIS:HB3	1:A:91:SER:H	8	0.7
(1,665)	1:A:65:VAL:HG11	1:A:97:ALA:H	8	0.69
(1,665)	1:A:65:VAL:HG12	1:A:97:ALA:H	8	0.69
(1,665)	1:A:65:VAL:HG13	1:A:97:ALA:H	8	0.69
(1,108)	1:A:9:ILE:HA	1:A:10:LEU:HD11	6	0.69
(1,108)	1:A:9:ILE:HA	1:A:10:LEU:HD12	6	0.69
(1,108)	1:A:9:ILE:HA	1:A:10:LEU:HD13	6	0.69
(1,769)	1:A:15:LEU:HA	1:A:70:GLU:H	7	0.68
(1,665)	1:A:65:VAL:HG11	1:A:97:ALA:H	6	0.68
(1,665)	1:A:65:VAL:HG12	1:A:97:ALA:H	6	0.68
(1,665)	1:A:65:VAL:HG13	1:A:97:ALA:H	6	0.68
(1,446)	1:A:4:LEU:HD11	1:A:7:MET:HB2	10	0.68
(1,446)	1:A:4:LEU:HD12	1:A:7:MET:HB2	10	0.68
(1,446)	1:A:4:LEU:HD13	1:A:7:MET:HB2	10	0.68
(1,44)	1:A:63:ALA:HA	1:A:65:VAL:HG11	5	0.68
(1,44)	1:A:63:ALA:HA	1:A:65:VAL:HG12	5	0.68
(1,44)	1:A:63:ALA:HA	1:A:65:VAL:HG13	5	0.68
(1,43)	1:A:63:ALA:HA	1:A:65:VAL:HG11	5	0.68
(1,43)	1:A:63:ALA:HA	1:A:65:VAL:HG12	5	0.68
(1,43)	1:A:63:ALA:HA	1:A:65:VAL:HG13	5	0.68
(1,304)	1:A:50:VAL:H	1:A:53:MET:HE1	10	0.68
(1,304)	1:A:50:VAL:H	1:A:53:MET:HE2	10	0.68
(1,304)	1:A:50:VAL:H	1:A:53:MET:HE3	10	0.68
(1,224)	1:A:4:LEU:HB2	1:A:30:GLY:HA2	10	0.68

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1125)	1:A:83:LEU:HG	1:A:84:GLN:H	7	0.68
(1,582)	1:A:10:LEU:H	1:A:42:LEU:HD21	2	0.67
(1,582)	1:A:10:LEU:H	1:A:42:LEU:HD22	2	0.67
(1,582)	1:A:10:LEU:H	1:A:42:LEU:HD23	2	0.67
(1,281)	1:A:72:PHE:HB2	1:A:86:LEU:HB3	2	0.67
(1,1446)	1:A:45:SER:H	1:A:70:GLU:HG2	5	0.67
(1,1446)	1:A:45:SER:H	1:A:70:GLU:HG3	5	0.67
(1,1108)	1:A:49:GLU:HB3	1:A:54:SER:H	10	0.67
(1,621)	1:A:38:ASN:HD22	1:A:97:ALA:H	7	0.66
(1,481)	1:A:49:GLU:HB3	1:A:57:MET:HG3	9	0.66
(1,224)	1:A:4:LEU:HB2	1:A:30:GLY:HA2	6	0.66
(1,157)	1:A:68:VAL:H	1:A:92:LEU:HD21	1	0.66
(1,157)	1:A:68:VAL:H	1:A:92:LEU:HD22	1	0.66
(1,157)	1:A:68:VAL:H	1:A:92:LEU:HD23	1	0.66
(1,156)	1:A:68:VAL:H	1:A:92:LEU:HD21	1	0.66
(1,156)	1:A:68:VAL:H	1:A:92:LEU:HD22	1	0.66
(1,156)	1:A:68:VAL:H	1:A:92:LEU:HD23	1	0.66
(1,1264)	1:A:94:SER:HA	1:A:96:GLY:H	9	0.66
(1,108)	1:A:9:ILE:HA	1:A:10:LEU:HD11	1	0.66
(1,108)	1:A:9:ILE:HA	1:A:10:LEU:HD12	1	0.66
(1,108)	1:A:9:ILE:HA	1:A:10:LEU:HD13	1	0.66
(1,769)	1:A:15:LEU:HA	1:A:70:GLU:H	8	0.65
(1,649)	1:A:9:ILE:H	1:A:33:LEU:HG	3	0.65
(1,600)	1:A:65:VAL:HG21	1:A:66:ARG:H	2	0.65
(1,600)	1:A:65:VAL:HG22	1:A:66:ARG:H	2	0.65
(1,600)	1:A:65:VAL:HG23	1:A:66:ARG:H	2	0.65
(1,600)	1:A:65:VAL:HG21	1:A:66:ARG:H	5	0.65
(1,600)	1:A:65:VAL:HG22	1:A:66:ARG:H	5	0.65
(1,600)	1:A:65:VAL:HG23	1:A:66:ARG:H	5	0.65
(1,44)	1:A:63:ALA:HA	1:A:65:VAL:HG11	1	0.65
(1,44)	1:A:63:ALA:HA	1:A:65:VAL:HG12	1	0.65
(1,44)	1:A:63:ALA:HA	1:A:65:VAL:HG13	1	0.65
(1,44)	1:A:63:ALA:HA	1:A:65:VAL:HG11	2	0.65
(1,44)	1:A:63:ALA:HA	1:A:65:VAL:HG12	2	0.65
(1,44)	1:A:63:ALA:HA	1:A:65:VAL:HG13	2	0.65
(1,43)	1:A:63:ALA:HA	1:A:65:VAL:HG11	1	0.65
(1,43)	1:A:63:ALA:HA	1:A:65:VAL:HG12	1	0.65
(1,43)	1:A:63:ALA:HA	1:A:65:VAL:HG13	1	0.65
(1,43)	1:A:63:ALA:HA	1:A:65:VAL:HG11	2	0.65
(1,43)	1:A:63:ALA:HA	1:A:65:VAL:HG12	2	0.65
(1,43)	1:A:63:ALA:HA	1:A:65:VAL:HG13	2	0.65
(1,281)	1:A:72:PHE:HB2	1:A:86:LEU:HB3	8	0.65

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1607)	1:A:91:SER:HB2	1:A:92:LEU:HD11	9	0.65
(1,1607)	1:A:91:SER:HB2	1:A:92:LEU:HD12	9	0.65
(1,1607)	1:A:91:SER:HB2	1:A:92:LEU:HD13	9	0.65
(1,1607)	1:A:91:SER:HB3	1:A:92:LEU:HD11	9	0.65
(1,1607)	1:A:91:SER:HB3	1:A:92:LEU:HD12	9	0.65
(1,1607)	1:A:91:SER:HB3	1:A:92:LEU:HD13	9	0.65
(1,224)	1:A:4:LEU:HB2	1:A:30:GLY:HA2	2	0.64
(1,108)	1:A:9:ILE:HA	1:A:10:LEU:HD11	9	0.64
(1,108)	1:A:9:ILE:HA	1:A:10:LEU:HD12	9	0.64
(1,108)	1:A:9:ILE:HA	1:A:10:LEU:HD13	9	0.64
(1,1048)	1:A:4:LEU:HD11	1:A:7:MET:H	5	0.64
(1,1048)	1:A:4:LEU:HD12	1:A:7:MET:H	5	0.64
(1,1048)	1:A:4:LEU:HD13	1:A:7:MET:H	5	0.64
(1,82)	1:A:28:LYS:HG3	1:A:29:LEU:HG	10	0.63
(1,600)	1:A:65:VAL:HG21	1:A:66:ARG:H	1	0.63
(1,600)	1:A:65:VAL:HG22	1:A:66:ARG:H	1	0.63
(1,600)	1:A:65:VAL:HG23	1:A:66:ARG:H	1	0.63
(1,600)	1:A:65:VAL:HG21	1:A:66:ARG:H	4	0.63
(1,600)	1:A:65:VAL:HG22	1:A:66:ARG:H	4	0.63
(1,600)	1:A:65:VAL:HG23	1:A:66:ARG:H	4	0.63
(1,582)	1:A:10:LEU:H	1:A:42:LEU:HD21	6	0.63
(1,582)	1:A:10:LEU:H	1:A:42:LEU:HD22	6	0.63
(1,582)	1:A:10:LEU:H	1:A:42:LEU:HD23	6	0.63
(1,347)	1:A:25:MET:HE1	1:A:29:LEU:HD21	10	0.63
(1,347)	1:A:25:MET:HE1	1:A:29:LEU:HD22	10	0.63
(1,347)	1:A:25:MET:HE1	1:A:29:LEU:HD23	10	0.63
(1,347)	1:A:25:MET:HE2	1:A:29:LEU:HD21	10	0.63
(1,347)	1:A:25:MET:HE2	1:A:29:LEU:HD22	10	0.63
(1,347)	1:A:25:MET:HE2	1:A:29:LEU:HD23	10	0.63
(1,347)	1:A:25:MET:HE3	1:A:29:LEU:HD21	10	0.63
(1,347)	1:A:25:MET:HE3	1:A:29:LEU:HD22	10	0.63
(1,347)	1:A:25:MET:HE3	1:A:29:LEU:HD23	10	0.63
(1,1264)	1:A:94:SER:HA	1:A:96:GLY:H	7	0.63
(1,1062)	1:A:7:MET:H	1:A:32:LYS:H	9	0.63
(1,683)	1:A:12:LEU:H	1:A:43:CYS:HA	7	0.62
(1,582)	1:A:10:LEU:H	1:A:42:LEU:HD21	5	0.62
(1,582)	1:A:10:LEU:H	1:A:42:LEU:HD22	5	0.62
(1,582)	1:A:10:LEU:H	1:A:42:LEU:HD23	5	0.62
(1,619)	1:A:38:ASN:HD21	1:A:97:ALA:H	6	0.61
(1,600)	1:A:65:VAL:HG21	1:A:66:ARG:H	7	0.61
(1,600)	1:A:65:VAL:HG22	1:A:66:ARG:H	7	0.61
(1,600)	1:A:65:VAL:HG23	1:A:66:ARG:H	7	0.61

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,930)	1:A:68:VAL:H	1:A:92:LEU:HG	6	0.59
(1,756)	1:A:34:THR:H	1:A:40:ALA:H	7	0.59
(1,481)	1:A:49:GLU:HB3	1:A:57:MET:HG3	2	0.59
(1,446)	1:A:4:LEU:HD11	1:A:7:MET:HB2	7	0.59
(1,446)	1:A:4:LEU:HD12	1:A:7:MET:HB2	7	0.59
(1,446)	1:A:4:LEU:HD13	1:A:7:MET:HB2	7	0.59
(1,44)	1:A:63:ALA:HA	1:A:65:VAL:HG11	4	0.59
(1,44)	1:A:63:ALA:HA	1:A:65:VAL:HG12	4	0.59
(1,44)	1:A:63:ALA:HA	1:A:65:VAL:HG13	4	0.59
(1,43)	1:A:63:ALA:HA	1:A:65:VAL:HG11	4	0.59
(1,43)	1:A:63:ALA:HA	1:A:65:VAL:HG12	4	0.59
(1,43)	1:A:63:ALA:HA	1:A:65:VAL:HG13	4	0.59
(1,1264)	1:A:94:SER:HA	1:A:96:GLY:H	10	0.59
(1,756)	1:A:34:THR:H	1:A:40:ALA:H	9	0.58
(1,665)	1:A:65:VAL:HG11	1:A:97:ALA:H	1	0.58
(1,665)	1:A:65:VAL:HG12	1:A:97:ALA:H	1	0.58
(1,665)	1:A:65:VAL:HG13	1:A:97:ALA:H	1	0.58
(1,582)	1:A:10:LEU:H	1:A:42:LEU:HD21	4	0.58
(1,582)	1:A:10:LEU:H	1:A:42:LEU:HD22	4	0.58
(1,582)	1:A:10:LEU:H	1:A:42:LEU:HD23	4	0.58
(1,480)	1:A:49:GLU:HB2	1:A:57:MET:HG3	10	0.58
(1,648)	1:A:65:VAL:HB	1:A:67:VAL:H	4	0.57
(1,648)	1:A:65:VAL:HB	1:A:67:VAL:H	8	0.57
(1,582)	1:A:10:LEU:H	1:A:42:LEU:HD21	9	0.57
(1,582)	1:A:10:LEU:H	1:A:42:LEU:HD22	9	0.57
(1,582)	1:A:10:LEU:H	1:A:42:LEU:HD23	9	0.57
(1,481)	1:A:49:GLU:HB3	1:A:57:MET:HG3	7	0.57
(1,44)	1:A:63:ALA:HA	1:A:65:VAL:HG11	6	0.57
(1,44)	1:A:63:ALA:HA	1:A:65:VAL:HG12	6	0.57
(1,44)	1:A:63:ALA:HA	1:A:65:VAL:HG13	6	0.57
(1,43)	1:A:63:ALA:HA	1:A:65:VAL:HG11	6	0.57
(1,43)	1:A:63:ALA:HA	1:A:65:VAL:HG12	6	0.57
(1,43)	1:A:63:ALA:HA	1:A:65:VAL:HG13	6	0.57
(1,224)	1:A:4:LEU:HB2	1:A:30:GLY:HA2	7	0.57
(1,109)	1:A:28:LYS:HG3	1:A:29:LEU:HA	4	0.57
(1,1062)	1:A:7:MET:H	1:A:32:LYS:H	1	0.57
(1,619)	1:A:38:ASN:HD21	1:A:97:ALA:H	10	0.56
(1,607)	1:A:66:ARG:H	1:A:97:ALA:H	7	0.56
(1,481)	1:A:49:GLU:HB3	1:A:57:MET:HG3	4	0.56
(1,347)	1:A:25:MET:HE1	1:A:29:LEU:HD21	9	0.56
(1,347)	1:A:25:MET:HE1	1:A:29:LEU:HD22	9	0.56
(1,347)	1:A:25:MET:HE1	1:A:29:LEU:HD23	9	0.56

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,347)	1:A:25:MET:HE2	1:A:29:LEU:HD21	9	0.56
(1,347)	1:A:25:MET:HE2	1:A:29:LEU:HD22	9	0.56
(1,347)	1:A:25:MET:HE2	1:A:29:LEU:HD23	9	0.56
(1,347)	1:A:25:MET:HE3	1:A:29:LEU:HD21	9	0.56
(1,347)	1:A:25:MET:HE3	1:A:29:LEU:HD22	9	0.56
(1,347)	1:A:25:MET:HE3	1:A:29:LEU:HD23	9	0.56
(1,1264)	1:A:94:SER:HA	1:A:96:GLY:H	1	0.56
(1,1264)	1:A:94:SER:HA	1:A:96:GLY:H	4	0.56
(1,109)	1:A:28:LYS:HG3	1:A:29:LEU:HA	2	0.56
(1,109)	1:A:28:LYS:HG3	1:A:29:LEU:HA	3	0.56
(1,1062)	1:A:7:MET:H	1:A:32:LYS:H	8	0.56
(1,408)	1:A:72:PHE:HA	1:A:87:LEU:HA	4	0.55
(1,224)	1:A:4:LEU:HB2	1:A:30:GLY:HA2	9	0.55
(1,1119)	1:A:74:GLN:H	1:A:74:GLN:HG2	6	0.55
(1,1062)	1:A:7:MET:H	1:A:32:LYS:H	7	0.55
(1,769)	1:A:15:LEU:HA	1:A:70:GLU:H	6	0.54
(1,648)	1:A:65:VAL:HB	1:A:67:VAL:H	5	0.54
(1,296)	1:A:53:MET:HE1	1:A:54:SER:H	10	0.54
(1,296)	1:A:53:MET:HE2	1:A:54:SER:H	10	0.54
(1,296)	1:A:53:MET:HE3	1:A:54:SER:H	10	0.54
(1,1264)	1:A:94:SER:HA	1:A:96:GLY:H	6	0.54
(1,224)	1:A:4:LEU:HB2	1:A:30:GLY:HA2	3	0.53
(1,1119)	1:A:74:GLN:H	1:A:74:GLN:HG2	9	0.53
(1,765)	1:A:38:ASN:HD22	1:A:98:GLU:H	4	0.52
(1,648)	1:A:65:VAL:HB	1:A:67:VAL:H	6	0.52
(1,281)	1:A:72:PHE:HB2	1:A:86:LEU:HB3	9	0.52
(1,1607)	1:A:91:SER:HB2	1:A:92:LEU:HD11	5	0.52
(1,1607)	1:A:91:SER:HB2	1:A:92:LEU:HD12	5	0.52
(1,1607)	1:A:91:SER:HB2	1:A:92:LEU:HD13	5	0.52
(1,1607)	1:A:91:SER:HB3	1:A:92:LEU:HD11	5	0.52
(1,1607)	1:A:91:SER:HB3	1:A:92:LEU:HD12	5	0.52
(1,1607)	1:A:91:SER:HB3	1:A:92:LEU:HD13	5	0.52
(1,1166)	1:A:4:LEU:H	1:A:30:GLY:HA3	10	0.52
(1,865)	1:A:18:ASN:HD22	1:A:20:ASP:H	4	0.51
(1,281)	1:A:72:PHE:HB2	1:A:86:LEU:HB3	1	0.51
(1,132)	1:A:12:LEU:HD11	1:A:57:MET:H	7	0.51
(1,132)	1:A:12:LEU:HD12	1:A:57:MET:H	7	0.51
(1,132)	1:A:12:LEU:HD13	1:A:57:MET:H	7	0.51
(1,1264)	1:A:94:SER:HA	1:A:96:GLY:H	2	0.51
(1,1134)	1:A:91:SER:H	1:A:92:LEU:HB2	9	0.51
(1,109)	1:A:28:LYS:HG3	1:A:29:LEU:HA	6	0.51
(1,769)	1:A:15:LEU:HA	1:A:70:GLU:H	3	0.5

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,737)	1:A:15:LEU:HD11	1:A:22:ALA:H	10	0.5
(1,737)	1:A:15:LEU:HD12	1:A:22:ALA:H	10	0.5
(1,737)	1:A:15:LEU:HD13	1:A:22:ALA:H	10	0.5
(1,736)	1:A:15:LEU:HD11	1:A:22:ALA:H	10	0.5
(1,736)	1:A:15:LEU:HD12	1:A:22:ALA:H	10	0.5
(1,736)	1:A:15:LEU:HD13	1:A:22:ALA:H	10	0.5
(1,1446)	1:A:45:SER:H	1:A:70:GLU:HG2	3	0.5
(1,1446)	1:A:45:SER:H	1:A:70:GLU:HG3	3	0.5
(1,1412)	1:A:23:LYS:HD2	1:A:33:LEU:HD11	9	0.5
(1,1412)	1:A:23:LYS:HD2	1:A:33:LEU:HD12	9	0.5
(1,1412)	1:A:23:LYS:HD2	1:A:33:LEU:HD13	9	0.5
(1,1412)	1:A:23:LYS:HD3	1:A:33:LEU:HD11	9	0.5
(1,1412)	1:A:23:LYS:HD3	1:A:33:LEU:HD12	9	0.5
(1,1412)	1:A:23:LYS:HD3	1:A:33:LEU:HD13	9	0.5
(1,1264)	1:A:94:SER:HA	1:A:96:GLY:H	3	0.5
(1,737)	1:A:15:LEU:HD11	1:A:22:ALA:H	7	0.49
(1,737)	1:A:15:LEU:HD12	1:A:22:ALA:H	7	0.49
(1,737)	1:A:15:LEU:HD13	1:A:22:ALA:H	7	0.49
(1,736)	1:A:15:LEU:HD11	1:A:22:ALA:H	7	0.49
(1,736)	1:A:15:LEU:HD12	1:A:22:ALA:H	7	0.49
(1,736)	1:A:15:LEU:HD13	1:A:22:ALA:H	7	0.49
(1,665)	1:A:65:VAL:HG11	1:A:97:ALA:H	10	0.49
(1,665)	1:A:65:VAL:HG12	1:A:97:ALA:H	10	0.49
(1,665)	1:A:65:VAL:HG13	1:A:97:ALA:H	10	0.49
(1,621)	1:A:38:ASN:HD22	1:A:97:ALA:H	5	0.49
(1,619)	1:A:38:ASN:HD21	1:A:97:ALA:H	5	0.49
(1,281)	1:A:72:PHE:HB2	1:A:86:LEU:HB3	7	0.49
(1,26)	1:A:100:LYS:HA	1:A:100:LYS:HD2	3	0.49
(1,768)	1:A:11:THR:HA	1:A:45:SER:H	5	0.48
(1,665)	1:A:65:VAL:HG11	1:A:97:ALA:H	2	0.48
(1,665)	1:A:65:VAL:HG12	1:A:97:ALA:H	2	0.48
(1,665)	1:A:65:VAL:HG13	1:A:97:ALA:H	2	0.48
(1,481)	1:A:49:GLU:HB3	1:A:57:MET:HG3	6	0.48
(1,446)	1:A:4:LEU:HD11	1:A:7:MET:HB2	2	0.48
(1,446)	1:A:4:LEU:HD12	1:A:7:MET:HB2	2	0.48
(1,446)	1:A:4:LEU:HD13	1:A:7:MET:HB2	2	0.48
(1,1396)	1:A:19:LYS:HD2	1:A:21:GLU:H	2	0.48
(1,1396)	1:A:19:LYS:HD3	1:A:21:GLU:H	2	0.48
(1,1384)	1:A:18:ASN:HD21	1:A:20:ASP:H	2	0.48
(1,1384)	1:A:18:ASN:HD22	1:A:20:ASP:H	2	0.48
(1,1093)	1:A:90:HIS:HB3	1:A:91:SER:H	5	0.48
(1,683)	1:A:12:LEU:H	1:A:43:CYS:HA	4	0.47

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,582)	1:A:10:LEU:H	1:A:42:LEU:HD21	3	0.47
(1,582)	1:A:10:LEU:H	1:A:42:LEU:HD22	3	0.47
(1,582)	1:A:10:LEU:H	1:A:42:LEU:HD23	3	0.47
(1,446)	1:A:4:LEU:HD11	1:A:7:MET:HB2	3	0.47
(1,446)	1:A:4:LEU:HD12	1:A:7:MET:HB2	3	0.47
(1,446)	1:A:4:LEU:HD13	1:A:7:MET:HB2	3	0.47
(1,157)	1:A:68:VAL:H	1:A:92:LEU:HD21	2	0.47
(1,157)	1:A:68:VAL:H	1:A:92:LEU:HD22	2	0.47
(1,157)	1:A:68:VAL:H	1:A:92:LEU:HD23	2	0.47
(1,157)	1:A:68:VAL:H	1:A:92:LEU:HD21	3	0.47
(1,157)	1:A:68:VAL:H	1:A:92:LEU:HD22	3	0.47
(1,157)	1:A:68:VAL:H	1:A:92:LEU:HD23	3	0.47
(1,156)	1:A:68:VAL:H	1:A:92:LEU:HD21	2	0.47
(1,156)	1:A:68:VAL:H	1:A:92:LEU:HD22	2	0.47
(1,156)	1:A:68:VAL:H	1:A:92:LEU:HD23	2	0.47
(1,156)	1:A:68:VAL:H	1:A:92:LEU:HD21	3	0.47
(1,156)	1:A:68:VAL:H	1:A:92:LEU:HD22	3	0.47
(1,156)	1:A:68:VAL:H	1:A:92:LEU:HD23	3	0.47
(1,1301)	1:A:4:LEU:HB3	1:A:30:GLY:H	2	0.47
(1,943)	1:A:75:ASP:H	1:A:76:VAL:HB	7	0.46
(1,837)	1:A:12:LEU:HD21	1:A:61:LYS:H	8	0.46
(1,837)	1:A:12:LEU:HD22	1:A:61:LYS:H	8	0.46
(1,837)	1:A:12:LEU:HD23	1:A:61:LYS:H	8	0.46
(1,281)	1:A:72:PHE:HB2	1:A:86:LEU:HB3	10	0.46
(1,1062)	1:A:7:MET:H	1:A:32:LYS:H	10	0.46
(1,943)	1:A:75:ASP:H	1:A:76:VAL:HB	3	0.45
(1,943)	1:A:75:ASP:H	1:A:76:VAL:HB	10	0.45
(1,683)	1:A:12:LEU:H	1:A:43:CYS:HA	1	0.45
(1,683)	1:A:12:LEU:H	1:A:43:CYS:HA	5	0.45
(1,607)	1:A:66:ARG:H	1:A:97:ALA:H	2	0.45
(1,481)	1:A:49:GLU:HB3	1:A:57:MET:HG3	8	0.45
(1,281)	1:A:72:PHE:HB2	1:A:86:LEU:HB3	6	0.45
(1,1384)	1:A:18:ASN:HD21	1:A:20:ASP:H	5	0.45
(1,1384)	1:A:18:ASN:HD22	1:A:20:ASP:H	5	0.45
(1,1384)	1:A:18:ASN:HD21	1:A:20:ASP:H	6	0.45
(1,1384)	1:A:18:ASN:HD22	1:A:20:ASP:H	6	0.45
(1,943)	1:A:75:ASP:H	1:A:76:VAL:HB	1	0.44
(1,320)	1:A:53:MET:HE1	1:A:57:MET:HA	8	0.44
(1,320)	1:A:53:MET:HE2	1:A:57:MET:HA	8	0.44
(1,320)	1:A:53:MET:HE3	1:A:57:MET:HA	8	0.44
(1,320)	1:A:53:MET:HE1	1:A:57:MET:HA	10	0.44
(1,320)	1:A:53:MET:HE2	1:A:57:MET:HA	10	0.44

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,320)	1:A:53:MET:HE3	1:A:57:MET:HA	10	0.44
(1,1166)	1:A:4:LEU:H	1:A:30:GLY:HA3	7	0.44
(1,109)	1:A:28:LYS:HG3	1:A:29:LEU:HA	9	0.44
(1,1033)	1:A:4:LEU:HB2	1:A:6:ASN:H	6	0.44
(1,943)	1:A:75:ASP:H	1:A:76:VAL:HB	2	0.43
(1,648)	1:A:65:VAL:HB	1:A:67:VAL:H	7	0.43
(1,634)	1:A:69:CYS:HB2	1:A:92:LEU:H	3	0.43
(1,621)	1:A:38:ASN:HD22	1:A:97:ALA:H	1	0.43
(1,582)	1:A:10:LEU:H	1:A:42:LEU:HD21	10	0.43
(1,582)	1:A:10:LEU:H	1:A:42:LEU:HD22	10	0.43
(1,582)	1:A:10:LEU:H	1:A:42:LEU:HD23	10	0.43
(1,320)	1:A:53:MET:HE1	1:A:57:MET:HA	2	0.43
(1,320)	1:A:53:MET:HE2	1:A:57:MET:HA	2	0.43
(1,320)	1:A:53:MET:HE3	1:A:57:MET:HA	2	0.43
(1,320)	1:A:53:MET:HE1	1:A:57:MET:HA	3	0.43
(1,320)	1:A:53:MET:HE2	1:A:57:MET:HA	3	0.43
(1,320)	1:A:53:MET:HE3	1:A:57:MET:HA	3	0.43
(1,1384)	1:A:18:ASN:HD21	1:A:20:ASP:H	10	0.43
(1,1384)	1:A:18:ASN:HD22	1:A:20:ASP:H	10	0.43
(1,1069)	1:A:5:SER:H	1:A:32:LYS:H	2	0.43
(1,943)	1:A:75:ASP:H	1:A:76:VAL:HB	4	0.42
(1,619)	1:A:38:ASN:HD21	1:A:97:ALA:H	8	0.42
(1,607)	1:A:66:ARG:H	1:A:97:ALA:H	8	0.42
(1,1264)	1:A:94:SER:HA	1:A:96:GLY:H	8	0.42
(1,109)	1:A:28:LYS:HG3	1:A:29:LEU:HA	8	0.42
(1,1013)	1:A:27:GLU:H	1:A:27:GLU:HG3	9	0.42
(1,943)	1:A:75:ASP:H	1:A:76:VAL:HB	5	0.41
(1,648)	1:A:65:VAL:HB	1:A:67:VAL:H	9	0.41
(1,310)	1:A:53:MET:HE1	1:A:61:LYS:H	6	0.41
(1,310)	1:A:53:MET:HE2	1:A:61:LYS:H	6	0.41
(1,310)	1:A:53:MET:HE3	1:A:61:LYS:H	6	0.41
(1,292)	1:A:9:ILE:HG21	1:A:42:LEU:HD21	5	0.41
(1,292)	1:A:9:ILE:HG21	1:A:42:LEU:HD22	5	0.41
(1,292)	1:A:9:ILE:HG21	1:A:42:LEU:HD23	5	0.41
(1,292)	1:A:9:ILE:HG22	1:A:42:LEU:HD21	5	0.41
(1,292)	1:A:9:ILE:HG22	1:A:42:LEU:HD22	5	0.41
(1,292)	1:A:9:ILE:HG22	1:A:42:LEU:HD23	5	0.41
(1,292)	1:A:9:ILE:HG23	1:A:42:LEU:HD21	5	0.41
(1,292)	1:A:9:ILE:HG23	1:A:42:LEU:HD22	5	0.41
(1,292)	1:A:9:ILE:HG23	1:A:42:LEU:HD23	5	0.41
(1,291)	1:A:9:ILE:HG21	1:A:42:LEU:HD21	5	0.41
(1,291)	1:A:9:ILE:HG21	1:A:42:LEU:HD22	5	0.41

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,291)	1:A:9:ILE:HG21	1:A:42:LEU:HD23	5	0.41
(1,291)	1:A:9:ILE:HG22	1:A:42:LEU:HD21	5	0.41
(1,291)	1:A:9:ILE:HG22	1:A:42:LEU:HD22	5	0.41
(1,291)	1:A:9:ILE:HG22	1:A:42:LEU:HD23	5	0.41
(1,291)	1:A:9:ILE:HG23	1:A:42:LEU:HD21	5	0.41
(1,291)	1:A:9:ILE:HG23	1:A:42:LEU:HD22	5	0.41
(1,291)	1:A:9:ILE:HG23	1:A:42:LEU:HD23	5	0.41
(1,288)	1:A:53:MET:HE1	1:A:61:LYS:HE3	6	0.41
(1,288)	1:A:53:MET:HE2	1:A:61:LYS:HE3	6	0.41
(1,288)	1:A:53:MET:HE3	1:A:61:LYS:HE3	6	0.41
(1,1485)	1:A:52:LYS:HD2	1:A:54:SER:H	9	0.41
(1,1485)	1:A:52:LYS:HD3	1:A:54:SER:H	9	0.41
(1,1395)	1:A:19:LYS:HD2	1:A:20:ASP:HA	9	0.41
(1,1395)	1:A:19:LYS:HD3	1:A:20:ASP:HA	9	0.41
(1,1344)	1:A:9:ILE:HG12	1:A:32:LYS:HB3	10	0.41
(1,1344)	1:A:9:ILE:HG13	1:A:32:LYS:HB3	10	0.41
(1,1137)	1:A:41:SER:H	1:A:42:LEU:HD21	1	0.41
(1,1137)	1:A:41:SER:H	1:A:42:LEU:HD22	1	0.41
(1,1137)	1:A:41:SER:H	1:A:42:LEU:HD23	1	0.41
(1,1136)	1:A:41:SER:H	1:A:42:LEU:HD21	1	0.41
(1,1136)	1:A:41:SER:H	1:A:42:LEU:HD22	1	0.41
(1,1136)	1:A:41:SER:H	1:A:42:LEU:HD23	1	0.41
(1,1119)	1:A:74:GLN:H	1:A:74:GLN:HG2	5	0.41
(1,943)	1:A:75:ASP:H	1:A:76:VAL:HB	8	0.4
(1,756)	1:A:34:THR:H	1:A:40:ALA:H	4	0.4
(1,649)	1:A:9:ILE:H	1:A:33:LEU:HG	6	0.4
(1,621)	1:A:38:ASN:HD22	1:A:97:ALA:H	6	0.4
(1,607)	1:A:66:ARG:H	1:A:97:ALA:H	10	0.4
(1,353)	1:A:7:MET:HE1	1:A:42:LEU:HD21	9	0.4
(1,353)	1:A:7:MET:HE1	1:A:42:LEU:HD22	9	0.4
(1,353)	1:A:7:MET:HE1	1:A:42:LEU:HD23	9	0.4
(1,353)	1:A:7:MET:HE2	1:A:42:LEU:HD21	9	0.4
(1,353)	1:A:7:MET:HE2	1:A:42:LEU:HD22	9	0.4
(1,353)	1:A:7:MET:HE2	1:A:42:LEU:HD23	9	0.4
(1,353)	1:A:7:MET:HE3	1:A:42:LEU:HD21	9	0.4
(1,353)	1:A:7:MET:HE3	1:A:42:LEU:HD22	9	0.4
(1,353)	1:A:7:MET:HE3	1:A:42:LEU:HD23	9	0.4
(1,320)	1:A:53:MET:HE1	1:A:57:MET:HA	9	0.4
(1,320)	1:A:53:MET:HE2	1:A:57:MET:HA	9	0.4
(1,320)	1:A:53:MET:HE3	1:A:57:MET:HA	9	0.4
(1,310)	1:A:53:MET:HE1	1:A:61:LYS:H	2	0.4
(1,310)	1:A:53:MET:HE2	1:A:61:LYS:H	2	0.4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,310)	1:A:53:MET:HE3	1:A:61:LYS:H	2	0.4
(1,1447)	1:A:45:SER:HB2	1:A:46:THR:H	2	0.4
(1,1447)	1:A:45:SER:HB3	1:A:46:THR:H	2	0.4
(1,1145)	1:A:4:LEU:HD11	1:A:32:LYS:H	5	0.4
(1,1145)	1:A:4:LEU:HD12	1:A:32:LYS:H	5	0.4
(1,1145)	1:A:4:LEU:HD13	1:A:32:LYS:H	5	0.4
(1,983)	1:A:11:THR:H	1:A:43:CYS:HA	4	0.39
(1,582)	1:A:10:LEU:H	1:A:42:LEU:HD21	7	0.39
(1,582)	1:A:10:LEU:H	1:A:42:LEU:HD22	7	0.39
(1,582)	1:A:10:LEU:H	1:A:42:LEU:HD23	7	0.39
(1,353)	1:A:7:MET:HE1	1:A:42:LEU:HD21	5	0.39
(1,353)	1:A:7:MET:HE1	1:A:42:LEU:HD22	5	0.39
(1,353)	1:A:7:MET:HE1	1:A:42:LEU:HD23	5	0.39
(1,353)	1:A:7:MET:HE2	1:A:42:LEU:HD21	5	0.39
(1,353)	1:A:7:MET:HE2	1:A:42:LEU:HD22	5	0.39
(1,353)	1:A:7:MET:HE2	1:A:42:LEU:HD23	5	0.39
(1,353)	1:A:7:MET:HE3	1:A:42:LEU:HD21	5	0.39
(1,353)	1:A:7:MET:HE3	1:A:42:LEU:HD22	5	0.39
(1,353)	1:A:7:MET:HE3	1:A:42:LEU:HD23	5	0.39
(1,1446)	1:A:45:SER:H	1:A:70:GLU:HG2	1	0.39
(1,1446)	1:A:45:SER:H	1:A:70:GLU:HG3	1	0.39
(1,1166)	1:A:4:LEU:H	1:A:30:GLY:HA3	5	0.39
(1,1093)	1:A:90:HIS:HB3	1:A:91:SER:H	1	0.39
(1,943)	1:A:75:ASP:H	1:A:76:VAL:HB	9	0.38
(1,619)	1:A:38:ASN:HD21	1:A:97:ALA:H	2	0.38
(1,607)	1:A:66:ARG:H	1:A:97:ALA:H	1	0.38
(1,1485)	1:A:52:LYS:HD2	1:A:54:SER:H	3	0.38
(1,1485)	1:A:52:LYS:HD3	1:A:54:SER:H	3	0.38
(1,1384)	1:A:18:ASN:HD21	1:A:20:ASP:H	1	0.38
(1,1384)	1:A:18:ASN:HD22	1:A:20:ASP:H	1	0.38
(1,1384)	1:A:18:ASN:HD21	1:A:20:ASP:H	3	0.38
(1,1384)	1:A:18:ASN:HD22	1:A:20:ASP:H	3	0.38
(1,1259)	1:A:38:ASN:HD22	1:A:96:GLY:H	7	0.38
(1,1166)	1:A:4:LEU:H	1:A:30:GLY:HA3	9	0.38
(1,1134)	1:A:91:SER:H	1:A:92:LEU:HB2	6	0.38
(1,1093)	1:A:90:HIS:HB3	1:A:91:SER:H	3	0.38
(1,1093)	1:A:90:HIS:HB3	1:A:91:SER:H	4	0.38
(1,943)	1:A:75:ASP:H	1:A:76:VAL:HB	6	0.37
(1,649)	1:A:9:ILE:H	1:A:33:LEU:HG	5	0.37
(1,648)	1:A:65:VAL:HB	1:A:67:VAL:H	1	0.37
(1,648)	1:A:65:VAL:HB	1:A:67:VAL:H	2	0.37
(1,353)	1:A:7:MET:HE1	1:A:42:LEU:HD21	4	0.37

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,353)	1:A:7:MET:HE1	1:A:42:LEU:HD22	4	0.37
(1,353)	1:A:7:MET:HE1	1:A:42:LEU:HD23	4	0.37
(1,353)	1:A:7:MET:HE2	1:A:42:LEU:HD21	4	0.37
(1,353)	1:A:7:MET:HE2	1:A:42:LEU:HD22	4	0.37
(1,353)	1:A:7:MET:HE2	1:A:42:LEU:HD23	4	0.37
(1,353)	1:A:7:MET:HE3	1:A:42:LEU:HD21	4	0.37
(1,353)	1:A:7:MET:HE3	1:A:42:LEU:HD22	4	0.37
(1,353)	1:A:7:MET:HE3	1:A:42:LEU:HD23	4	0.37
(1,1062)	1:A:7:MET:H	1:A:32:LYS:H	3	0.37
(1,1052)	1:A:63:ALA:H	1:A:65:VAL:HG11	10	0.37
(1,1052)	1:A:63:ALA:H	1:A:65:VAL:HG12	10	0.37
(1,1052)	1:A:63:ALA:H	1:A:65:VAL:HG13	10	0.37
(1,1051)	1:A:63:ALA:H	1:A:65:VAL:HG11	10	0.37
(1,1051)	1:A:63:ALA:H	1:A:65:VAL:HG12	10	0.37
(1,1051)	1:A:63:ALA:H	1:A:65:VAL:HG13	10	0.37
(1,900)	1:A:45:SER:HB3	1:A:68:VAL:H	3	0.36
(1,756)	1:A:34:THR:H	1:A:40:ALA:H	3	0.36
(1,649)	1:A:9:ILE:H	1:A:33:LEU:HG	10	0.36
(1,481)	1:A:49:GLU:HB3	1:A:57:MET:HG3	1	0.36
(1,1396)	1:A:19:LYS:HD2	1:A:21:GLU:H	9	0.36
(1,1396)	1:A:19:LYS:HD3	1:A:21:GLU:H	9	0.36
(1,1276)	1:A:4:LEU:HG	1:A:31:GLY:H	5	0.36
(1,983)	1:A:11:THR:H	1:A:43:CYS:HA	5	0.35
(1,768)	1:A:11:THR:HA	1:A:45:SER:H	4	0.35
(1,665)	1:A:65:VAL:HG11	1:A:97:ALA:H	5	0.35
(1,665)	1:A:65:VAL:HG12	1:A:97:ALA:H	5	0.35
(1,665)	1:A:65:VAL:HG13	1:A:97:ALA:H	5	0.35
(1,481)	1:A:49:GLU:HB3	1:A:57:MET:HG3	3	0.35
(1,320)	1:A:53:MET:HE1	1:A:57:MET:HA	6	0.35
(1,320)	1:A:53:MET:HE2	1:A:57:MET:HA	6	0.35
(1,320)	1:A:53:MET:HE3	1:A:57:MET:HA	6	0.35
(1,1606)	1:A:91:SER:HB2	1:A:92:LEU:HG	7	0.35
(1,1606)	1:A:91:SER:HB3	1:A:92:LEU:HG	7	0.35
(1,1344)	1:A:9:ILE:HG12	1:A:32:LYS:HB3	1	0.35
(1,1344)	1:A:9:ILE:HG13	1:A:32:LYS:HB3	1	0.35
(1,1344)	1:A:9:ILE:HG12	1:A:32:LYS:HB3	8	0.35
(1,1344)	1:A:9:ILE:HG13	1:A:32:LYS:HB3	8	0.35
(1,756)	1:A:34:THR:H	1:A:40:ALA:H	1	0.34
(1,665)	1:A:65:VAL:HG11	1:A:97:ALA:H	9	0.34
(1,665)	1:A:65:VAL:HG12	1:A:97:ALA:H	9	0.34
(1,665)	1:A:65:VAL:HG13	1:A:97:ALA:H	9	0.34
(1,607)	1:A:66:ARG:H	1:A:97:ALA:H	3	0.34

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,607)	1:A:66:ARG:H	1:A:97:ALA:H	6	0.34
(1,353)	1:A:7:MET:HE1	1:A:42:LEU:HD21	6	0.34
(1,353)	1:A:7:MET:HE1	1:A:42:LEU:HD22	6	0.34
(1,353)	1:A:7:MET:HE1	1:A:42:LEU:HD23	6	0.34
(1,353)	1:A:7:MET:HE2	1:A:42:LEU:HD21	6	0.34
(1,353)	1:A:7:MET:HE2	1:A:42:LEU:HD22	6	0.34
(1,353)	1:A:7:MET:HE2	1:A:42:LEU:HD23	6	0.34
(1,353)	1:A:7:MET:HE3	1:A:42:LEU:HD21	6	0.34
(1,353)	1:A:7:MET:HE3	1:A:42:LEU:HD22	6	0.34
(1,353)	1:A:7:MET:HE3	1:A:42:LEU:HD23	6	0.34
(1,353)	1:A:7:MET:HE1	1:A:42:LEU:HD21	7	0.34
(1,353)	1:A:7:MET:HE1	1:A:42:LEU:HD22	7	0.34
(1,353)	1:A:7:MET:HE1	1:A:42:LEU:HD23	7	0.34
(1,353)	1:A:7:MET:HE2	1:A:42:LEU:HD21	7	0.34
(1,353)	1:A:7:MET:HE2	1:A:42:LEU:HD22	7	0.34
(1,353)	1:A:7:MET:HE2	1:A:42:LEU:HD23	7	0.34
(1,353)	1:A:7:MET:HE3	1:A:42:LEU:HD21	7	0.34
(1,353)	1:A:7:MET:HE3	1:A:42:LEU:HD22	7	0.34
(1,353)	1:A:7:MET:HE3	1:A:42:LEU:HD23	7	0.34
(1,320)	1:A:53:MET:HE1	1:A:57:MET:HA	1	0.34
(1,320)	1:A:53:MET:HE2	1:A:57:MET:HA	1	0.34
(1,320)	1:A:53:MET:HE3	1:A:57:MET:HA	1	0.34
(1,288)	1:A:53:MET:HE1	1:A:61:LYS:HE3	8	0.34
(1,288)	1:A:53:MET:HE2	1:A:61:LYS:HE3	8	0.34
(1,288)	1:A:53:MET:HE3	1:A:61:LYS:HE3	8	0.34
(1,180)	1:A:15:LEU:HA	1:A:46:THR:HG21	10	0.34
(1,180)	1:A:15:LEU:HA	1:A:46:THR:HG22	10	0.34
(1,180)	1:A:15:LEU:HA	1:A:46:THR:HG23	10	0.34
(1,179)	1:A:15:LEU:HA	1:A:46:THR:HG21	10	0.34
(1,179)	1:A:15:LEU:HA	1:A:46:THR:HG22	10	0.34
(1,179)	1:A:15:LEU:HA	1:A:46:THR:HG23	10	0.34
(1,1447)	1:A:45:SER:HB2	1:A:46:THR:H	5	0.34
(1,1447)	1:A:45:SER:HB3	1:A:46:THR:H	5	0.34
(1,1384)	1:A:18:ASN:HD21	1:A:20:ASP:H	7	0.34
(1,1384)	1:A:18:ASN:HD22	1:A:20:ASP:H	7	0.34
(1,935)	1:A:76:VAL:H	1:A:76:VAL:HB	1	0.33
(1,935)	1:A:76:VAL:H	1:A:76:VAL:HB	3	0.33
(1,935)	1:A:76:VAL:H	1:A:76:VAL:HB	5	0.33
(1,935)	1:A:76:VAL:H	1:A:76:VAL:HB	7	0.33
(1,935)	1:A:76:VAL:H	1:A:76:VAL:HB	9	0.33
(1,935)	1:A:76:VAL:H	1:A:76:VAL:HB	10	0.33
(1,665)	1:A:65:VAL:HG11	1:A:97:ALA:H	3	0.33

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,665)	1:A:65:VAL:HG12	1:A:97:ALA:H	3	0.33
(1,665)	1:A:65:VAL:HG13	1:A:97:ALA:H	3	0.33
(1,665)	1:A:65:VAL:HG11	1:A:97:ALA:H	4	0.33
(1,665)	1:A:65:VAL:HG12	1:A:97:ALA:H	4	0.33
(1,665)	1:A:65:VAL:HG13	1:A:97:ALA:H	4	0.33
(1,320)	1:A:53:MET:HE1	1:A:57:MET:HA	5	0.33
(1,320)	1:A:53:MET:HE2	1:A:57:MET:HA	5	0.33
(1,320)	1:A:53:MET:HE3	1:A:57:MET:HA	5	0.33
(1,1344)	1:A:9:ILE:HG12	1:A:32:LYS:HB3	6	0.33
(1,1344)	1:A:9:ILE:HG13	1:A:32:LYS:HB3	6	0.33
(1,1062)	1:A:7:MET:H	1:A:32:LYS:H	5	0.33
(1,1052)	1:A:63:ALA:H	1:A:65:VAL:HG11	2	0.33
(1,1052)	1:A:63:ALA:H	1:A:65:VAL:HG12	2	0.33
(1,1052)	1:A:63:ALA:H	1:A:65:VAL:HG13	2	0.33
(1,1051)	1:A:63:ALA:H	1:A:65:VAL:HG11	2	0.33
(1,1051)	1:A:63:ALA:H	1:A:65:VAL:HG12	2	0.33
(1,1051)	1:A:63:ALA:H	1:A:65:VAL:HG13	2	0.33
(1,935)	1:A:76:VAL:H	1:A:76:VAL:HB	2	0.32
(1,935)	1:A:76:VAL:H	1:A:76:VAL:HB	4	0.32
(1,935)	1:A:76:VAL:H	1:A:76:VAL:HB	6	0.32
(1,935)	1:A:76:VAL:H	1:A:76:VAL:HB	8	0.32
(1,926)	1:A:74:GLN:HG2	1:A:75:ASP:H	9	0.32
(1,799)	1:A:70:GLU:H	1:A:70:GLU:HB3	8	0.32
(1,1485)	1:A:52:LYS:HD2	1:A:54:SER:H	2	0.32
(1,1485)	1:A:52:LYS:HD3	1:A:54:SER:H	2	0.32
(1,799)	1:A:70:GLU:H	1:A:70:GLU:HB3	6	0.31
(1,320)	1:A:53:MET:HE1	1:A:57:MET:HA	4	0.31
(1,320)	1:A:53:MET:HE2	1:A:57:MET:HA	4	0.31
(1,320)	1:A:53:MET:HE3	1:A:57:MET:HA	4	0.31
(1,320)	1:A:53:MET:HE1	1:A:57:MET:HA	7	0.31
(1,320)	1:A:53:MET:HE2	1:A:57:MET:HA	7	0.31
(1,320)	1:A:53:MET:HE3	1:A:57:MET:HA	7	0.31
(1,1447)	1:A:45:SER:HB2	1:A:46:THR:H	7	0.31
(1,1447)	1:A:45:SER:HB3	1:A:46:THR:H	7	0.31
(1,1344)	1:A:9:ILE:HG12	1:A:32:LYS:HB3	5	0.31
(1,1344)	1:A:9:ILE:HG13	1:A:32:LYS:HB3	5	0.31
(1,1047)	1:A:10:LEU:HD11	1:A:34:THR:H	2	0.31
(1,1047)	1:A:10:LEU:HD12	1:A:34:THR:H	2	0.31
(1,1047)	1:A:10:LEU:HD13	1:A:34:THR:H	2	0.31
(1,683)	1:A:12:LEU:H	1:A:43:CYS:HA	10	0.3
(1,648)	1:A:65:VAL:HB	1:A:67:VAL:H	3	0.3
(1,1446)	1:A:45:SER:H	1:A:70:GLU:HG2	9	0.3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1446)	1:A:45:SER:H	1:A:70:GLU:HG3	9	0.3
(1,926)	1:A:74:GLN:HG2	1:A:75:ASP:H	6	0.29
(1,799)	1:A:70:GLU:H	1:A:70:GLU:HB3	10	0.29
(1,737)	1:A:15:LEU:HD11	1:A:22:ALA:H	8	0.29
(1,737)	1:A:15:LEU:HD12	1:A:22:ALA:H	8	0.29
(1,737)	1:A:15:LEU:HD13	1:A:22:ALA:H	8	0.29
(1,736)	1:A:15:LEU:HD11	1:A:22:ALA:H	8	0.29
(1,736)	1:A:15:LEU:HD12	1:A:22:ALA:H	8	0.29
(1,736)	1:A:15:LEU:HD13	1:A:22:ALA:H	8	0.29
(1,649)	1:A:9:ILE:H	1:A:33:LEU:HG	9	0.29
(1,607)	1:A:66:ARG:H	1:A:97:ALA:H	9	0.29
(1,347)	1:A:25:MET:HE1	1:A:29:LEU:HD21	6	0.29
(1,347)	1:A:25:MET:HE1	1:A:29:LEU:HD22	6	0.29
(1,347)	1:A:25:MET:HE1	1:A:29:LEU:HD23	6	0.29
(1,347)	1:A:25:MET:HE2	1:A:29:LEU:HD21	6	0.29
(1,347)	1:A:25:MET:HE2	1:A:29:LEU:HD22	6	0.29
(1,347)	1:A:25:MET:HE2	1:A:29:LEU:HD23	6	0.29
(1,347)	1:A:25:MET:HE3	1:A:29:LEU:HD21	6	0.29
(1,347)	1:A:25:MET:HE3	1:A:29:LEU:HD22	6	0.29
(1,347)	1:A:25:MET:HE3	1:A:29:LEU:HD23	6	0.29
(1,1606)	1:A:91:SER:HB2	1:A:92:LEU:HG	10	0.29
(1,1606)	1:A:91:SER:HB3	1:A:92:LEU:HG	10	0.29
(1,1419)	1:A:25:MET:HG2	1:A:74:GLN:HE21	9	0.29
(1,1419)	1:A:25:MET:HG2	1:A:74:GLN:HE22	9	0.29
(1,129)	1:A:42:LEU:HD11	1:A:43:CYS:H	5	0.29
(1,129)	1:A:42:LEU:HD12	1:A:43:CYS:H	5	0.29
(1,129)	1:A:42:LEU:HD13	1:A:43:CYS:H	5	0.29
(1,1137)	1:A:41:SER:H	1:A:42:LEU:HD21	8	0.29
(1,1137)	1:A:41:SER:H	1:A:42:LEU:HD22	8	0.29
(1,1137)	1:A:41:SER:H	1:A:42:LEU:HD23	8	0.29
(1,1136)	1:A:41:SER:H	1:A:42:LEU:HD21	8	0.29
(1,1136)	1:A:41:SER:H	1:A:42:LEU:HD22	8	0.29
(1,1136)	1:A:41:SER:H	1:A:42:LEU:HD23	8	0.29
(1,109)	1:A:28:LYS:HG3	1:A:29:LEU:HA	10	0.29
(1,983)	1:A:11:THR:H	1:A:43:CYS:HA	9	0.28
(1,907)	1:A:72:PHE:HB2	1:A:76:VAL:H	6	0.28
(1,621)	1:A:38:ASN:HD22	1:A:97:ALA:H	8	0.28
(1,505)	1:A:22:ALA:HA	1:A:25:MET:HA	10	0.28
(1,1093)	1:A:90:HIS:HB3	1:A:91:SER:H	2	0.28
(1,1052)	1:A:63:ALA:H	1:A:65:VAL:HG11	5	0.28
(1,1052)	1:A:63:ALA:H	1:A:65:VAL:HG12	5	0.28
(1,1052)	1:A:63:ALA:H	1:A:65:VAL:HG13	5	0.28

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1051)	1:A:63:ALA:H	1:A:65:VAL:HG11	5	0.28
(1,1051)	1:A:63:ALA:H	1:A:65:VAL:HG12	5	0.28
(1,1051)	1:A:63:ALA:H	1:A:65:VAL:HG13	5	0.28
(1,799)	1:A:70:GLU:H	1:A:70:GLU:HB3	4	0.27
(1,765)	1:A:38:ASN:HD22	1:A:98:GLU:H	3	0.27
(1,590)	1:A:42:LEU:HA	1:A:44:ILE:H	6	0.27
(1,1344)	1:A:9:ILE:HG12	1:A:32:LYS:HB3	7	0.27
(1,1344)	1:A:9:ILE:HG13	1:A:32:LYS:HB3	7	0.27
(1,1252)	1:A:92:LEU:HD11	1:A:93:SER:H	9	0.27
(1,1252)	1:A:92:LEU:HD12	1:A:93:SER:H	9	0.27
(1,1252)	1:A:92:LEU:HD13	1:A:93:SER:H	9	0.27
(1,109)	1:A:28:LYS:HG3	1:A:29:LEU:HA	1	0.27
(1,1028)	1:A:23:LYS:H	1:A:23:LYS:HB3	10	0.27
(1,683)	1:A:12:LEU:H	1:A:43:CYS:HA	3	0.26
(1,458)	1:A:25:MET:HA	1:A:28:LYS:HG2	6	0.26
(1,446)	1:A:4:LEU:HD11	1:A:7:MET:HB2	9	0.26
(1,446)	1:A:4:LEU:HD12	1:A:7:MET:HB2	9	0.26
(1,446)	1:A:4:LEU:HD13	1:A:7:MET:HB2	9	0.26
(1,1447)	1:A:45:SER:HB2	1:A:46:THR:H	8	0.26
(1,1447)	1:A:45:SER:HB3	1:A:46:THR:H	8	0.26
(1,1396)	1:A:19:LYS:HD2	1:A:21:GLU:H	10	0.26
(1,1396)	1:A:19:LYS:HD3	1:A:21:GLU:H	10	0.26
(1,1346)	1:A:12:LEU:H	1:A:45:SER:HB2	4	0.26
(1,1346)	1:A:12:LEU:H	1:A:45:SER:HB3	4	0.26
(1,1344)	1:A:9:ILE:HG12	1:A:32:LYS:HB3	9	0.26
(1,1344)	1:A:9:ILE:HG13	1:A:32:LYS:HB3	9	0.26
(1,1252)	1:A:92:LEU:HD11	1:A:93:SER:H	6	0.26
(1,1252)	1:A:92:LEU:HD12	1:A:93:SER:H	6	0.26
(1,1252)	1:A:92:LEU:HD13	1:A:93:SER:H	6	0.26
(1,1052)	1:A:63:ALA:H	1:A:65:VAL:HG11	3	0.26
(1,1052)	1:A:63:ALA:H	1:A:65:VAL:HG12	3	0.26
(1,1052)	1:A:63:ALA:H	1:A:65:VAL:HG13	3	0.26
(1,1051)	1:A:63:ALA:H	1:A:65:VAL:HG11	3	0.26
(1,1051)	1:A:63:ALA:H	1:A:65:VAL:HG12	3	0.26
(1,1051)	1:A:63:ALA:H	1:A:65:VAL:HG13	3	0.26
(1,1028)	1:A:23:LYS:H	1:A:23:LYS:HB3	6	0.26
(1,983)	1:A:11:THR:H	1:A:43:CYS:HA	2	0.25
(1,983)	1:A:11:THR:H	1:A:43:CYS:HA	8	0.25
(1,666)	1:A:65:VAL:HG21	1:A:97:ALA:H	7	0.25
(1,666)	1:A:65:VAL:HG22	1:A:97:ALA:H	7	0.25
(1,666)	1:A:65:VAL:HG23	1:A:97:ALA:H	7	0.25
(1,634)	1:A:69:CYS:HB2	1:A:92:LEU:H	7	0.25

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,621)	1:A:38:ASN:HD22	1:A:97:ALA:H	10	0.25
(1,310)	1:A:53:MET:HE1	1:A:61:LYS:H	9	0.25
(1,310)	1:A:53:MET:HE2	1:A:61:LYS:H	9	0.25
(1,310)	1:A:53:MET:HE3	1:A:61:LYS:H	9	0.25
(1,281)	1:A:72:PHE:HB2	1:A:86:LEU:HB3	5	0.25
(1,1606)	1:A:91:SER:HB2	1:A:92:LEU:HG	4	0.25
(1,1606)	1:A:91:SER:HB3	1:A:92:LEU:HG	4	0.25
(1,1047)	1:A:10:LEU:HD11	1:A:34:THR:H	8	0.25
(1,1047)	1:A:10:LEU:HD12	1:A:34:THR:H	8	0.25
(1,1047)	1:A:10:LEU:HD13	1:A:34:THR:H	8	0.25
(1,1028)	1:A:23:LYS:H	1:A:23:LYS:HB3	4	0.25
(1,983)	1:A:11:THR:H	1:A:43:CYS:HA	1	0.24
(1,900)	1:A:45:SER:HB3	1:A:68:VAL:H	6	0.24
(1,790)	1:A:50:VAL:H	1:A:57:MET:HG3	3	0.24
(1,768)	1:A:11:THR:HA	1:A:45:SER:H	3	0.24
(1,768)	1:A:11:THR:HA	1:A:45:SER:H	7	0.24
(1,602)	1:A:15:LEU:H	1:A:15:LEU:HD21	1	0.24
(1,602)	1:A:15:LEU:H	1:A:15:LEU:HD22	1	0.24
(1,602)	1:A:15:LEU:H	1:A:15:LEU:HD23	1	0.24
(1,601)	1:A:15:LEU:H	1:A:15:LEU:HD21	1	0.24
(1,601)	1:A:15:LEU:H	1:A:15:LEU:HD22	1	0.24
(1,601)	1:A:15:LEU:H	1:A:15:LEU:HD23	1	0.24
(1,590)	1:A:42:LEU:HA	1:A:44:ILE:H	7	0.24
(1,288)	1:A:53:MET:HE1	1:A:61:LYS:HE3	7	0.24
(1,288)	1:A:53:MET:HE2	1:A:61:LYS:HE3	7	0.24
(1,288)	1:A:53:MET:HE3	1:A:61:LYS:HE3	7	0.24
(1,281)	1:A:72:PHE:HB2	1:A:86:LEU:HB3	4	0.24
(1,1028)	1:A:23:LYS:H	1:A:23:LYS:HB3	2	0.24
(1,1028)	1:A:23:LYS:H	1:A:23:LYS:HB3	7	0.24
(1,900)	1:A:45:SER:HB3	1:A:68:VAL:H	10	0.23
(1,893)	1:A:79:SER:HB2	1:A:81:LYS:H	7	0.23
(1,304)	1:A:50:VAL:H	1:A:53:MET:HE1	4	0.23
(1,304)	1:A:50:VAL:H	1:A:53:MET:HE2	4	0.23
(1,304)	1:A:50:VAL:H	1:A:53:MET:HE3	4	0.23
(1,304)	1:A:50:VAL:H	1:A:53:MET:HE1	7	0.23
(1,304)	1:A:50:VAL:H	1:A:53:MET:HE2	7	0.23
(1,304)	1:A:50:VAL:H	1:A:53:MET:HE3	7	0.23
(1,1606)	1:A:91:SER:HB2	1:A:92:LEU:HG	6	0.23
(1,1606)	1:A:91:SER:HB3	1:A:92:LEU:HG	6	0.23
(1,1028)	1:A:23:LYS:H	1:A:23:LYS:HB3	3	0.23
(1,1028)	1:A:23:LYS:H	1:A:23:LYS:HB3	5	0.23
(1,1028)	1:A:23:LYS:H	1:A:23:LYS:HB3	8	0.23

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,907)	1:A:72:PHE:HB2	1:A:76:VAL:H	4	0.22
(1,790)	1:A:50:VAL:H	1:A:57:MET:HG3	5	0.22
(1,683)	1:A:12:LEU:H	1:A:43:CYS:HA	2	0.22
(1,607)	1:A:66:ARG:H	1:A:97:ALA:H	4	0.22
(1,1606)	1:A:91:SER:HB2	1:A:92:LEU:HG	8	0.22
(1,1606)	1:A:91:SER:HB3	1:A:92:LEU:HG	8	0.22
(1,157)	1:A:68:VAL:H	1:A:92:LEU:HD21	10	0.22
(1,157)	1:A:68:VAL:H	1:A:92:LEU:HD22	10	0.22
(1,157)	1:A:68:VAL:H	1:A:92:LEU:HD23	10	0.22
(1,156)	1:A:68:VAL:H	1:A:92:LEU:HD21	10	0.22
(1,156)	1:A:68:VAL:H	1:A:92:LEU:HD22	10	0.22
(1,156)	1:A:68:VAL:H	1:A:92:LEU:HD23	10	0.22
(1,1426)	1:A:28:LYS:HD2	1:A:29:LEU:H	6	0.22
(1,1426)	1:A:28:LYS:HD3	1:A:29:LEU:H	6	0.22
(1,129)	1:A:42:LEU:HD11	1:A:43:CYS:H	6	0.22
(1,129)	1:A:42:LEU:HD12	1:A:43:CYS:H	6	0.22
(1,129)	1:A:42:LEU:HD13	1:A:43:CYS:H	6	0.22
(1,1127)	1:A:28:LYS:HD2	1:A:29:LEU:H	6	0.22
(1,983)	1:A:11:THR:H	1:A:43:CYS:HA	6	0.21
(1,983)	1:A:11:THR:H	1:A:43:CYS:HA	7	0.21
(1,907)	1:A:72:PHE:HB2	1:A:76:VAL:H	8	0.21
(1,505)	1:A:22:ALA:HA	1:A:25:MET:HA	9	0.21
(1,481)	1:A:49:GLU:HB3	1:A:57:MET:HG3	10	0.21
(1,476)	1:A:69:CYS:HB3	1:A:71:ASP:HA	6	0.21
(1,1446)	1:A:45:SER:H	1:A:70:GLU:HG2	7	0.21
(1,1446)	1:A:45:SER:H	1:A:70:GLU:HG3	7	0.21
(1,1028)	1:A:23:LYS:H	1:A:23:LYS:HB3	1	0.21
(1,907)	1:A:72:PHE:HB2	1:A:76:VAL:H	10	0.2
(1,783)	1:A:57:MET:HG3	1:A:58:GLU:H	4	0.2
(1,648)	1:A:65:VAL:HB	1:A:67:VAL:H	10	0.2
(1,1606)	1:A:91:SER:HB2	1:A:92:LEU:HG	1	0.2
(1,1606)	1:A:91:SER:HB3	1:A:92:LEU:HG	1	0.2
(1,1485)	1:A:52:LYS:HD2	1:A:54:SER:H	1	0.2
(1,1485)	1:A:52:LYS:HD3	1:A:54:SER:H	1	0.2
(1,1447)	1:A:45:SER:HB2	1:A:46:THR:H	9	0.2
(1,1447)	1:A:45:SER:HB3	1:A:46:THR:H	9	0.2
(1,1215)	1:A:5:SER:H	1:A:31:GLY:HA2	6	0.2
(1,1052)	1:A:63:ALA:H	1:A:65:VAL:HG11	7	0.2
(1,1052)	1:A:63:ALA:H	1:A:65:VAL:HG12	7	0.2
(1,1052)	1:A:63:ALA:H	1:A:65:VAL:HG13	7	0.2
(1,1051)	1:A:63:ALA:H	1:A:65:VAL:HG11	7	0.2
(1,1051)	1:A:63:ALA:H	1:A:65:VAL:HG12	7	0.2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1051)	1:A:63:ALA:H	1:A:65:VAL:HG13	7	0.2
(1,893)	1:A:79:SER:HB2	1:A:81:LYS:H	5	0.19
(1,790)	1:A:50:VAL:H	1:A:57:MET:HG3	8	0.19
(1,790)	1:A:50:VAL:H	1:A:57:MET:HG3	10	0.19
(1,768)	1:A:11:THR:HA	1:A:45:SER:H	8	0.19
(1,621)	1:A:38:ASN:HD22	1:A:97:ALA:H	2	0.19
(1,590)	1:A:42:LEU:HA	1:A:44:ILE:H	4	0.19
(1,292)	1:A:9:ILE:HG21	1:A:42:LEU:HD21	4	0.19
(1,292)	1:A:9:ILE:HG21	1:A:42:LEU:HD22	4	0.19
(1,292)	1:A:9:ILE:HG21	1:A:42:LEU:HD23	4	0.19
(1,292)	1:A:9:ILE:HG22	1:A:42:LEU:HD21	4	0.19
(1,292)	1:A:9:ILE:HG22	1:A:42:LEU:HD22	4	0.19
(1,292)	1:A:9:ILE:HG22	1:A:42:LEU:HD23	4	0.19
(1,292)	1:A:9:ILE:HG23	1:A:42:LEU:HD21	4	0.19
(1,292)	1:A:9:ILE:HG23	1:A:42:LEU:HD22	4	0.19
(1,292)	1:A:9:ILE:HG23	1:A:42:LEU:HD23	4	0.19
(1,291)	1:A:9:ILE:HG21	1:A:42:LEU:HD21	4	0.19
(1,291)	1:A:9:ILE:HG21	1:A:42:LEU:HD22	4	0.19
(1,291)	1:A:9:ILE:HG21	1:A:42:LEU:HD23	4	0.19
(1,291)	1:A:9:ILE:HG22	1:A:42:LEU:HD21	4	0.19
(1,291)	1:A:9:ILE:HG22	1:A:42:LEU:HD22	4	0.19
(1,291)	1:A:9:ILE:HG22	1:A:42:LEU:HD23	4	0.19
(1,291)	1:A:9:ILE:HG23	1:A:42:LEU:HD21	4	0.19
(1,291)	1:A:9:ILE:HG23	1:A:42:LEU:HD22	4	0.19
(1,291)	1:A:9:ILE:HG23	1:A:42:LEU:HD23	4	0.19
(1,1606)	1:A:91:SER:HB2	1:A:92:LEU:HG	2	0.19
(1,1606)	1:A:91:SER:HB3	1:A:92:LEU:HG	2	0.19
(1,1547)	1:A:73:LEU:HB3	1:A:77:SER:HB2	2	0.19
(1,1547)	1:A:73:LEU:HB3	1:A:77:SER:HB3	2	0.19
(1,1384)	1:A:18:ASN:HD21	1:A:20:ASP:H	9	0.19
(1,1384)	1:A:18:ASN:HD22	1:A:20:ASP:H	9	0.19
(1,1241)	1:A:66:ARG:HA	1:A:93:SER:H	5	0.19
(1,1224)	1:A:38:ASN:HD21	1:A:97:ALA:HB1	3	0.19
(1,1224)	1:A:38:ASN:HD21	1:A:97:ALA:HB2	3	0.19
(1,1224)	1:A:38:ASN:HD21	1:A:97:ALA:HB3	3	0.19
(1,1125)	1:A:83:LEU:HG	1:A:84:GLN:H	5	0.19
(1,764)	1:A:38:ASN:HD21	1:A:40:ALA:H	7	0.18
(1,737)	1:A:15:LEU:HD11	1:A:22:ALA:H	9	0.18
(1,737)	1:A:15:LEU:HD12	1:A:22:ALA:H	9	0.18
(1,737)	1:A:15:LEU:HD13	1:A:22:ALA:H	9	0.18
(1,736)	1:A:15:LEU:HD11	1:A:22:ALA:H	9	0.18
(1,736)	1:A:15:LEU:HD12	1:A:22:ALA:H	9	0.18

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,736)	1:A:15:LEU:HD13	1:A:22:ALA:H	9	0.18
(1,590)	1:A:42:LEU:HA	1:A:44:ILE:H	8	0.18
(1,304)	1:A:50:VAL:H	1:A:53:MET:HE1	9	0.18
(1,304)	1:A:50:VAL:H	1:A:53:MET:HE2	9	0.18
(1,304)	1:A:50:VAL:H	1:A:53:MET:HE3	9	0.18
(1,296)	1:A:53:MET:HE1	1:A:54:SER:H	4	0.18
(1,296)	1:A:53:MET:HE2	1:A:54:SER:H	4	0.18
(1,296)	1:A:53:MET:HE3	1:A:54:SER:H	4	0.18
(1,1301)	1:A:4:LEU:HB3	1:A:30:GLY:H	7	0.18
(1,1127)	1:A:28:LYS:HD2	1:A:29:LEU:H	3	0.18
(1,1062)	1:A:7:MET:H	1:A:32:LYS:H	6	0.18
(1,926)	1:A:74:GLN:HG2	1:A:75:ASP:H	5	0.17
(1,907)	1:A:72:PHE:HB2	1:A:76:VAL:H	1	0.17
(1,783)	1:A:57:MET:HG3	1:A:58:GLU:H	5	0.17
(1,649)	1:A:9:ILE:H	1:A:33:LEU:HG	4	0.17
(1,602)	1:A:15:LEU:H	1:A:15:LEU:HD21	3	0.17
(1,602)	1:A:15:LEU:H	1:A:15:LEU:HD22	3	0.17
(1,602)	1:A:15:LEU:H	1:A:15:LEU:HD23	3	0.17
(1,601)	1:A:15:LEU:H	1:A:15:LEU:HD21	3	0.17
(1,601)	1:A:15:LEU:H	1:A:15:LEU:HD22	3	0.17
(1,601)	1:A:15:LEU:H	1:A:15:LEU:HD23	3	0.17
(1,590)	1:A:42:LEU:HA	1:A:44:ILE:H	3	0.17
(1,310)	1:A:53:MET:HE1	1:A:61:LYS:H	8	0.17
(1,310)	1:A:53:MET:HE2	1:A:61:LYS:H	8	0.17
(1,310)	1:A:53:MET:HE3	1:A:61:LYS:H	8	0.17
(1,1617)	1:A:97:ALA:HA	1:A:98:GLU:HB2	9	0.17
(1,1617)	1:A:97:ALA:HA	1:A:98:GLU:HB3	9	0.17
(1,1359)	1:A:16:SER:H	1:A:70:GLU:HG2	2	0.17
(1,1359)	1:A:16:SER:H	1:A:70:GLU:HG3	2	0.17
(1,1346)	1:A:12:LEU:H	1:A:45:SER:HB2	3	0.17
(1,1346)	1:A:12:LEU:H	1:A:45:SER:HB3	3	0.17
(1,1301)	1:A:4:LEU:HB3	1:A:30:GLY:H	9	0.17
(1,1215)	1:A:5:SER:H	1:A:31:GLY:HA2	10	0.17
(1,1166)	1:A:4:LEU:H	1:A:30:GLY:HA3	3	0.17
(1,109)	1:A:28:LYS:HG3	1:A:29:LEU:HA	7	0.17
(1,1027)	1:A:23:LYS:H	1:A:23:LYS:HB2	9	0.17
(1,790)	1:A:50:VAL:H	1:A:57:MET:HG3	2	0.16
(1,7)	1:A:15:LEU:HG	1:A:70:GLU:HB3	9	0.16
(1,607)	1:A:66:ARG:H	1:A:97:ALA:H	5	0.16
(1,310)	1:A:53:MET:HE1	1:A:61:LYS:H	1	0.16
(1,310)	1:A:53:MET:HE2	1:A:61:LYS:H	1	0.16
(1,310)	1:A:53:MET:HE3	1:A:61:LYS:H	1	0.16

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,180)	1:A:15:LEU:HA	1:A:46:THR:HG21	7	0.16
(1,180)	1:A:15:LEU:HA	1:A:46:THR:HG22	7	0.16
(1,180)	1:A:15:LEU:HA	1:A:46:THR:HG23	7	0.16
(1,179)	1:A:15:LEU:HA	1:A:46:THR:HG21	7	0.16
(1,179)	1:A:15:LEU:HA	1:A:46:THR:HG22	7	0.16
(1,179)	1:A:15:LEU:HA	1:A:46:THR:HG23	7	0.16
(1,1447)	1:A:45:SER:HB2	1:A:46:THR:H	1	0.16
(1,1447)	1:A:45:SER:HB3	1:A:46:THR:H	1	0.16
(1,1301)	1:A:4:LEU:HB3	1:A:30:GLY:H	3	0.16
(1,963)	1:A:6:ASN:H	1:A:7:MET:H	10	0.15
(1,930)	1:A:68:VAL:H	1:A:92:LEU:HG	9	0.15
(1,789)	1:A:71:ASP:H	1:A:72:PHE:HB3	4	0.15
(1,783)	1:A:57:MET:HG3	1:A:58:GLU:H	7	0.15
(1,768)	1:A:11:THR:HA	1:A:45:SER:H	9	0.15
(1,619)	1:A:38:ASN:HD21	1:A:97:ALA:H	4	0.15
(1,1426)	1:A:28:LYS:HD2	1:A:29:LEU:H	2	0.15
(1,1426)	1:A:28:LYS:HD3	1:A:29:LEU:H	2	0.15
(1,1293)	1:A:30:GLY:H	1:A:31:GLY:H	4	0.15
(1,1276)	1:A:4:LEU:HG	1:A:31:GLY:H	10	0.15
(1,1166)	1:A:4:LEU:H	1:A:30:GLY:HA3	6	0.15
(1,784)	1:A:57:MET:HG2	1:A:58:GLU:H	9	0.14
(1,783)	1:A:57:MET:HG3	1:A:58:GLU:H	2	0.14
(1,783)	1:A:57:MET:HG3	1:A:58:GLU:H	6	0.14
(1,590)	1:A:42:LEU:HA	1:A:44:ILE:H	5	0.14
(1,1617)	1:A:97:ALA:HA	1:A:98:GLU:HB2	7	0.14
(1,1617)	1:A:97:ALA:HA	1:A:98:GLU:HB3	7	0.14
(1,1479)	1:A:51:GLU:HB2	1:A:52:LYS:HD2	7	0.14
(1,1479)	1:A:51:GLU:HB2	1:A:52:LYS:HD3	7	0.14
(1,1479)	1:A:51:GLU:HB3	1:A:52:LYS:HD2	7	0.14
(1,1479)	1:A:51:GLU:HB3	1:A:52:LYS:HD3	7	0.14
(1,1395)	1:A:19:LYS:HD2	1:A:20:ASP:HA	8	0.14
(1,1395)	1:A:19:LYS:HD3	1:A:20:ASP:HA	8	0.14
(1,1344)	1:A:9:ILE:HG12	1:A:32:LYS:HB3	3	0.14
(1,1344)	1:A:9:ILE:HG13	1:A:32:LYS:HB3	3	0.14
(1,1047)	1:A:10:LEU:HD11	1:A:34:THR:H	5	0.14
(1,1047)	1:A:10:LEU:HD12	1:A:34:THR:H	5	0.14
(1,1047)	1:A:10:LEU:HD13	1:A:34:THR:H	5	0.14
(1,790)	1:A:50:VAL:H	1:A:57:MET:HG3	7	0.13
(1,783)	1:A:57:MET:HG3	1:A:58:GLU:H	1	0.13
(1,683)	1:A:12:LEU:H	1:A:43:CYS:HA	6	0.13
(1,602)	1:A:15:LEU:H	1:A:15:LEU:HD21	5	0.13
(1,602)	1:A:15:LEU:H	1:A:15:LEU:HD22	5	0.13

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,602)	1:A:15:LEU:H	1:A:15:LEU:HD23	5	0.13
(1,601)	1:A:15:LEU:H	1:A:15:LEU:HD21	5	0.13
(1,601)	1:A:15:LEU:H	1:A:15:LEU:HD22	5	0.13
(1,601)	1:A:15:LEU:H	1:A:15:LEU:HD23	5	0.13
(1,476)	1:A:69:CYS:HB3	1:A:71:ASP:HA	5	0.13
(1,304)	1:A:50:VAL:H	1:A:53:MET:HE1	6	0.13
(1,304)	1:A:50:VAL:H	1:A:53:MET:HE2	6	0.13
(1,304)	1:A:50:VAL:H	1:A:53:MET:HE3	6	0.13
(1,1623)	1:A:99:VAL:H	1:A:100:LYS:HD2	8	0.13
(1,1623)	1:A:99:VAL:H	1:A:100:LYS:HD3	8	0.13
(1,1426)	1:A:28:LYS:HD2	1:A:29:LEU:H	8	0.13
(1,1426)	1:A:28:LYS:HD3	1:A:29:LEU:H	8	0.13
(1,129)	1:A:42:LEU:HD11	1:A:43:CYS:H	7	0.13
(1,129)	1:A:42:LEU:HD12	1:A:43:CYS:H	7	0.13
(1,129)	1:A:42:LEU:HD13	1:A:43:CYS:H	7	0.13
(1,1166)	1:A:4:LEU:H	1:A:30:GLY:HA3	2	0.13
(1,1034)	1:A:33:LEU:HG	1:A:34:THR:H	8	0.13
(1,900)	1:A:45:SER:HB3	1:A:68:VAL:H	4	0.12
(1,784)	1:A:57:MET:HG2	1:A:58:GLU:H	5	0.12
(1,612)	1:A:96:GLY:H	1:A:97:ALA:H	7	0.12
(1,590)	1:A:42:LEU:HA	1:A:44:ILE:H	1	0.12
(1,1549)	1:A:74:GLN:H	1:A:74:GLN:HE21	2	0.12
(1,1549)	1:A:74:GLN:H	1:A:74:GLN:HE22	2	0.12
(1,1426)	1:A:28:LYS:HD2	1:A:29:LEU:H	3	0.12
(1,1426)	1:A:28:LYS:HD3	1:A:29:LEU:H	3	0.12
(1,1396)	1:A:19:LYS:HD2	1:A:21:GLU:H	1	0.12
(1,1396)	1:A:19:LYS:HD3	1:A:21:GLU:H	1	0.12
(1,1293)	1:A:30:GLY:H	1:A:31:GLY:H	1	0.12
(1,1293)	1:A:30:GLY:H	1:A:31:GLY:H	5	0.12
(1,129)	1:A:42:LEU:HD11	1:A:43:CYS:H	9	0.12
(1,129)	1:A:42:LEU:HD12	1:A:43:CYS:H	9	0.12
(1,129)	1:A:42:LEU:HD13	1:A:43:CYS:H	9	0.12
(1,1052)	1:A:63:ALA:H	1:A:65:VAL:HG11	4	0.12
(1,1052)	1:A:63:ALA:H	1:A:65:VAL:HG12	4	0.12
(1,1052)	1:A:63:ALA:H	1:A:65:VAL:HG13	4	0.12
(1,1052)	1:A:63:ALA:H	1:A:65:VAL:HG11	9	0.12
(1,1052)	1:A:63:ALA:H	1:A:65:VAL:HG12	9	0.12
(1,1052)	1:A:63:ALA:H	1:A:65:VAL:HG13	9	0.12
(1,1051)	1:A:63:ALA:H	1:A:65:VAL:HG11	4	0.12
(1,1051)	1:A:63:ALA:H	1:A:65:VAL:HG12	4	0.12
(1,1051)	1:A:63:ALA:H	1:A:65:VAL:HG13	4	0.12
(1,1051)	1:A:63:ALA:H	1:A:65:VAL:HG11	9	0.12

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1051)	1:A:63:ALA:H	1:A:65:VAL:HG12	9	0.12
(1,1051)	1:A:63:ALA:H	1:A:65:VAL:HG13	9	0.12
(1,86)	1:A:9:ILE:HD11	1:A:42:LEU:HD21	10	0.11
(1,86)	1:A:9:ILE:HD11	1:A:42:LEU:HD22	10	0.11
(1,86)	1:A:9:ILE:HD11	1:A:42:LEU:HD23	10	0.11
(1,86)	1:A:9:ILE:HD12	1:A:42:LEU:HD21	10	0.11
(1,86)	1:A:9:ILE:HD12	1:A:42:LEU:HD22	10	0.11
(1,86)	1:A:9:ILE:HD12	1:A:42:LEU:HD23	10	0.11
(1,86)	1:A:9:ILE:HD13	1:A:42:LEU:HD21	10	0.11
(1,86)	1:A:9:ILE:HD13	1:A:42:LEU:HD22	10	0.11
(1,86)	1:A:9:ILE:HD13	1:A:42:LEU:HD23	10	0.11
(1,85)	1:A:9:ILE:HD11	1:A:42:LEU:HD21	10	0.11
(1,85)	1:A:9:ILE:HD11	1:A:42:LEU:HD22	10	0.11
(1,85)	1:A:9:ILE:HD11	1:A:42:LEU:HD23	10	0.11
(1,85)	1:A:9:ILE:HD12	1:A:42:LEU:HD21	10	0.11
(1,85)	1:A:9:ILE:HD12	1:A:42:LEU:HD22	10	0.11
(1,85)	1:A:9:ILE:HD12	1:A:42:LEU:HD23	10	0.11
(1,85)	1:A:9:ILE:HD13	1:A:42:LEU:HD21	10	0.11
(1,85)	1:A:9:ILE:HD13	1:A:42:LEU:HD22	10	0.11
(1,85)	1:A:9:ILE:HD13	1:A:42:LEU:HD23	10	0.11
(1,837)	1:A:12:LEU:HD21	1:A:61:LYS:H	1	0.11
(1,837)	1:A:12:LEU:HD22	1:A:61:LYS:H	1	0.11
(1,837)	1:A:12:LEU:HD23	1:A:61:LYS:H	1	0.11
(1,790)	1:A:50:VAL:H	1:A:57:MET:HG3	9	0.11
(1,784)	1:A:57:MET:HG2	1:A:58:GLU:H	2	0.11
(1,784)	1:A:57:MET:HG2	1:A:58:GLU:H	3	0.11
(1,784)	1:A:57:MET:HG2	1:A:58:GLU:H	7	0.11
(1,737)	1:A:15:LEU:HD11	1:A:22:ALA:H	6	0.11
(1,737)	1:A:15:LEU:HD12	1:A:22:ALA:H	6	0.11
(1,737)	1:A:15:LEU:HD13	1:A:22:ALA:H	6	0.11
(1,736)	1:A:15:LEU:HD11	1:A:22:ALA:H	6	0.11
(1,736)	1:A:15:LEU:HD12	1:A:22:ALA:H	6	0.11
(1,736)	1:A:15:LEU:HD13	1:A:22:ALA:H	6	0.11
(1,694)	1:A:69:CYS:HB3	1:A:92:LEU:H	2	0.11
(1,634)	1:A:69:CYS:HB2	1:A:92:LEU:H	2	0.11
(1,634)	1:A:69:CYS:HB2	1:A:92:LEU:H	4	0.11
(1,590)	1:A:42:LEU:HA	1:A:44:ILE:H	2	0.11
(1,521)	1:A:14:LYS:HA	1:A:15:LEU:HD21	8	0.11
(1,521)	1:A:14:LYS:HA	1:A:15:LEU:HD22	8	0.11
(1,521)	1:A:14:LYS:HA	1:A:15:LEU:HD23	8	0.11
(1,520)	1:A:14:LYS:HA	1:A:15:LEU:HD21	8	0.11
(1,520)	1:A:14:LYS:HA	1:A:15:LEU:HD22	8	0.11

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,520)	1:A:14:LYS:HA	1:A:15:LEU:HD23	8	0.11
(1,330)	1:A:25:MET:HE1	1:A:77:SER:HA	6	0.11
(1,330)	1:A:25:MET:HE2	1:A:77:SER:HA	6	0.11
(1,330)	1:A:25:MET:HE3	1:A:77:SER:HA	6	0.11
(1,310)	1:A:53:MET:HE1	1:A:61:LYS:H	5	0.11
(1,310)	1:A:53:MET:HE2	1:A:61:LYS:H	5	0.11
(1,310)	1:A:53:MET:HE3	1:A:61:LYS:H	5	0.11
(1,292)	1:A:9:ILE:HG21	1:A:42:LEU:HD21	6	0.11
(1,292)	1:A:9:ILE:HG21	1:A:42:LEU:HD22	6	0.11
(1,292)	1:A:9:ILE:HG21	1:A:42:LEU:HD23	6	0.11
(1,292)	1:A:9:ILE:HG22	1:A:42:LEU:HD21	6	0.11
(1,292)	1:A:9:ILE:HG22	1:A:42:LEU:HD22	6	0.11
(1,292)	1:A:9:ILE:HG22	1:A:42:LEU:HD23	6	0.11
(1,292)	1:A:9:ILE:HG23	1:A:42:LEU:HD21	6	0.11
(1,292)	1:A:9:ILE:HG23	1:A:42:LEU:HD22	6	0.11
(1,292)	1:A:9:ILE:HG23	1:A:42:LEU:HD23	6	0.11
(1,291)	1:A:9:ILE:HG21	1:A:42:LEU:HD21	6	0.11
(1,291)	1:A:9:ILE:HG21	1:A:42:LEU:HD22	6	0.11
(1,291)	1:A:9:ILE:HG21	1:A:42:LEU:HD23	6	0.11
(1,291)	1:A:9:ILE:HG22	1:A:42:LEU:HD21	6	0.11
(1,291)	1:A:9:ILE:HG22	1:A:42:LEU:HD22	6	0.11
(1,291)	1:A:9:ILE:HG22	1:A:42:LEU:HD23	6	0.11
(1,291)	1:A:9:ILE:HG23	1:A:42:LEU:HD21	6	0.11
(1,291)	1:A:9:ILE:HG23	1:A:42:LEU:HD22	6	0.11
(1,291)	1:A:9:ILE:HG23	1:A:42:LEU:HD23	6	0.11
(1,180)	1:A:15:LEU:HA	1:A:46:THR:HG21	6	0.11
(1,180)	1:A:15:LEU:HA	1:A:46:THR:HG22	6	0.11
(1,180)	1:A:15:LEU:HA	1:A:46:THR:HG23	6	0.11
(1,179)	1:A:15:LEU:HA	1:A:46:THR:HG21	6	0.11
(1,179)	1:A:15:LEU:HA	1:A:46:THR:HG22	6	0.11
(1,179)	1:A:15:LEU:HA	1:A:46:THR:HG23	6	0.11
(1,1344)	1:A:9:ILE:HG12	1:A:32:LYS:HB3	4	0.11
(1,1344)	1:A:9:ILE:HG13	1:A:32:LYS:HB3	4	0.11
(1,1301)	1:A:4:LEU:HB3	1:A:30:GLY:H	10	0.11
(1,1293)	1:A:30:GLY:H	1:A:31:GLY:H	3	0.11
(1,1293)	1:A:30:GLY:H	1:A:31:GLY:H	7	0.11
(1,1293)	1:A:30:GLY:H	1:A:31:GLY:H	9	0.11
(1,129)	1:A:42:LEU:HD11	1:A:43:CYS:H	4	0.11
(1,129)	1:A:42:LEU:HD12	1:A:43:CYS:H	4	0.11
(1,129)	1:A:42:LEU:HD13	1:A:43:CYS:H	4	0.11
(1,1252)	1:A:92:LEU:HD11	1:A:93:SER:H	4	0.11
(1,1252)	1:A:92:LEU:HD12	1:A:93:SER:H	4	0.11

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1252)	1:A:92:LEU:HD13	1:A:93:SER:H	4	0.11
(1,1215)	1:A:5:SER:H	1:A:31:GLY:HA2	9	0.11
(1,1052)	1:A:63:ALA:H	1:A:65:VAL:HG11	1	0.11
(1,1052)	1:A:63:ALA:H	1:A:65:VAL:HG12	1	0.11
(1,1052)	1:A:63:ALA:H	1:A:65:VAL:HG13	1	0.11
(1,1051)	1:A:63:ALA:H	1:A:65:VAL:HG11	1	0.11
(1,1051)	1:A:63:ALA:H	1:A:65:VAL:HG12	1	0.11
(1,1051)	1:A:63:ALA:H	1:A:65:VAL:HG13	1	0.11
(1,1034)	1:A:33:LEU:HG	1:A:34:THR:H	1	0.11
(1,1034)	1:A:33:LEU:HG	1:A:34:THR:H	4	0.11

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

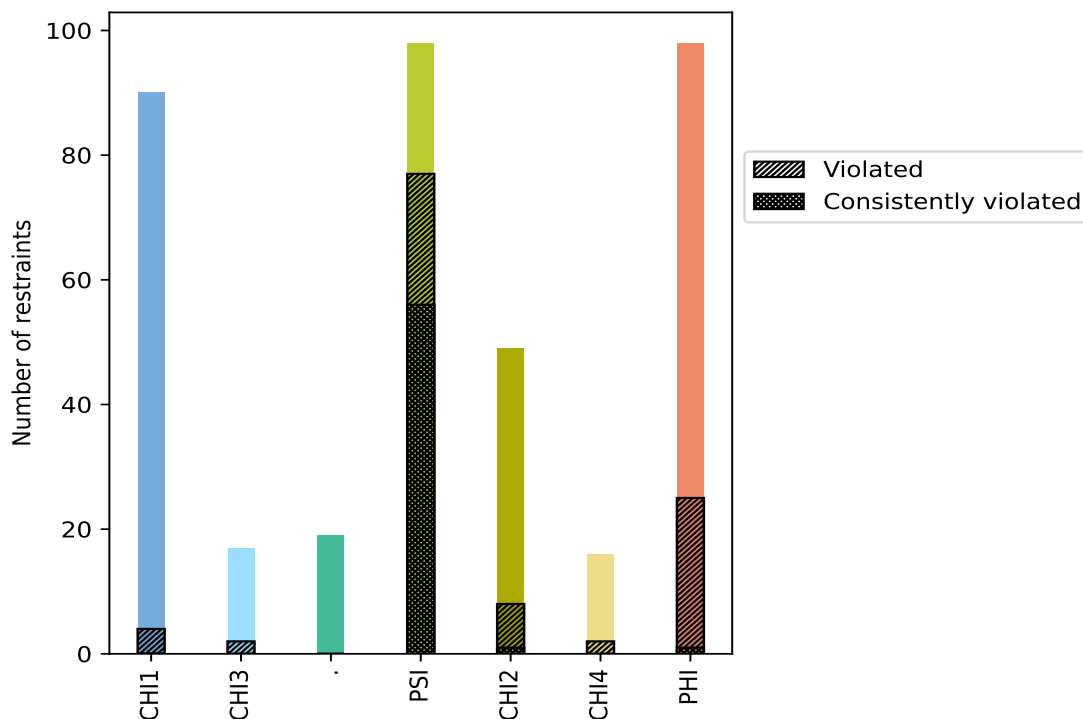
10.1 Summary of dihedral-angle violations [i](#)

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

Angle type	Count	% ¹	Violated ³			Consistently Violated ⁴		
			Count	% ²	% ¹	Count	% ²	% ¹
CHI1	90	23.3	4	4.4	1.0	0	0.0	0.0
CHI3	17	4.4	2	11.8	0.5	0	0.0	0.0
.	19	4.9	0	0.0	0.0	0	0.0	0.0
PSI	98	25.3	77	78.6	19.9	56	57.1	14.5
CHI2	49	12.7	8	16.3	2.1	1	2.0	0.3
CHI4	16	4.1	2	12.5	0.5	0	0.0	0.0
PHI	98	25.3	25	25.5	6.5	1	1.0	0.3
Total	387	100.0	118	30.5	30.5	58	15.0	15.0

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

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



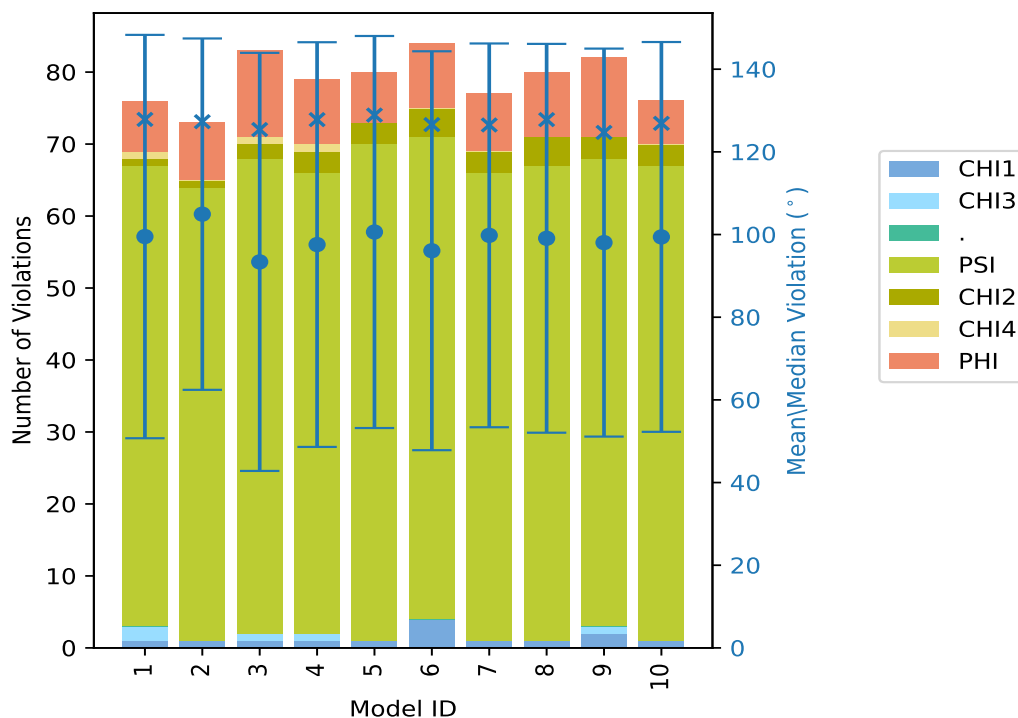
Violated and consistently violated restraints are shown using different hatch patterns in their respective categories

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

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

Model ID	Number of violations							Total	Mean (°)	Max (°)	SD (°)	Median (°)
	CHI1	CHI3	PSI	CHI2	CHI4	PHI	.					
1	1	2	0	64	1	1	7	76	99.51	140.0	48.79	127.85
2	1	0	0	63	1	0	8	73	104.93	140.0	42.5	127.3
3	1	1	0	66	2	1	12	83	93.38	139.8	50.57	125.4
4	1	1	0	64	3	1	9	79	97.57	139.2	48.95	127.8
5	1	0	0	69	3	0	7	80	100.61	140.0	47.42	128.9
6	4	0	0	67	4	0	9	84	96.08	139.8	48.25	126.6
7	1	0	0	65	3	0	8	77	99.8	139.8	46.42	126.5
8	1	0	0	66	4	0	9	80	99.09	139.7	47.03	127.8
9	2	1	0	65	3	0	11	82	98.05	138.7	46.93	124.7
10	1	0	0	66	3	0	6	76	99.42	139.4	47.15	126.9

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



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

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

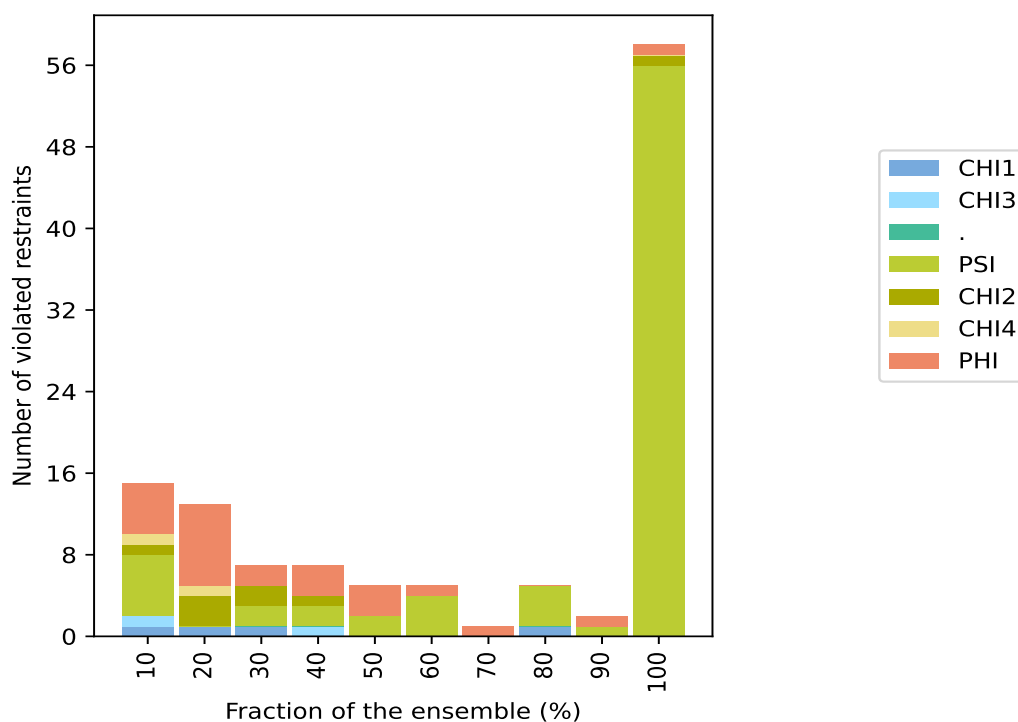
Violation analysis may find that some restraints are violated in very few models and some are violated in most of models. The following table provides this information as number of violated

restraints for a given fraction of ensemble.

Number of violated restraints								Fraction of the ensemble	
CHI1	CHI3	.	PSI	CHI2	CHI4	PHI	Total	Count ¹	%
1	1	0	6	1	1	5	15	1	10.0
1	0	0	0	3	1	8	13	2	20.0
1	0	0	2	2	0	2	7	3	30.0
0	1	0	2	1	0	3	7	4	40.0
0	0	0	2	0	0	3	5	5	50.0
0	0	0	4	0	0	1	5	6	60.0
0	0	0	0	0	0	1	1	7	70.0
1	0	0	4	0	0	0	5	8	80.0
0	0	0	1	0	0	1	2	9	90.0
0	0	0	56	1	0	1	58	10	100.0

¹ Number of models with violations

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

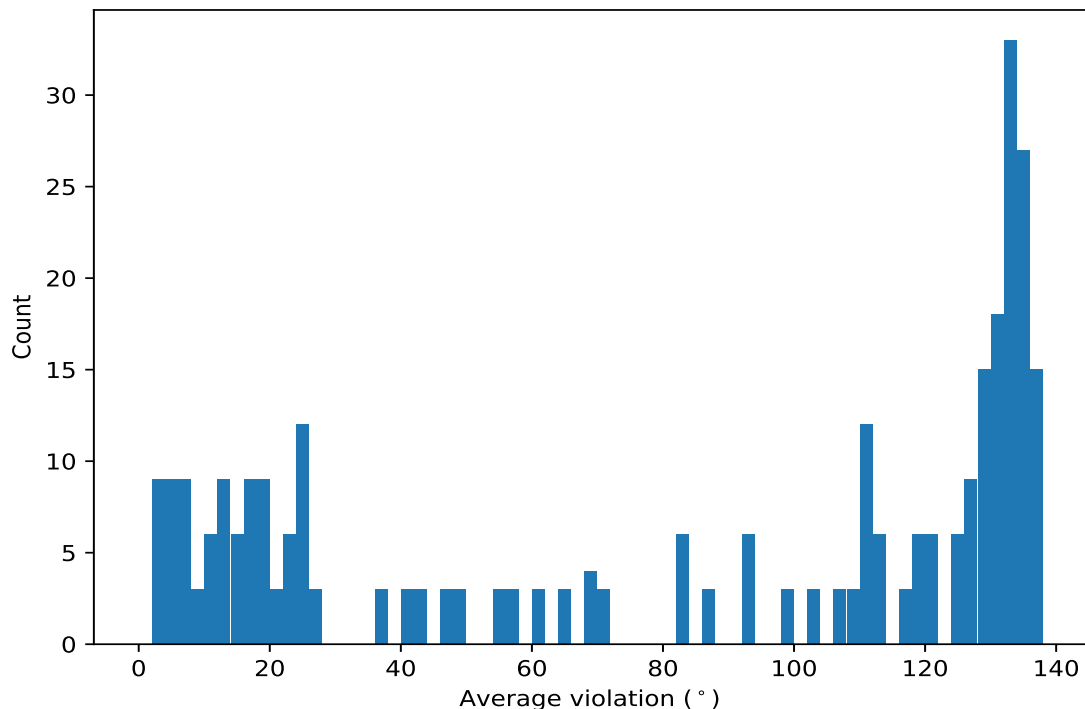


10.4 Most violated dihedral-angle restraints in the ensemble [i](#)

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

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

in the ensemble



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

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

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Models ¹	Mean	SD ²	Median
(1,103)	1:A:58:GLU:N	1:A:58:GLU:CA	1:A:58:GLU:C	1:A:59:GLU:N	10	137.66	1.08	137.6
(1,103)	1:A:58:GLU:N	1:A:58:GLU:CA	1:A:58:GLU:C	1:A:59:GLU:N	10	137.66	1.08	137.6
(1,103)	1:A:58:GLU:N	1:A:58:GLU:CA	1:A:58:GLU:C	1:A:59:GLU:N	10	137.66	1.08	137.6
(1,135)	1:A:74:GLN:N	1:A:74:GLN:CA	1:A:74:GLN:C	1:A:75:ASP:N	10	137.17	1.72	136.5
(1,135)	1:A:74:GLN:N	1:A:74:GLN:CA	1:A:74:GLN:C	1:A:75:ASP:N	10	137.17	1.72	136.5
(1,135)	1:A:74:GLN:N	1:A:74:GLN:CA	1:A:74:GLN:C	1:A:75:ASP:N	10	137.17	1.72	136.5
(1,65)	1:A:39:LYS:N	1:A:39:LYS:CA	1:A:39:LYS:C	1:A:40:ALA:N	10	136.77	6.6	139.1
(1,65)	1:A:39:LYS:N	1:A:39:LYS:CA	1:A:39:LYS:C	1:A:40:ALA:N	10	136.77	6.6	139.1
(1,65)	1:A:39:LYS:N	1:A:39:LYS:CA	1:A:39:LYS:C	1:A:40:ALA:N	10	136.77	6.6	139.1
(1,127)	1:A:70:GLU:N	1:A:70:GLU:CA	1:A:70:GLU:C	1:A:71:ASP:N	10	136.73	3.06	138.15
(1,127)	1:A:70:GLU:N	1:A:70:GLU:CA	1:A:70:GLU:C	1:A:71:ASP:N	10	136.73	3.06	138.15
(1,127)	1:A:70:GLU:N	1:A:70:GLU:CA	1:A:70:GLU:C	1:A:71:ASP:N	10	136.73	3.06	138.15
(1,139)	1:A:76:VAL:N	1:A:76:VAL:CA	1:A:76:VAL:C	1:A:77:SER:N	10	136.05	1.51	136.35
(1,139)	1:A:76:VAL:N	1:A:76:VAL:CA	1:A:76:VAL:C	1:A:77:SER:N	10	136.05	1.51	136.35
(1,139)	1:A:76:VAL:N	1:A:76:VAL:CA	1:A:76:VAL:C	1:A:77:SER:N	10	136.05	1.51	136.35
(1,157)	1:A:85:GLU:N	1:A:85:GLU:CA	1:A:85:GLU:C	1:A:86:LEU:N	10	135.9	1.91	136.35
(1,157)	1:A:85:GLU:N	1:A:85:GLU:CA	1:A:85:GLU:C	1:A:86:LEU:N	10	135.9	1.91	136.35
(1,157)	1:A:85:GLU:N	1:A:85:GLU:CA	1:A:85:GLU:C	1:A:86:LEU:N	10	135.9	1.91	136.35
(1,163)	1:A:88:SER:N	1:A:88:SER:CA	1:A:88:SER:C	1:A:89:ALA:N	10	135.6	2.79	134.6
(1,163)	1:A:88:SER:N	1:A:88:SER:CA	1:A:88:SER:C	1:A:89:ALA:N	10	135.6	2.79	134.6

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Models ¹	Mean	SD ²	Median
(1,163)	1:A:88:SER:N	1:A:88:SER:CA	1:A:88:SER:C	1:A:89:ALA:N	10	135.6	2.79	134.6
(1,101)	1:A:57:MET:N	1:A:57:MET:CA	1:A:57:MET:C	1:A:58:GLU:N	10	135.38	0.92	135.35
(1,101)	1:A:57:MET:N	1:A:57:MET:CA	1:A:57:MET:C	1:A:58:GLU:N	10	135.38	0.92	135.35
(1,101)	1:A:57:MET:N	1:A:57:MET:CA	1:A:57:MET:C	1:A:58:GLU:N	10	135.38	0.92	135.35
(1,97)	1:A:55:LYS:N	1:A:55:LYS:CA	1:A:55:LYS:C	1:A:56:LYS:N	10	135.18	2.01	134.95
(1,97)	1:A:55:LYS:N	1:A:55:LYS:CA	1:A:55:LYS:C	1:A:56:LYS:N	10	135.18	2.01	134.95
(1,97)	1:A:55:LYS:N	1:A:55:LYS:CA	1:A:55:LYS:C	1:A:56:LYS:N	10	135.18	2.01	134.95
(1,81)	1:A:47:LYS:N	1:A:47:LYS:CA	1:A:47:LYS:C	1:A:48:LYS:N	10	135.04	3.07	135.6
(1,81)	1:A:47:LYS:N	1:A:47:LYS:CA	1:A:47:LYS:C	1:A:48:LYS:N	10	135.04	3.07	135.6
(1,81)	1:A:47:LYS:N	1:A:47:LYS:CA	1:A:47:LYS:C	1:A:48:LYS:N	10	135.04	3.07	135.6
(1,47)	1:A:27:GLU:N	1:A:27:GLU:CA	1:A:27:GLU:C	1:A:28:LYS:N	10	134.78	3.42	136.1
(1,47)	1:A:27:GLU:N	1:A:27:GLU:CA	1:A:27:GLU:C	1:A:28:LYS:N	10	134.78	3.42	136.1
(1,47)	1:A:27:GLU:N	1:A:27:GLU:CA	1:A:27:GLU:C	1:A:28:LYS:N	10	134.78	3.42	136.1
(1,85)	1:A:49:GLU:N	1:A:49:GLU:CA	1:A:49:GLU:C	1:A:50:VAL:N	10	134.74	2.44	134.85
(1,85)	1:A:49:GLU:N	1:A:49:GLU:CA	1:A:49:GLU:C	1:A:50:VAL:N	10	134.74	2.44	134.85
(1,85)	1:A:49:GLU:N	1:A:49:GLU:CA	1:A:49:GLU:C	1:A:50:VAL:N	10	134.74	2.44	134.85
(1,51)	1:A:29:LEU:N	1:A:29:LEU:CA	1:A:29:LEU:C	1:A:30:GLY:N	10	134.26	1.11	134.2
(1,51)	1:A:29:LEU:N	1:A:29:LEU:CA	1:A:29:LEU:C	1:A:30:GLY:N	10	134.26	1.11	134.2
(1,51)	1:A:29:LEU:N	1:A:29:LEU:CA	1:A:29:LEU:C	1:A:30:GLY:N	10	134.26	1.11	134.2
(1,91)	1:A:52:LYS:N	1:A:52:LYS:CA	1:A:52:LYS:C	1:A:53:MET:N	10	134.03	2.04	133.8
(1,91)	1:A:52:LYS:N	1:A:52:LYS:CA	1:A:52:LYS:C	1:A:53:MET:N	10	134.03	2.04	133.8
(1,91)	1:A:52:LYS:N	1:A:52:LYS:CA	1:A:52:LYS:C	1:A:53:MET:N	10	134.03	2.04	133.8
(1,99)	1:A:56:LYS:N	1:A:56:LYS:CA	1:A:56:LYS:C	1:A:57:MET:N	10	133.93	1.21	134.1
(1,99)	1:A:56:LYS:N	1:A:56:LYS:CA	1:A:56:LYS:C	1:A:57:MET:N	10	133.93	1.21	134.1
(1,99)	1:A:56:LYS:N	1:A:56:LYS:CA	1:A:56:LYS:C	1:A:57:MET:N	10	133.93	1.21	134.1
(1,43)	1:A:25:MET:N	1:A:25:MET:CA	1:A:25:MET:C	1:A:26:ILE:N	10	133.71	2.27	134.4
(1,43)	1:A:25:MET:N	1:A:25:MET:CA	1:A:25:MET:C	1:A:26:ILE:N	10	133.71	2.27	134.4
(1,43)	1:A:25:MET:N	1:A:25:MET:CA	1:A:25:MET:C	1:A:26:ILE:N	10	133.71	2.27	134.4
(1,89)	1:A:51:GLU:N	1:A:51:GLU:CA	1:A:51:GLU:C	1:A:52:LYS:N	10	133.69	5.54	136.3
(1,89)	1:A:51:GLU:N	1:A:51:GLU:CA	1:A:51:GLU:C	1:A:52:LYS:N	10	133.69	5.54	136.3
(1,89)	1:A:51:GLU:N	1:A:51:GLU:CA	1:A:51:GLU:C	1:A:52:LYS:N	10	133.69	5.54	136.3
(1,155)	1:A:84:GLN:N	1:A:84:GLN:CA	1:A:84:GLN:C	1:A:85:GLU:N	10	133.39	1.5	133.7
(1,155)	1:A:84:GLN:N	1:A:84:GLN:CA	1:A:84:GLN:C	1:A:85:GLU:N	10	133.39	1.5	133.7
(1,155)	1:A:84:GLN:N	1:A:84:GLN:CA	1:A:84:GLN:C	1:A:85:GLU:N	10	133.39	1.5	133.7
(1,141)	1:A:77:SER:N	1:A:77:SER:CA	1:A:77:SER:C	1:A:78:ALA:N	10	132.93	2.04	132.45
(1,141)	1:A:77:SER:N	1:A:77:SER:CA	1:A:77:SER:C	1:A:78:ALA:N	10	132.93	2.04	132.45
(1,141)	1:A:77:SER:N	1:A:77:SER:CA	1:A:77:SER:C	1:A:78:ALA:N	10	132.93	2.04	132.45
(1,133)	1:A:73:LEU:N	1:A:73:LEU:CA	1:A:73:LEU:C	1:A:74:GLN:N	10	132.92	0.86	132.85
(1,133)	1:A:73:LEU:N	1:A:73:LEU:CA	1:A:73:LEU:C	1:A:74:GLN:N	10	132.92	0.86	132.85
(1,133)	1:A:73:LEU:N	1:A:73:LEU:CA	1:A:73:LEU:C	1:A:74:GLN:N	10	132.92	0.86	132.85
(1,131)	1:A:72:PHE:N	1:A:72:PHE:CA	1:A:72:PHE:C	1:A:73:LEU:N	10	132.68	1.23	132.7
(1,131)	1:A:72:PHE:N	1:A:72:PHE:CA	1:A:72:PHE:C	1:A:73:LEU:N	10	132.68	1.23	132.7
(1,131)	1:A:72:PHE:N	1:A:72:PHE:CA	1:A:72:PHE:C	1:A:73:LEU:N	10	132.68	1.23	132.7
(1,159)	1:A:86:LEU:N	1:A:86:LEU:CA	1:A:86:LEU:C	1:A:87:LEU:N	10	132.59	1.44	132.55
(1,159)	1:A:86:LEU:N	1:A:86:LEU:CA	1:A:86:LEU:C	1:A:87:LEU:N	10	132.59	1.44	132.55
(1,159)	1:A:86:LEU:N	1:A:86:LEU:CA	1:A:86:LEU:C	1:A:87:LEU:N	10	132.59	1.44	132.55
(1,39)	1:A:23:LYS:N	1:A:23:LYS:CA	1:A:23:LYS:C	1:A:24:ALA:N	10	132.41	1.39	132.05
(1,39)	1:A:23:LYS:N	1:A:23:LYS:CA	1:A:23:LYS:C	1:A:24:ALA:N	10	132.41	1.39	132.05
(1,39)	1:A:23:LYS:N	1:A:23:LYS:CA	1:A:23:LYS:C	1:A:24:ALA:N	10	132.41	1.39	132.05
(1,153)	1:A:83:LEU:N	1:A:83:LEU:CA	1:A:83:LEU:C	1:A:84:GLN:N	10	132.04	0.84	132.05
(1,153)	1:A:83:LEU:N	1:A:83:LEU:CA	1:A:83:LEU:C	1:A:84:GLN:N	10	132.04	0.84	132.05

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Models ¹	Mean	SD ²	Median
(1,153)	1:A:83:LEU:N	1:A:83:LEU:CA	1:A:83:LEU:C	1:A:84:GLN:N	10	132.04	0.84	132.05
(1,87)	1:A:50:VAL:N	1:A:50:VAL:CA	1:A:50:VAL:C	1:A:51:GLU:N	10	131.12	2.28	131.8
(1,87)	1:A:50:VAL:N	1:A:50:VAL:CA	1:A:50:VAL:C	1:A:51:GLU:N	10	131.12	2.28	131.8
(1,87)	1:A:50:VAL:N	1:A:50:VAL:CA	1:A:50:VAL:C	1:A:51:GLU:N	10	131.12	2.28	131.8
(1,35)	1:A:21:GLU:N	1:A:21:GLU:CA	1:A:21:GLU:C	1:A:22:ALA:N	10	130.89	5.74	132.25
(1,35)	1:A:21:GLU:N	1:A:21:GLU:CA	1:A:21:GLU:C	1:A:22:ALA:N	10	130.89	5.74	132.25
(1,35)	1:A:21:GLU:N	1:A:21:GLU:CA	1:A:21:GLU:C	1:A:22:ALA:N	10	130.89	5.74	132.25
(1,63)	1:A:38:ASN:N	1:A:38:ASN:CA	1:A:38:ASN:C	1:A:39:LYS:N	10	130.8	8.49	133.0
(1,63)	1:A:38:ASN:N	1:A:38:ASN:CA	1:A:38:ASN:C	1:A:39:LYS:N	10	130.8	8.49	133.0
(1,63)	1:A:38:ASN:N	1:A:38:ASN:CA	1:A:38:ASN:C	1:A:39:LYS:N	10	130.8	8.49	133.0
(1,45)	1:A:26:ILE:N	1:A:26:ILE:CA	1:A:26:ILE:C	1:A:27:GLU:N	10	130.77	0.41	130.8
(1,45)	1:A:26:ILE:N	1:A:26:ILE:CA	1:A:26:ILE:C	1:A:27:GLU:N	10	130.77	0.41	130.8
(1,45)	1:A:26:ILE:N	1:A:26:ILE:CA	1:A:26:ILE:C	1:A:27:GLU:N	10	130.77	0.41	130.8
(1,105)	1:A:59:GLU:N	1:A:59:GLU:CA	1:A:59:GLU:C	1:A:60:VAL:N	10	130.59	1.3	130.2
(1,105)	1:A:59:GLU:N	1:A:59:GLU:CA	1:A:59:GLU:C	1:A:60:VAL:N	10	130.59	1.3	130.2
(1,105)	1:A:59:GLU:N	1:A:59:GLU:CA	1:A:59:GLU:C	1:A:60:VAL:N	10	130.59	1.3	130.2
(1,33)	1:A:20:ASP:N	1:A:20:ASP:CA	1:A:20:ASP:C	1:A:21:GLU:N	10	130.26	6.29	132.4
(1,33)	1:A:20:ASP:N	1:A:20:ASP:CA	1:A:20:ASP:C	1:A:21:GLU:N	10	130.26	6.29	132.4
(1,33)	1:A:20:ASP:N	1:A:20:ASP:CA	1:A:20:ASP:C	1:A:21:GLU:N	10	130.26	6.29	132.4
(1,49)	1:A:28:LYS:N	1:A:28:LYS:CA	1:A:28:LYS:C	1:A:29:LEU:N	10	129.81	1.63	130.15
(1,49)	1:A:28:LYS:N	1:A:28:LYS:CA	1:A:28:LYS:C	1:A:29:LEU:N	10	129.81	1.63	130.15
(1,49)	1:A:28:LYS:N	1:A:28:LYS:CA	1:A:28:LYS:C	1:A:29:LEU:N	10	129.81	1.63	130.15
(1,109)	1:A:61:LYS:N	1:A:61:LYS:CA	1:A:61:LYS:C	1:A:62:ALA:N	10	129.61	1.33	130.05
(1,109)	1:A:61:LYS:N	1:A:61:LYS:CA	1:A:61:LYS:C	1:A:62:ALA:N	10	129.61	1.33	130.05
(1,109)	1:A:61:LYS:N	1:A:61:LYS:CA	1:A:61:LYS:C	1:A:62:ALA:N	10	129.61	1.33	130.05
(1,41)	1:A:24:ALA:N	1:A:24:ALA:CA	1:A:24:ALA:C	1:A:25:MET:N	10	129.32	2.87	129.45
(1,41)	1:A:24:ALA:N	1:A:24:ALA:CA	1:A:24:ALA:C	1:A:25:MET:N	10	129.32	2.87	129.45
(1,41)	1:A:24:ALA:N	1:A:24:ALA:CA	1:A:24:ALA:C	1:A:25:MET:N	10	129.32	2.87	129.45
(1,83)	1:A:48:LYS:N	1:A:48:LYS:CA	1:A:48:LYS:C	1:A:49:GLU:N	10	129.28	7.14	131.7
(1,83)	1:A:48:LYS:N	1:A:48:LYS:CA	1:A:48:LYS:C	1:A:49:GLU:N	10	129.28	7.14	131.7
(1,83)	1:A:48:LYS:N	1:A:48:LYS:CA	1:A:48:LYS:C	1:A:49:GLU:N	10	129.28	7.14	131.7
(1,107)	1:A:60:VAL:N	1:A:60:VAL:CA	1:A:60:VAL:C	1:A:61:LYS:N	10	129.16	1.27	129.45
(1,107)	1:A:60:VAL:N	1:A:60:VAL:CA	1:A:60:VAL:C	1:A:61:LYS:N	10	129.16	1.27	129.45
(1,107)	1:A:60:VAL:N	1:A:60:VAL:CA	1:A:60:VAL:C	1:A:61:LYS:N	10	129.16	1.27	129.45
(1,25)	1:A:16:SER:N	1:A:16:SER:CA	1:A:16:SER:C	1:A:17:GLN:N	10	127.43	10.8	131.0
(1,25)	1:A:16:SER:N	1:A:16:SER:CA	1:A:16:SER:C	1:A:17:GLN:N	10	127.43	10.8	131.0
(1,25)	1:A:16:SER:N	1:A:16:SER:CA	1:A:16:SER:C	1:A:17:GLN:N	10	127.43	10.8	131.0
(1,137)	1:A:75:ASP:N	1:A:75:ASP:CA	1:A:75:ASP:C	1:A:76:VAL:N	10	126.38	0.88	126.55
(1,137)	1:A:75:ASP:N	1:A:75:ASP:CA	1:A:75:ASP:C	1:A:76:VAL:N	10	126.38	0.88	126.55
(1,137)	1:A:75:ASP:N	1:A:75:ASP:CA	1:A:75:ASP:C	1:A:76:VAL:N	10	126.38	0.88	126.55
(1,165)	1:A:89:ALA:N	1:A:89:ALA:CA	1:A:89:ALA:C	1:A:90:HIS:N	10	125.22	13.44	130.45
(1,165)	1:A:89:ALA:N	1:A:89:ALA:CA	1:A:89:ALA:C	1:A:90:HIS:N	10	125.22	13.44	130.45
(1,165)	1:A:89:ALA:N	1:A:89:ALA:CA	1:A:89:ALA:C	1:A:90:HIS:N	10	125.22	13.44	130.45
(1,167)	1:A:90:HIS:N	1:A:90:HIS:CA	1:A:90:HIS:C	1:A:91:SER:N	10	124.16	12.72	130.05
(1,167)	1:A:90:HIS:N	1:A:90:HIS:CA	1:A:90:HIS:C	1:A:91:SER:N	10	124.16	12.72	130.05
(1,167)	1:A:90:HIS:N	1:A:90:HIS:CA	1:A:90:HIS:C	1:A:91:SER:N	10	124.16	12.72	130.05
(1,37)	1:A:22:ALA:N	1:A:22:ALA:CA	1:A:22:ALA:C	1:A:23:LYS:N	10	121.86	6.12	124.2
(1,37)	1:A:22:ALA:N	1:A:22:ALA:CA	1:A:22:ALA:C	1:A:23:LYS:N	10	121.86	6.12	124.2
(1,37)	1:A:22:ALA:N	1:A:22:ALA:CA	1:A:22:ALA:C	1:A:23:LYS:N	10	121.86	6.12	124.2
(1,129)	1:A:71:ASP:N	1:A:71:ASP:CA	1:A:71:ASP:C	1:A:72:PHE:N	10	120.95	3.5	120.9
(1,129)	1:A:71:ASP:N	1:A:71:ASP:CA	1:A:71:ASP:C	1:A:72:PHE:N	10	120.95	3.5	120.9

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Models ¹	Mean	SD ²	Median
(1,129)	1:A:71:ASP:N	1:A:71:ASP:CA	1:A:71:ASP:C	1:A:72:PHE:N	10	120.95	3.5	120.9
(1,161)	1:A:87:LEU:N	1:A:87:LEU:CA	1:A:87:LEU:C	1:A:88:SER:N	10	119.44	8.36	116.35
(1,161)	1:A:87:LEU:N	1:A:87:LEU:CA	1:A:87:LEU:C	1:A:88:SER:N	10	119.44	8.36	116.35
(1,161)	1:A:87:LEU:N	1:A:87:LEU:CA	1:A:87:LEU:C	1:A:88:SER:N	10	119.44	8.36	116.35
(1,31)	1:A:19:LYS:N	1:A:19:LYS:CA	1:A:19:LYS:C	1:A:20:ASP:N	10	118.57	9.49	119.75
(1,31)	1:A:19:LYS:N	1:A:19:LYS:CA	1:A:19:LYS:C	1:A:20:ASP:N	10	118.57	9.49	119.75
(1,31)	1:A:19:LYS:N	1:A:19:LYS:CA	1:A:19:LYS:C	1:A:20:ASP:N	10	118.57	9.49	119.75
(1,111)	1:A:62:ALA:N	1:A:62:ALA:CA	1:A:62:ALA:C	1:A:63:ALA:N	10	117.15	6.01	117.0
(1,111)	1:A:62:ALA:N	1:A:62:ALA:CA	1:A:62:ALA:C	1:A:63:ALA:N	10	117.15	6.01	117.0
(1,111)	1:A:62:ALA:N	1:A:62:ALA:CA	1:A:62:ALA:C	1:A:63:ALA:N	10	117.15	6.01	117.0
(1,171)	1:A:92:LEU:N	1:A:92:LEU:CA	1:A:92:LEU:C	1:A:93:SER:N	10	113.03	14.21	108.8
(1,171)	1:A:92:LEU:N	1:A:92:LEU:CA	1:A:92:LEU:C	1:A:93:SER:N	10	113.03	14.21	108.8
(1,171)	1:A:92:LEU:N	1:A:92:LEU:CA	1:A:92:LEU:C	1:A:93:SER:N	10	113.03	14.21	108.8
(1,69)	1:A:41:SER:N	1:A:41:SER:CA	1:A:41:SER:C	1:A:42:LEU:N	10	111.53	9.32	107.85
(1,69)	1:A:41:SER:N	1:A:41:SER:CA	1:A:41:SER:C	1:A:42:LEU:N	10	111.53	9.32	107.85
(1,69)	1:A:41:SER:N	1:A:41:SER:CA	1:A:41:SER:C	1:A:42:LEU:N	10	111.53	9.32	107.85
(1,143)	1:A:78:ALA:N	1:A:78:ALA:CA	1:A:78:ALA:C	1:A:79:SER:N	10	111.07	5.59	109.3
(1,143)	1:A:78:ALA:N	1:A:78:ALA:CA	1:A:78:ALA:C	1:A:79:SER:N	10	111.07	5.59	109.3
(1,143)	1:A:78:ALA:N	1:A:78:ALA:CA	1:A:78:ALA:C	1:A:79:SER:N	10	111.07	5.59	109.3
(1,113)	1:A:63:ALA:N	1:A:63:ALA:CA	1:A:63:ALA:C	1:A:64:ASN:N	10	109.13	3.36	108.7
(1,113)	1:A:63:ALA:N	1:A:63:ALA:CA	1:A:63:ALA:C	1:A:64:ASN:N	10	109.13	3.36	108.7
(1,113)	1:A:63:ALA:N	1:A:63:ALA:CA	1:A:63:ALA:C	1:A:64:ASN:N	10	109.13	3.36	108.7
(1,3)	1:A:4:LEU:N	1:A:4:LEU:CA	1:A:4:LEU:C	1:A:5:SER:N	10	106.34	3.7	105.7
(1,3)	1:A:4:LEU:N	1:A:4:LEU:CA	1:A:4:LEU:C	1:A:5:SER:N	10	106.34	3.7	105.7
(1,3)	1:A:4:LEU:N	1:A:4:LEU:CA	1:A:4:LEU:C	1:A:5:SER:N	10	106.34	3.7	105.7
(1,7)	1:A:6:ASN:N	1:A:6:ASN:CA	1:A:6:ASN:C	1:A:7:MET:N	10	93.12	8.25	91.95
(1,7)	1:A:6:ASN:N	1:A:6:ASN:CA	1:A:6:ASN:C	1:A:7:MET:N	10	93.12	8.25	91.95
(1,7)	1:A:6:ASN:N	1:A:6:ASN:CA	1:A:6:ASN:C	1:A:7:MET:N	10	93.12	8.25	91.95
(1,187)	1:A:101:HIS:N	1:A:101:HIS:CA	1:A:101:HIS:C	1:A:102:HIS:N	10	92.65	33.28	104.6
(1,187)	1:A:101:HIS:N	1:A:101:HIS:CA	1:A:101:HIS:C	1:A:102:HIS:N	10	92.65	33.28	104.6
(1,187)	1:A:101:HIS:N	1:A:101:HIS:CA	1:A:101:HIS:C	1:A:102:HIS:N	10	92.65	33.28	104.6
(1,175)	1:A:94:SER:N	1:A:94:SER:CA	1:A:94:SER:C	1:A:95:TRP:N	10	87.12	17.1	81.65
(1,175)	1:A:94:SER:N	1:A:94:SER:CA	1:A:94:SER:C	1:A:95:TRP:N	10	87.12	17.1	81.65
(1,175)	1:A:94:SER:N	1:A:94:SER:CA	1:A:94:SER:C	1:A:95:TRP:N	10	87.12	17.1	81.65
(1,147)	1:A:80:ALA:N	1:A:80:ALA:CA	1:A:80:ALA:C	1:A:81:LYS:N	10	61.79	18.95	62.7
(1,147)	1:A:80:ALA:N	1:A:80:ALA:CA	1:A:80:ALA:C	1:A:81:LYS:N	10	61.79	18.95	62.7
(1,147)	1:A:80:ALA:N	1:A:80:ALA:CA	1:A:80:ALA:C	1:A:81:LYS:N	10	61.79	18.95	62.7
(1,179)	1:A:97:ALA:N	1:A:97:ALA:CA	1:A:97:ALA:C	1:A:98:GLU:N	10	57.09	16.7	53.95
(1,179)	1:A:97:ALA:N	1:A:97:ALA:CA	1:A:97:ALA:C	1:A:98:GLU:N	10	57.09	16.7	53.95
(1,179)	1:A:97:ALA:N	1:A:97:ALA:CA	1:A:97:ALA:C	1:A:98:GLU:N	10	57.09	16.7	53.95
(1,93)	1:A:53:MET:N	1:A:53:MET:CA	1:A:53:MET:C	1:A:54:SER:N	10	54.96	5.03	57.35
(1,93)	1:A:53:MET:N	1:A:53:MET:CA	1:A:53:MET:C	1:A:54:SER:N	10	54.96	5.03	57.35
(1,93)	1:A:53:MET:N	1:A:53:MET:CA	1:A:53:MET:C	1:A:54:SER:N	10	54.96	5.03	57.35
(1,115)	1:A:64:ASN:N	1:A:64:ASN:CA	1:A:64:ASN:C	1:A:65:VAL:N	10	49.57	2.05	49.5
(1,115)	1:A:64:ASN:N	1:A:64:ASN:CA	1:A:64:ASN:C	1:A:65:VAL:N	10	49.57	2.05	49.5
(1,115)	1:A:64:ASN:N	1:A:64:ASN:CA	1:A:64:ASN:C	1:A:65:VAL:N	10	49.57	2.05	49.5
(1,76)	1:A:44:ILE:C	1:A:45:SER:N	1:A:45:SER:CA	1:A:45:SER:C	10	24.04	4.12	23.85
(1,76)	1:A:44:ILE:C	1:A:45:SER:N	1:A:45:SER:CA	1:A:45:SER:C	10	24.04	4.12	23.85
(1,76)	1:A:44:ILE:C	1:A:45:SER:N	1:A:45:SER:CA	1:A:45:SER:C	10	24.04	4.12	23.85
(1,216)	1:A:10:LEU:CA	1:A:10:LEU:CB	1:A:10:LEU:CG	1:A:10:LEU:CD1	10	9.26	7.34	6.45
(1,216)	1:A:10:LEU:CA	1:A:10:LEU:CB	1:A:10:LEU:CG	1:A:10:LEU:CD1	10	9.26	7.34	6.45

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Models ¹	Mean	SD ²	Median
(1,216)	1:A:10:LEU:CA	1:A:10:LEU:CB	1:A:10:LEU:CG	1:A:10:LEU:CD1	10	9.26	7.34	6.45
(1,5)	1:A:5:SER:N	1:A:5:SER:CA	1:A:5:SER:C	1:A:6:ASN:N	9	111.91	35.53	122.3
(1,5)	1:A:5:SER:N	1:A:5:SER:CA	1:A:5:SER:C	1:A:6:ASN:N	9	111.91	35.53	122.3
(1,5)	1:A:5:SER:N	1:A:5:SER:CA	1:A:5:SER:C	1:A:6:ASN:N	9	111.91	35.53	122.3
(1,8)	1:A:6:ASN:C	1:A:7:MET:N	1:A:7:MET:CA	1:A:7:MET:C	9	17.71	4.66	15.8
(1,8)	1:A:6:ASN:C	1:A:7:MET:N	1:A:7:MET:CA	1:A:7:MET:C	9	17.71	4.66	15.8
(1,8)	1:A:6:ASN:C	1:A:7:MET:N	1:A:7:MET:CA	1:A:7:MET:C	9	17.71	4.66	15.8
(1,185)	1:A:100:LYS:N	1:A:100:LYS:CA	1:A:100:LYS:C	1:A:101:HIS:N	8	110.72	16.01	111.85
(1,185)	1:A:100:LYS:N	1:A:100:LYS:CA	1:A:100:LYS:C	1:A:101:HIS:N	8	110.72	16.01	111.85
(1,185)	1:A:100:LYS:N	1:A:100:LYS:CA	1:A:100:LYS:C	1:A:101:HIS:N	8	110.72	16.01	111.85
(1,191)	1:A:103:HIS:N	1:A:103:HIS:CA	1:A:103:HIS:C	1:A:104:HIS:N	8	83.96	44.94	99.8
(1,191)	1:A:103:HIS:N	1:A:103:HIS:CA	1:A:103:HIS:C	1:A:104:HIS:N	8	83.96	44.94	99.8
(1,191)	1:A:103:HIS:N	1:A:103:HIS:CA	1:A:103:HIS:C	1:A:104:HIS:N	8	83.96	44.94	99.8
(1,59)	1:A:36:SER:N	1:A:36:SER:CA	1:A:36:SER:C	1:A:37:ALA:N	8	82.34	52.1	90.15
(1,59)	1:A:36:SER:N	1:A:36:SER:CA	1:A:36:SER:C	1:A:37:ALA:N	8	82.34	52.1	90.15
(1,59)	1:A:36:SER:N	1:A:36:SER:CA	1:A:36:SER:C	1:A:37:ALA:N	8	82.34	52.1	90.15
(1,149)	1:A:81:LYS:N	1:A:81:LYS:CA	1:A:81:LYS:C	1:A:82:SER:N	8	13.8	7.01	12.6
(1,149)	1:A:81:LYS:N	1:A:81:LYS:CA	1:A:81:LYS:C	1:A:82:SER:N	8	13.8	7.01	12.6
(1,149)	1:A:81:LYS:N	1:A:81:LYS:CA	1:A:81:LYS:C	1:A:82:SER:N	8	13.8	7.01	12.6
(1,241)	1:A:25:MET:N	1:A:25:MET:CA	1:A:25:MET:CB	1:A:25:MET:CG	8	13.5	11.25	8.65
(1,241)	1:A:25:MET:N	1:A:25:MET:CA	1:A:25:MET:CB	1:A:25:MET:CG	8	13.5	11.25	8.65
(1,241)	1:A:25:MET:N	1:A:25:MET:CA	1:A:25:MET:CB	1:A:25:MET:CG	8	13.5	11.25	8.65
(1,60)	1:A:36:SER:C	1:A:37:ALA:N	1:A:37:ALA:CA	1:A:37:ALA:C	7	24.56	12.23	26.4
(1,60)	1:A:36:SER:C	1:A:37:ALA:N	1:A:37:ALA:CA	1:A:37:ALA:C	7	24.56	12.23	26.4
(1,60)	1:A:36:SER:C	1:A:37:ALA:N	1:A:37:ALA:CA	1:A:37:ALA:C	7	24.56	12.23	26.4
(1,19)	1:A:12:LEU:N	1:A:12:LEU:CA	1:A:12:LEU:C	1:A:13:GLY:N	6	126.58	12.88	132.1
(1,19)	1:A:12:LEU:N	1:A:12:LEU:CA	1:A:12:LEU:C	1:A:13:GLY:N	6	126.58	12.88	132.1
(1,19)	1:A:12:LEU:N	1:A:12:LEU:CA	1:A:12:LEU:C	1:A:13:GLY:N	6	126.58	12.88	132.1
(1,61)	1:A:37:ALA:N	1:A:37:ALA:CA	1:A:37:ALA:C	1:A:38:ASN:N	6	98.57	7.53	98.6
(1,61)	1:A:37:ALA:N	1:A:37:ALA:CA	1:A:37:ALA:C	1:A:38:ASN:N	6	98.57	7.53	98.6
(1,61)	1:A:37:ALA:N	1:A:37:ALA:CA	1:A:37:ALA:C	1:A:38:ASN:N	6	98.57	7.53	98.6
(1,169)	1:A:91:SER:N	1:A:91:SER:CA	1:A:91:SER:C	1:A:92:LEU:N	6	70.0	63.22	70.2
(1,169)	1:A:91:SER:N	1:A:91:SER:CA	1:A:91:SER:C	1:A:92:LEU:N	6	70.0	63.22	70.2
(1,169)	1:A:91:SER:N	1:A:91:SER:CA	1:A:91:SER:C	1:A:92:LEU:N	6	70.0	63.22	70.2
(1,1)	1:A:1:MET:N	1:A:1:MET:CA	1:A:1:MET:C	1:A:2:LYS:N	6	69.52	36.81	59.05
(1,1)	1:A:1:MET:N	1:A:1:MET:CA	1:A:1:MET:C	1:A:2:LYS:N	6	69.52	36.81	59.05
(1,1)	1:A:1:MET:N	1:A:1:MET:CA	1:A:1:MET:C	1:A:2:LYS:N	6	69.52	36.81	59.05
(1,1)	1:A:1:MET:N	1:A:1:MET:CA	1:A:1:MET:C	1:A:2:LYS:N	6	69.52	36.81	59.05
(1,176)	1:A:94:SER:C	1:A:95:TRP:N	1:A:95:TRP:CA	1:A:95:TRP:C	6	6.8	4.77	5.45
(1,176)	1:A:94:SER:C	1:A:95:TRP:N	1:A:95:TRP:CA	1:A:95:TRP:C	6	6.8	4.77	5.45
(1,176)	1:A:94:SER:C	1:A:95:TRP:N	1:A:95:TRP:CA	1:A:95:TRP:C	6	6.8	4.77	5.45
(1,193)	1:A:104:HIS:N	1:A:104:HIS:CA	1:A:104:HIS:C	1:A:105:HIS:N	5	103.4	26.01	110.9
(1,193)	1:A:104:HIS:N	1:A:104:HIS:CA	1:A:104:HIS:C	1:A:105:HIS:N	5	103.4	26.01	110.9
(1,193)	1:A:104:HIS:N	1:A:104:HIS:CA	1:A:104:HIS:C	1:A:105:HIS:N	5	103.4	26.01	110.9
(1,29)	1:A:18:ASN:N	1:A:18:ASN:CA	1:A:18:ASN:C	1:A:19:LYS:N	5	65.38	36.96	90.6
(1,29)	1:A:18:ASN:N	1:A:18:ASN:CA	1:A:18:ASN:C	1:A:19:LYS:N	5	65.38	36.96	90.6
(1,29)	1:A:18:ASN:N	1:A:18:ASN:CA	1:A:18:ASN:C	1:A:19:LYS:N	5	65.38	36.96	90.6
(1,178)	1:A:96:GLY:C	1:A:97:ALA:N	1:A:97:ALA:CA	1:A:97:ALA:C	5	20.66	17.67	11.2
(1,178)	1:A:96:GLY:C	1:A:97:ALA:N	1:A:97:ALA:CA	1:A:97:ALA:C	5	20.66	17.67	11.2
(1,178)	1:A:96:GLY:C	1:A:97:ALA:N	1:A:97:ALA:CA	1:A:97:ALA:C	5	20.66	17.67	11.2
(1,190)	1:A:102:HIS:C	1:A:103:HIS:N	1:A:103:HIS:CA	1:A:103:HIS:C	5	16.98	7.71	15.3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Models ¹	Mean	SD ²	Median
(1,190)	1:A:102:HIS:C	1:A:103:HIS:N	1:A:103:HIS:CA	1:A:103:HIS:C	5	16.98	7.71	15.3
(1,190)	1:A:102:HIS:C	1:A:103:HIS:N	1:A:103:HIS:CA	1:A:103:HIS:C	5	16.98	7.71	15.3
(1,172)	1:A:92:LEU:C	1:A:93:SER:N	1:A:93:SER:CA	1:A:93:SER:C	5	14.36	5.49	13.8
(1,172)	1:A:92:LEU:C	1:A:93:SER:N	1:A:93:SER:CA	1:A:93:SER:C	5	14.36	5.49	13.8
(1,172)	1:A:92:LEU:C	1:A:93:SER:N	1:A:93:SER:CA	1:A:93:SER:C	5	14.36	5.49	13.8
(1,145)	1:A:79:SER:N	1:A:79:SER:CA	1:A:79:SER:C	1:A:80:ALA:N	4	132.43	2.97	132.3
(1,145)	1:A:79:SER:N	1:A:79:SER:CA	1:A:79:SER:C	1:A:80:ALA:N	4	132.43	2.97	132.3
(1,145)	1:A:79:SER:N	1:A:79:SER:CA	1:A:79:SER:C	1:A:80:ALA:N	4	132.43	2.97	132.3
(1,56)	1:A:33:LEU:C	1:A:34:THR:N	1:A:34:THR:CA	1:A:34:THR:C	4	43.9	6.57	44.6
(1,56)	1:A:33:LEU:C	1:A:34:THR:N	1:A:34:THR:CA	1:A:34:THR:C	4	43.9	6.57	44.6
(1,56)	1:A:33:LEU:C	1:A:34:THR:N	1:A:34:THR:CA	1:A:34:THR:C	4	43.9	6.57	44.6
(1,181)	1:A:98:GLU:N	1:A:98:GLU:CA	1:A:98:GLU:C	1:A:99:VAL:N	4	37.78	57.38	5.9
(1,181)	1:A:98:GLU:N	1:A:98:GLU:CA	1:A:98:GLU:C	1:A:99:VAL:N	4	37.78	57.38	5.9
(1,181)	1:A:98:GLU:N	1:A:98:GLU:CA	1:A:98:GLU:C	1:A:99:VAL:N	4	37.78	57.38	5.9
(1,188)	1:A:101:HIS:C	1:A:102:HIS:N	1:A:102:HIS:CA	1:A:102:HIS:C	4	23.25	19.4	16.9
(1,188)	1:A:101:HIS:C	1:A:102:HIS:N	1:A:102:HIS:CA	1:A:102:HIS:C	4	23.25	19.4	16.9
(1,188)	1:A:101:HIS:C	1:A:102:HIS:N	1:A:102:HIS:CA	1:A:102:HIS:C	4	23.25	19.4	16.9
(1,276)	1:A:47:LYS:CB	1:A:47:LYS:CG	1:A:47:LYS:CD	1:A:47:LYS:CE	4	18.8	5.19	17.2
(1,276)	1:A:47:LYS:CB	1:A:47:LYS:CG	1:A:47:LYS:CD	1:A:47:LYS:CE	4	18.8	5.19	17.2
(1,276)	1:A:47:LYS:CB	1:A:47:LYS:CG	1:A:47:LYS:CD	1:A:47:LYS:CE	4	18.8	5.19	17.2
(1,22)	1:A:14:LYS:C	1:A:15:LEU:N	1:A:15:LEU:CA	1:A:15:LEU:C	4	10.78	12.63	4.75
(1,22)	1:A:14:LYS:C	1:A:15:LEU:N	1:A:15:LEU:CA	1:A:15:LEU:C	4	10.78	12.63	4.75
(1,22)	1:A:14:LYS:C	1:A:15:LEU:N	1:A:15:LEU:CA	1:A:15:LEU:C	4	10.78	12.63	4.75
(1,347)	1:A:87:LEU:CA	1:A:87:LEU:CB	1:A:87:LEU:CG	1:A:87:LEU:CD1	4	3.35	1.42	2.9
(1,347)	1:A:87:LEU:CA	1:A:87:LEU:CB	1:A:87:LEU:CG	1:A:87:LEU:CD1	4	3.35	1.42	2.9
(1,347)	1:A:87:LEU:CA	1:A:87:LEU:CB	1:A:87:LEU:CG	1:A:87:LEU:CD1	4	3.35	1.42	2.9
(1,195)	1:A:105:HIS:N	1:A:105:HIS:CA	1:A:105:HIS:C	1:A:106:HIS:N	3	112.23	22.01	124.0
(1,195)	1:A:105:HIS:N	1:A:105:HIS:CA	1:A:105:HIS:C	1:A:106:HIS:N	3	112.23	22.01	124.0
(1,195)	1:A:105:HIS:N	1:A:105:HIS:CA	1:A:105:HIS:C	1:A:106:HIS:N	3	112.23	22.01	124.0
(1,30)	1:A:18:ASN:C	1:A:19:LYS:N	1:A:19:LYS:CA	1:A:19:LYS:C	3	40.77	3.28	41.9
(1,30)	1:A:18:ASN:C	1:A:19:LYS:N	1:A:19:LYS:CA	1:A:19:LYS:C	3	40.77	3.28	41.9
(1,30)	1:A:18:ASN:C	1:A:19:LYS:N	1:A:19:LYS:CA	1:A:19:LYS:C	3	40.77	3.28	41.9
(1,183)	1:A:99:VAL:N	1:A:99:VAL:CA	1:A:99:VAL:C	1:A:100:LYS:N	3	27.17	18.01	16.8
(1,183)	1:A:99:VAL:N	1:A:99:VAL:CA	1:A:99:VAL:C	1:A:100:LYS:N	3	27.17	18.01	16.8
(1,183)	1:A:99:VAL:N	1:A:99:VAL:CA	1:A:99:VAL:C	1:A:100:LYS:N	3	27.17	18.01	16.8
(1,304)	1:A:58:GLU:N	1:A:58:GLU:CA	1:A:58:GLU:CB	1:A:58:GLU:CG	3	23.63	1.35	23.6
(1,304)	1:A:58:GLU:N	1:A:58:GLU:CA	1:A:58:GLU:CB	1:A:58:GLU:CG	3	23.63	1.35	23.6
(1,304)	1:A:58:GLU:N	1:A:58:GLU:CA	1:A:58:GLU:CB	1:A:58:GLU:CG	3	23.63	1.35	23.6
(1,328)	1:A:74:GLN:CA	1:A:74:GLN:CB	1:A:74:GLN:CG	1:A:74:GLN:CD	3	17.53	7.38	22.6
(1,328)	1:A:74:GLN:CA	1:A:74:GLN:CB	1:A:74:GLN:CG	1:A:74:GLN:CD	3	17.53	7.38	22.6
(1,328)	1:A:74:GLN:CA	1:A:74:GLN:CB	1:A:74:GLN:CG	1:A:74:GLN:CD	3	17.53	7.38	22.6
(1,339)	1:A:83:LEU:CA	1:A:83:LEU:CB	1:A:83:LEU:CG	1:A:83:LEU:CD1	3	7.33	2.16	6.5
(1,339)	1:A:83:LEU:CA	1:A:83:LEU:CB	1:A:83:LEU:CG	1:A:83:LEU:CD1	3	7.33	2.16	6.5
(1,339)	1:A:83:LEU:CA	1:A:83:LEU:CB	1:A:83:LEU:CG	1:A:83:LEU:CD1	3	7.33	2.16	6.5
(1,14)	1:A:9:ILE:C	1:A:10:LEU:N	1:A:10:LEU:CA	1:A:10:LEU:C	3	2.37	1.38	1.6
(1,14)	1:A:9:ILE:C	1:A:10:LEU:N	1:A:10:LEU:CA	1:A:10:LEU:C	3	2.37	1.38	1.6
(1,14)	1:A:9:ILE:C	1:A:10:LEU:N	1:A:10:LEU:CA	1:A:10:LEU:C	3	2.37	1.38	1.6
(1,6)	1:A:5:SER:C	1:A:6:ASN:N	1:A:6:ASN:CA	1:A:6:ASN:C	2	46.5	26.3	46.5
(1,6)	1:A:5:SER:C	1:A:6:ASN:N	1:A:6:ASN:CA	1:A:6:ASN:C	2	46.5	26.3	46.5
(1,6)	1:A:5:SER:C	1:A:6:ASN:N	1:A:6:ASN:CA	1:A:6:ASN:C	2	46.5	26.3	46.5
(1,192)	1:A:103:HIS:C	1:A:104:HIS:N	1:A:104:HIS:CA	1:A:104:HIS:C	2	24.95	3.65	24.95

Continued on next page...

Continued from previous page...

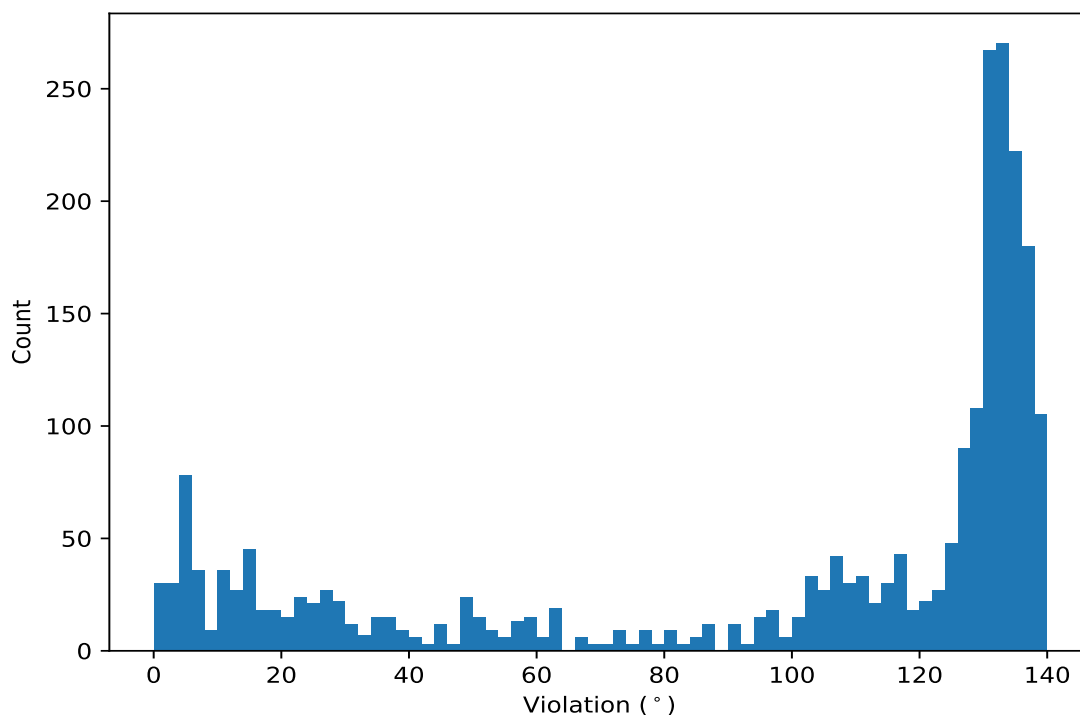
Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Models ¹	Mean	SD ²	Median
(1,192)	1:A:103:HIS:C	1:A:104:HIS:N	1:A:104:HIS:CA	1:A:104:HIS:C	2	24.95	3.65	24.95
(1,192)	1:A:103:HIS:C	1:A:104:HIS:N	1:A:104:HIS:CA	1:A:104:HIS:C	2	24.95	3.65	24.95
(1,180)	1:A:97:ALA:C	1:A:98:GLU:N	1:A:98:GLU:CA	1:A:98:GLU:C	2	24.65	5.65	24.65
(1,180)	1:A:97:ALA:C	1:A:98:GLU:N	1:A:98:GLU:CA	1:A:98:GLU:C	2	24.65	5.65	24.65
(1,180)	1:A:97:ALA:C	1:A:98:GLU:N	1:A:98:GLU:CA	1:A:98:GLU:C	2	24.65	5.65	24.65
(1,360)	1:A:100:LYS:CA	1:A:100:LYS:CB	1:A:100:LYS:CG	1:A:100:LYS:CD	2	19.7	4.5	19.7
(1,360)	1:A:100:LYS:CA	1:A:100:LYS:CB	1:A:100:LYS:CG	1:A:100:LYS:CD	2	19.7	4.5	19.7
(1,360)	1:A:100:LYS:CA	1:A:100:LYS:CB	1:A:100:LYS:CG	1:A:100:LYS:CD	2	19.7	4.5	19.7
(1,186)	1:A:100:LYS:C	1:A:101:HIS:N	1:A:101:HIS:CA	1:A:101:HIS:C	2	19.5	8.6	19.5
(1,186)	1:A:100:LYS:C	1:A:101:HIS:N	1:A:101:HIS:CA	1:A:101:HIS:C	2	19.5	8.6	19.5
(1,186)	1:A:100:LYS:C	1:A:101:HIS:N	1:A:101:HIS:CA	1:A:101:HIS:C	2	19.5	8.6	19.5
(1,194)	1:A:104:HIS:C	1:A:105:HIS:N	1:A:105:HIS:CA	1:A:105:HIS:C	2	15.4	0.3	15.4
(1,194)	1:A:104:HIS:C	1:A:105:HIS:N	1:A:105:HIS:CA	1:A:105:HIS:C	2	15.4	0.3	15.4
(1,194)	1:A:104:HIS:C	1:A:105:HIS:N	1:A:105:HIS:CA	1:A:105:HIS:C	2	15.4	0.3	15.4
(1,277)	1:A:47:LYS:CG	1:A:47:LYS:CD	1:A:47:LYS:CE	1:A:47:LYS:NZ	2	12.7	1.3	12.7
(1,277)	1:A:47:LYS:CG	1:A:47:LYS:CD	1:A:47:LYS:CE	1:A:47:LYS:NZ	2	12.7	1.3	12.7
(1,277)	1:A:47:LYS:CG	1:A:47:LYS:CD	1:A:47:LYS:CE	1:A:47:LYS:NZ	2	12.7	1.3	12.7
(1,238)	1:A:23:LYS:CA	1:A:23:LYS:CB	1:A:23:LYS:CG	1:A:23:LYS:CD	2	10.85	2.95	10.85
(1,238)	1:A:23:LYS:CA	1:A:23:LYS:CB	1:A:23:LYS:CG	1:A:23:LYS:CD	2	10.85	2.95	10.85
(1,238)	1:A:23:LYS:CA	1:A:23:LYS:CB	1:A:23:LYS:CG	1:A:23:LYS:CD	2	10.85	2.95	10.85
(1,228)	1:A:17:GLN:CA	1:A:17:GLN:CB	1:A:17:GLN:CG	1:A:17:GLN:CD	2	6.6	3.6	6.6
(1,228)	1:A:17:GLN:CA	1:A:17:GLN:CB	1:A:17:GLN:CG	1:A:17:GLN:CD	2	6.6	3.6	6.6
(1,228)	1:A:17:GLN:CA	1:A:17:GLN:CB	1:A:17:GLN:CG	1:A:17:GLN:CD	2	6.6	3.6	6.6
(1,52)	1:A:31:GLY:C	1:A:32:LYS:N	1:A:32:LYS:CA	1:A:32:LYS:C	2	5.1	1.1	5.1
(1,52)	1:A:31:GLY:C	1:A:32:LYS:N	1:A:32:LYS:CA	1:A:32:LYS:C	2	5.1	1.1	5.1
(1,52)	1:A:31:GLY:C	1:A:32:LYS:N	1:A:32:LYS:CA	1:A:32:LYS:C	2	5.1	1.1	5.1
(1,320)	1:A:69:CYS:N	1:A:69:CYS:CA	1:A:69:CYS:CB	1:A:69:CYS:SG	2	4.2	0.5	4.2
(1,320)	1:A:69:CYS:N	1:A:69:CYS:CA	1:A:69:CYS:CB	1:A:69:CYS:SG	2	4.2	0.5	4.2
(1,320)	1:A:69:CYS:N	1:A:69:CYS:CA	1:A:69:CYS:CB	1:A:69:CYS:SG	2	4.2	0.5	4.2
(1,12)	1:A:8:LYS:C	1:A:9:ILE:N	1:A:9:ILE:CA	1:A:9:ILE:C	2	4.05	1.75	4.05
(1,12)	1:A:8:LYS:C	1:A:9:ILE:N	1:A:9:ILE:CA	1:A:9:ILE:C	2	4.05	1.75	4.05
(1,12)	1:A:8:LYS:C	1:A:9:ILE:N	1:A:9:ILE:CA	1:A:9:ILE:C	2	4.05	1.75	4.05
(1,146)	1:A:79:SER:C	1:A:80:ALA:N	1:A:80:ALA:CA	1:A:80:ALA:C	2	3.25	1.85	3.25
(1,146)	1:A:79:SER:C	1:A:80:ALA:N	1:A:80:ALA:CA	1:A:80:ALA:C	2	3.25	1.85	3.25
(1,146)	1:A:79:SER:C	1:A:80:ALA:N	1:A:80:ALA:CA	1:A:80:ALA:C	2	3.25	1.85	3.25

¹ Number of violated models, ²Standard deviation, All angle values are in degree (°)

10.5 All violated dihedral-angle restraints [i](#)

10.5.1 Histogram : Distribution of violations [i](#)

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



10.5.2 Table: All violated dihedral-angle restraints [i](#)

The following table lists the absolute value of the violation for each restraint in the ensemble sorted by its value. The Key (restraint list ID, restraint ID) is the unique identifier for a given restraint.

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,65)	1:A:39:LYS:N	1:A:39:LYS:CA	1:A:39:LYS:C	1:A:40:ALA:N	1	140.0
(1,65)	1:A:39:LYS:N	1:A:39:LYS:CA	1:A:39:LYS:C	1:A:40:ALA:N	1	140.0
(1,65)	1:A:39:LYS:N	1:A:39:LYS:CA	1:A:39:LYS:C	1:A:40:ALA:N	1	140.0
(1,135)	1:A:74:GLN:N	1:A:74:GLN:CA	1:A:74:GLN:C	1:A:75:ASP:N	2	140.0
(1,135)	1:A:74:GLN:N	1:A:74:GLN:CA	1:A:74:GLN:C	1:A:75:ASP:N	2	140.0
(1,135)	1:A:74:GLN:N	1:A:74:GLN:CA	1:A:74:GLN:C	1:A:75:ASP:N	2	140.0
(1,127)	1:A:70:GLU:N	1:A:70:GLU:CA	1:A:70:GLU:C	1:A:71:ASP:N	5	140.0
(1,127)	1:A:70:GLU:N	1:A:70:GLU:CA	1:A:70:GLU:C	1:A:71:ASP:N	5	140.0
(1,127)	1:A:70:GLU:N	1:A:70:GLU:CA	1:A:70:GLU:C	1:A:71:ASP:N	5	140.0
(1,5)	1:A:5:SER:N	1:A:5:SER:CA	1:A:5:SER:C	1:A:6:ASN:N	7	139.8
(1,5)	1:A:5:SER:N	1:A:5:SER:CA	1:A:5:SER:C	1:A:6:ASN:N	7	139.8
(1,5)	1:A:5:SER:N	1:A:5:SER:CA	1:A:5:SER:C	1:A:6:ASN:N	7	139.8
(1,171)	1:A:92:LEU:N	1:A:92:LEU:CA	1:A:92:LEU:C	1:A:93:SER:N	3	139.8
(1,171)	1:A:92:LEU:N	1:A:92:LEU:CA	1:A:92:LEU:C	1:A:93:SER:N	3	139.8
(1,171)	1:A:92:LEU:N	1:A:92:LEU:CA	1:A:92:LEU:C	1:A:93:SER:N	3	139.8
(1,135)	1:A:74:GLN:N	1:A:74:GLN:CA	1:A:74:GLN:C	1:A:75:ASP:N	6	139.8
(1,135)	1:A:74:GLN:N	1:A:74:GLN:CA	1:A:74:GLN:C	1:A:75:ASP:N	6	139.8
(1,135)	1:A:74:GLN:N	1:A:74:GLN:CA	1:A:74:GLN:C	1:A:75:ASP:N	6	139.8
(1,65)	1:A:39:LYS:N	1:A:39:LYS:CA	1:A:39:LYS:C	1:A:40:ALA:N	8	139.7
(1,65)	1:A:39:LYS:N	1:A:39:LYS:CA	1:A:39:LYS:C	1:A:40:ALA:N	8	139.7
(1,65)	1:A:39:LYS:N	1:A:39:LYS:CA	1:A:39:LYS:C	1:A:40:ALA:N	8	139.7

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,163)	1:A:88:SER:N	1:A:88:SER:CA	1:A:88:SER:C	1:A:89:ALA:N	5	139.6
(1,163)	1:A:88:SER:N	1:A:88:SER:CA	1:A:88:SER:C	1:A:89:ALA:N	5	139.6
(1,163)	1:A:88:SER:N	1:A:88:SER:CA	1:A:88:SER:C	1:A:89:ALA:N	5	139.6
(1,163)	1:A:88:SER:N	1:A:88:SER:CA	1:A:88:SER:C	1:A:89:ALA:N	1	139.5
(1,163)	1:A:88:SER:N	1:A:88:SER:CA	1:A:88:SER:C	1:A:89:ALA:N	1	139.5
(1,163)	1:A:88:SER:N	1:A:88:SER:CA	1:A:88:SER:C	1:A:89:ALA:N	1	139.5
(1,103)	1:A:58:GLU:N	1:A:58:GLU:CA	1:A:58:GLU:C	1:A:59:GLU:N	1	139.5
(1,103)	1:A:58:GLU:N	1:A:58:GLU:CA	1:A:58:GLU:C	1:A:59:GLU:N	1	139.5
(1,103)	1:A:58:GLU:N	1:A:58:GLU:CA	1:A:58:GLU:C	1:A:59:GLU:N	1	139.5
(1,127)	1:A:70:GLU:N	1:A:70:GLU:CA	1:A:70:GLU:C	1:A:71:ASP:N	10	139.4
(1,127)	1:A:70:GLU:N	1:A:70:GLU:CA	1:A:70:GLU:C	1:A:71:ASP:N	10	139.4
(1,127)	1:A:70:GLU:N	1:A:70:GLU:CA	1:A:70:GLU:C	1:A:71:ASP:N	10	139.4
(1,65)	1:A:39:LYS:N	1:A:39:LYS:CA	1:A:39:LYS:C	1:A:40:ALA:N	6	139.3
(1,65)	1:A:39:LYS:N	1:A:39:LYS:CA	1:A:39:LYS:C	1:A:40:ALA:N	6	139.3
(1,65)	1:A:39:LYS:N	1:A:39:LYS:CA	1:A:39:LYS:C	1:A:40:ALA:N	6	139.3
(1,163)	1:A:88:SER:N	1:A:88:SER:CA	1:A:88:SER:C	1:A:89:ALA:N	10	139.3
(1,163)	1:A:88:SER:N	1:A:88:SER:CA	1:A:88:SER:C	1:A:89:ALA:N	10	139.3
(1,163)	1:A:88:SER:N	1:A:88:SER:CA	1:A:88:SER:C	1:A:89:ALA:N	10	139.3
(1,65)	1:A:39:LYS:N	1:A:39:LYS:CA	1:A:39:LYS:C	1:A:40:ALA:N	4	139.2
(1,65)	1:A:39:LYS:N	1:A:39:LYS:CA	1:A:39:LYS:C	1:A:40:ALA:N	4	139.2
(1,65)	1:A:39:LYS:N	1:A:39:LYS:CA	1:A:39:LYS:C	1:A:40:ALA:N	4	139.2
(1,127)	1:A:70:GLU:N	1:A:70:GLU:CA	1:A:70:GLU:C	1:A:71:ASP:N	7	139.2
(1,127)	1:A:70:GLU:N	1:A:70:GLU:CA	1:A:70:GLU:C	1:A:71:ASP:N	7	139.2
(1,127)	1:A:70:GLU:N	1:A:70:GLU:CA	1:A:70:GLU:C	1:A:71:ASP:N	7	139.2
(1,65)	1:A:39:LYS:N	1:A:39:LYS:CA	1:A:39:LYS:C	1:A:40:ALA:N	3	139.1
(1,65)	1:A:39:LYS:N	1:A:39:LYS:CA	1:A:39:LYS:C	1:A:40:ALA:N	3	139.1
(1,65)	1:A:39:LYS:N	1:A:39:LYS:CA	1:A:39:LYS:C	1:A:40:ALA:N	3	139.1
(1,65)	1:A:39:LYS:N	1:A:39:LYS:CA	1:A:39:LYS:C	1:A:40:ALA:N	10	139.1
(1,65)	1:A:39:LYS:N	1:A:39:LYS:CA	1:A:39:LYS:C	1:A:40:ALA:N	10	139.1
(1,65)	1:A:39:LYS:N	1:A:39:LYS:CA	1:A:39:LYS:C	1:A:40:ALA:N	10	139.1
(1,65)	1:A:39:LYS:N	1:A:39:LYS:CA	1:A:39:LYS:C	1:A:40:ALA:N	10	139.1
(1,63)	1:A:38:ASN:N	1:A:38:ASN:CA	1:A:38:ASN:C	1:A:39:LYS:N	7	139.1
(1,63)	1:A:38:ASN:N	1:A:38:ASN:CA	1:A:38:ASN:C	1:A:39:LYS:N	7	139.1
(1,63)	1:A:38:ASN:N	1:A:38:ASN:CA	1:A:38:ASN:C	1:A:39:LYS:N	7	139.1
(1,157)	1:A:85:GLU:N	1:A:85:GLU:CA	1:A:85:GLU:C	1:A:86:LEU:N	10	139.1
(1,157)	1:A:85:GLU:N	1:A:85:GLU:CA	1:A:85:GLU:C	1:A:86:LEU:N	10	139.1
(1,157)	1:A:85:GLU:N	1:A:85:GLU:CA	1:A:85:GLU:C	1:A:86:LEU:N	10	139.1
(1,127)	1:A:70:GLU:N	1:A:70:GLU:CA	1:A:70:GLU:C	1:A:71:ASP:N	8	138.9
(1,127)	1:A:70:GLU:N	1:A:70:GLU:CA	1:A:70:GLU:C	1:A:71:ASP:N	8	138.9
(1,127)	1:A:70:GLU:N	1:A:70:GLU:CA	1:A:70:GLU:C	1:A:71:ASP:N	8	138.9
(1,85)	1:A:49:GLU:N	1:A:49:GLU:CA	1:A:49:GLU:C	1:A:50:VAL:N	3	138.8
(1,85)	1:A:49:GLU:N	1:A:49:GLU:CA	1:A:49:GLU:C	1:A:50:VAL:N	3	138.8
(1,85)	1:A:49:GLU:N	1:A:49:GLU:CA	1:A:49:GLU:C	1:A:50:VAL:N	3	138.8
(1,65)	1:A:39:LYS:N	1:A:39:LYS:CA	1:A:39:LYS:C	1:A:40:ALA:N	9	138.7
(1,65)	1:A:39:LYS:N	1:A:39:LYS:CA	1:A:39:LYS:C	1:A:40:ALA:N	9	138.7
(1,65)	1:A:39:LYS:N	1:A:39:LYS:CA	1:A:39:LYS:C	1:A:40:ALA:N	9	138.7
(1,47)	1:A:27:GLU:N	1:A:27:GLU:CA	1:A:27:GLU:C	1:A:28:LYS:N	6	138.7
(1,47)	1:A:27:GLU:N	1:A:27:GLU:CA	1:A:27:GLU:C	1:A:28:LYS:N	6	138.7
(1,47)	1:A:27:GLU:N	1:A:27:GLU:CA	1:A:27:GLU:C	1:A:28:LYS:N	6	138.7
(1,167)	1:A:90:HIS:N	1:A:90:HIS:CA	1:A:90:HIS:C	1:A:91:SER:N	1	138.7
(1,167)	1:A:90:HIS:N	1:A:90:HIS:CA	1:A:90:HIS:C	1:A:91:SER:N	1	138.7
(1,167)	1:A:90:HIS:N	1:A:90:HIS:CA	1:A:90:HIS:C	1:A:91:SER:N	1	138.7

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,135)	1:A:74:GLN:N	1:A:74:GLN:CA	1:A:74:GLN:C	1:A:75:ASP:N	9	138.7
(1,135)	1:A:74:GLN:N	1:A:74:GLN:CA	1:A:74:GLN:C	1:A:75:ASP:N	9	138.7
(1,135)	1:A:74:GLN:N	1:A:74:GLN:CA	1:A:74:GLN:C	1:A:75:ASP:N	9	138.7
(1,103)	1:A:58:GLU:N	1:A:58:GLU:CA	1:A:58:GLU:C	1:A:59:GLU:N	3	138.7
(1,103)	1:A:58:GLU:N	1:A:58:GLU:CA	1:A:58:GLU:C	1:A:59:GLU:N	3	138.7
(1,103)	1:A:58:GLU:N	1:A:58:GLU:CA	1:A:58:GLU:C	1:A:59:GLU:N	3	138.7
(1,89)	1:A:51:GLU:N	1:A:51:GLU:CA	1:A:51:GLU:C	1:A:52:LYS:N	5	138.6
(1,89)	1:A:51:GLU:N	1:A:51:GLU:CA	1:A:51:GLU:C	1:A:52:LYS:N	5	138.6
(1,89)	1:A:51:GLU:N	1:A:51:GLU:CA	1:A:51:GLU:C	1:A:52:LYS:N	5	138.6
(1,127)	1:A:70:GLU:N	1:A:70:GLU:CA	1:A:70:GLU:C	1:A:71:ASP:N	9	138.6
(1,127)	1:A:70:GLU:N	1:A:70:GLU:CA	1:A:70:GLU:C	1:A:71:ASP:N	9	138.6
(1,127)	1:A:70:GLU:N	1:A:70:GLU:CA	1:A:70:GLU:C	1:A:71:ASP:N	9	138.6
(1,103)	1:A:58:GLU:N	1:A:58:GLU:CA	1:A:58:GLU:C	1:A:59:GLU:N	10	138.6
(1,103)	1:A:58:GLU:N	1:A:58:GLU:CA	1:A:58:GLU:C	1:A:59:GLU:N	10	138.6
(1,103)	1:A:58:GLU:N	1:A:58:GLU:CA	1:A:58:GLU:C	1:A:59:GLU:N	10	138.6
(1,89)	1:A:51:GLU:N	1:A:51:GLU:CA	1:A:51:GLU:C	1:A:52:LYS:N	7	138.4
(1,89)	1:A:51:GLU:N	1:A:51:GLU:CA	1:A:51:GLU:C	1:A:52:LYS:N	7	138.4
(1,89)	1:A:51:GLU:N	1:A:51:GLU:CA	1:A:51:GLU:C	1:A:52:LYS:N	7	138.4
(1,65)	1:A:39:LYS:N	1:A:39:LYS:CA	1:A:39:LYS:C	1:A:40:ALA:N	5	138.4
(1,65)	1:A:39:LYS:N	1:A:39:LYS:CA	1:A:39:LYS:C	1:A:40:ALA:N	5	138.4
(1,65)	1:A:39:LYS:N	1:A:39:LYS:CA	1:A:39:LYS:C	1:A:40:ALA:N	5	138.4
(1,81)	1:A:47:LYS:N	1:A:47:LYS:CA	1:A:47:LYS:C	1:A:48:LYS:N	4	138.2
(1,81)	1:A:47:LYS:N	1:A:47:LYS:CA	1:A:47:LYS:C	1:A:48:LYS:N	4	138.2
(1,81)	1:A:47:LYS:N	1:A:47:LYS:CA	1:A:47:LYS:C	1:A:48:LYS:N	4	138.2
(1,33)	1:A:20:ASP:N	1:A:20:ASP:CA	1:A:20:ASP:C	1:A:21:GLU:N	6	138.2
(1,33)	1:A:20:ASP:N	1:A:20:ASP:CA	1:A:20:ASP:C	1:A:21:GLU:N	6	138.2
(1,33)	1:A:20:ASP:N	1:A:20:ASP:CA	1:A:20:ASP:C	1:A:21:GLU:N	6	138.2
(1,103)	1:A:58:GLU:N	1:A:58:GLU:CA	1:A:58:GLU:C	1:A:59:GLU:N	5	138.2
(1,103)	1:A:58:GLU:N	1:A:58:GLU:CA	1:A:58:GLU:C	1:A:59:GLU:N	5	138.2
(1,103)	1:A:58:GLU:N	1:A:58:GLU:CA	1:A:58:GLU:C	1:A:59:GLU:N	5	138.2
(1,103)	1:A:58:GLU:N	1:A:58:GLU:CA	1:A:58:GLU:C	1:A:59:GLU:N	9	138.2
(1,103)	1:A:58:GLU:N	1:A:58:GLU:CA	1:A:58:GLU:C	1:A:59:GLU:N	9	138.2
(1,103)	1:A:58:GLU:N	1:A:58:GLU:CA	1:A:58:GLU:C	1:A:59:GLU:N	9	138.2
(1,89)	1:A:51:GLU:N	1:A:51:GLU:CA	1:A:51:GLU:C	1:A:52:LYS:N	1	137.9
(1,89)	1:A:51:GLU:N	1:A:51:GLU:CA	1:A:51:GLU:C	1:A:52:LYS:N	1	137.9
(1,89)	1:A:51:GLU:N	1:A:51:GLU:CA	1:A:51:GLU:C	1:A:52:LYS:N	1	137.9
(1,47)	1:A:27:GLU:N	1:A:27:GLU:CA	1:A:27:GLU:C	1:A:28:LYS:N	5	137.9
(1,47)	1:A:27:GLU:N	1:A:27:GLU:CA	1:A:27:GLU:C	1:A:28:LYS:N	5	137.9
(1,47)	1:A:27:GLU:N	1:A:27:GLU:CA	1:A:27:GLU:C	1:A:28:LYS:N	5	137.9
(1,165)	1:A:89:ALA:N	1:A:89:ALA:CA	1:A:89:ALA:C	1:A:90:HIS:N	5	137.9
(1,165)	1:A:89:ALA:N	1:A:89:ALA:CA	1:A:89:ALA:C	1:A:90:HIS:N	5	137.9
(1,165)	1:A:89:ALA:N	1:A:89:ALA:CA	1:A:89:ALA:C	1:A:90:HIS:N	5	137.9
(1,157)	1:A:85:GLU:N	1:A:85:GLU:CA	1:A:85:GLU:C	1:A:86:LEU:N	9	137.9
(1,157)	1:A:85:GLU:N	1:A:85:GLU:CA	1:A:85:GLU:C	1:A:86:LEU:N	9	137.9
(1,157)	1:A:85:GLU:N	1:A:85:GLU:CA	1:A:85:GLU:C	1:A:86:LEU:N	9	137.9
(1,135)	1:A:74:GLN:N	1:A:74:GLN:CA	1:A:74:GLN:C	1:A:75:ASP:N	5	137.9
(1,135)	1:A:74:GLN:N	1:A:74:GLN:CA	1:A:74:GLN:C	1:A:75:ASP:N	5	137.9
(1,135)	1:A:74:GLN:N	1:A:74:GLN:CA	1:A:74:GLN:C	1:A:75:ASP:N	5	137.9
(1,97)	1:A:55:LYS:N	1:A:55:LYS:CA	1:A:55:LYS:C	1:A:56:LYS:N	6	137.7
(1,97)	1:A:55:LYS:N	1:A:55:LYS:CA	1:A:55:LYS:C	1:A:56:LYS:N	6	137.7
(1,97)	1:A:55:LYS:N	1:A:55:LYS:CA	1:A:55:LYS:C	1:A:56:LYS:N	6	137.7

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,127)	1:A:70:GLU:N	1:A:70:GLU:CA	1:A:70:GLU:C	1:A:71:ASP:N	2	137.7
(1,127)	1:A:70:GLU:N	1:A:70:GLU:CA	1:A:70:GLU:C	1:A:71:ASP:N	2	137.7
(1,127)	1:A:70:GLU:N	1:A:70:GLU:CA	1:A:70:GLU:C	1:A:71:ASP:N	2	137.7
(1,85)	1:A:49:GLU:N	1:A:49:GLU:CA	1:A:49:GLU:C	1:A:50:VAL:N	5	137.5
(1,85)	1:A:49:GLU:N	1:A:49:GLU:CA	1:A:49:GLU:C	1:A:50:VAL:N	5	137.5
(1,85)	1:A:49:GLU:N	1:A:49:GLU:CA	1:A:49:GLU:C	1:A:50:VAL:N	5	137.5
(1,81)	1:A:47:LYS:N	1:A:47:LYS:CA	1:A:47:LYS:C	1:A:48:LYS:N	3	137.5
(1,81)	1:A:47:LYS:N	1:A:47:LYS:CA	1:A:47:LYS:C	1:A:48:LYS:N	3	137.5
(1,81)	1:A:47:LYS:N	1:A:47:LYS:CA	1:A:47:LYS:C	1:A:48:LYS:N	3	137.5
(1,81)	1:A:47:LYS:N	1:A:47:LYS:CA	1:A:47:LYS:C	1:A:48:LYS:N	8	137.5
(1,81)	1:A:47:LYS:N	1:A:47:LYS:CA	1:A:47:LYS:C	1:A:48:LYS:N	8	137.5
(1,81)	1:A:47:LYS:N	1:A:47:LYS:CA	1:A:47:LYS:C	1:A:48:LYS:N	8	137.5
(1,97)	1:A:55:LYS:N	1:A:55:LYS:CA	1:A:55:LYS:C	1:A:56:LYS:N	2	137.4
(1,97)	1:A:55:LYS:N	1:A:55:LYS:CA	1:A:55:LYS:C	1:A:56:LYS:N	2	137.4
(1,97)	1:A:55:LYS:N	1:A:55:LYS:CA	1:A:55:LYS:C	1:A:56:LYS:N	2	137.4
(1,139)	1:A:76:VAL:N	1:A:76:VAL:CA	1:A:76:VAL:C	1:A:77:SER:N	1	137.4
(1,139)	1:A:76:VAL:N	1:A:76:VAL:CA	1:A:76:VAL:C	1:A:77:SER:N	1	137.4
(1,139)	1:A:76:VAL:N	1:A:76:VAL:CA	1:A:76:VAL:C	1:A:77:SER:N	1	137.4
(1,139)	1:A:76:VAL:N	1:A:76:VAL:CA	1:A:76:VAL:C	1:A:77:SER:N	8	137.4
(1,139)	1:A:76:VAL:N	1:A:76:VAL:CA	1:A:76:VAL:C	1:A:77:SER:N	8	137.4
(1,139)	1:A:76:VAL:N	1:A:76:VAL:CA	1:A:76:VAL:C	1:A:77:SER:N	8	137.4
(1,139)	1:A:76:VAL:N	1:A:76:VAL:CA	1:A:76:VAL:C	1:A:77:SER:N	8	137.4
(1,139)	1:A:76:VAL:N	1:A:76:VAL:CA	1:A:76:VAL:C	1:A:77:SER:N	10	137.3
(1,139)	1:A:76:VAL:N	1:A:76:VAL:CA	1:A:76:VAL:C	1:A:77:SER:N	10	137.3
(1,139)	1:A:76:VAL:N	1:A:76:VAL:CA	1:A:76:VAL:C	1:A:77:SER:N	10	137.3
(1,157)	1:A:85:GLU:N	1:A:85:GLU:CA	1:A:85:GLU:C	1:A:86:LEU:N	8	137.2
(1,157)	1:A:85:GLU:N	1:A:85:GLU:CA	1:A:85:GLU:C	1:A:86:LEU:N	8	137.2
(1,157)	1:A:85:GLU:N	1:A:85:GLU:CA	1:A:85:GLU:C	1:A:86:LEU:N	8	137.2
(1,97)	1:A:55:LYS:N	1:A:55:LYS:CA	1:A:55:LYS:C	1:A:56:LYS:N	8	137.1
(1,97)	1:A:55:LYS:N	1:A:55:LYS:CA	1:A:55:LYS:C	1:A:56:LYS:N	8	137.1
(1,97)	1:A:55:LYS:N	1:A:55:LYS:CA	1:A:55:LYS:C	1:A:56:LYS:N	8	137.1
(1,81)	1:A:47:LYS:N	1:A:47:LYS:CA	1:A:47:LYS:C	1:A:48:LYS:N	1	137.1
(1,81)	1:A:47:LYS:N	1:A:47:LYS:CA	1:A:47:LYS:C	1:A:48:LYS:N	1	137.1
(1,81)	1:A:47:LYS:N	1:A:47:LYS:CA	1:A:47:LYS:C	1:A:48:LYS:N	1	137.1
(1,65)	1:A:39:LYS:N	1:A:39:LYS:CA	1:A:39:LYS:C	1:A:40:ALA:N	7	137.1
(1,65)	1:A:39:LYS:N	1:A:39:LYS:CA	1:A:39:LYS:C	1:A:40:ALA:N	7	137.1
(1,65)	1:A:39:LYS:N	1:A:39:LYS:CA	1:A:39:LYS:C	1:A:40:ALA:N	7	137.1
(1,63)	1:A:38:ASN:N	1:A:38:ASN:CA	1:A:38:ASN:C	1:A:39:LYS:N	5	137.1
(1,63)	1:A:38:ASN:N	1:A:38:ASN:CA	1:A:38:ASN:C	1:A:39:LYS:N	5	137.1
(1,63)	1:A:38:ASN:N	1:A:38:ASN:CA	1:A:38:ASN:C	1:A:39:LYS:N	5	137.1
(1,181)	1:A:98:GLU:N	1:A:98:GLU:CA	1:A:98:GLU:C	1:A:99:VAL:N	1	137.1
(1,181)	1:A:98:GLU:N	1:A:98:GLU:CA	1:A:98:GLU:C	1:A:99:VAL:N	1	137.1
(1,181)	1:A:98:GLU:N	1:A:98:GLU:CA	1:A:98:GLU:C	1:A:99:VAL:N	1	137.1
(1,139)	1:A:76:VAL:N	1:A:76:VAL:CA	1:A:76:VAL:C	1:A:77:SER:N	7	137.1
(1,139)	1:A:76:VAL:N	1:A:76:VAL:CA	1:A:76:VAL:C	1:A:77:SER:N	7	137.1
(1,139)	1:A:76:VAL:N	1:A:76:VAL:CA	1:A:76:VAL:C	1:A:77:SER:N	7	137.1
(1,97)	1:A:55:LYS:N	1:A:55:LYS:CA	1:A:55:LYS:C	1:A:56:LYS:N	10	137.0
(1,97)	1:A:55:LYS:N	1:A:55:LYS:CA	1:A:55:LYS:C	1:A:56:LYS:N	10	137.0
(1,97)	1:A:55:LYS:N	1:A:55:LYS:CA	1:A:55:LYS:C	1:A:56:LYS:N	10	137.0
(1,85)	1:A:49:GLU:N	1:A:49:GLU:CA	1:A:49:GLU:C	1:A:50:VAL:N	2	137.0
(1,85)	1:A:49:GLU:N	1:A:49:GLU:CA	1:A:49:GLU:C	1:A:50:VAL:N	2	137.0
(1,85)	1:A:49:GLU:N	1:A:49:GLU:CA	1:A:49:GLU:C	1:A:50:VAL:N	2	137.0

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,103)	1:A:58:GLU:N	1:A:58:GLU:CA	1:A:58:GLU:C	1:A:59:GLU:N	2	137.0
(1,103)	1:A:58:GLU:N	1:A:58:GLU:CA	1:A:58:GLU:C	1:A:59:GLU:N	2	137.0
(1,103)	1:A:58:GLU:N	1:A:58:GLU:CA	1:A:58:GLU:C	1:A:59:GLU:N	2	137.0
(1,103)	1:A:58:GLU:N	1:A:58:GLU:CA	1:A:58:GLU:C	1:A:59:GLU:N	6	137.0
(1,103)	1:A:58:GLU:N	1:A:58:GLU:CA	1:A:58:GLU:C	1:A:59:GLU:N	6	137.0
(1,103)	1:A:58:GLU:N	1:A:58:GLU:CA	1:A:58:GLU:C	1:A:59:GLU:N	6	137.0
(1,101)	1:A:57:MET:N	1:A:57:MET:CA	1:A:57:MET:C	1:A:58:GLU:N	7	137.0
(1,101)	1:A:57:MET:N	1:A:57:MET:CA	1:A:57:MET:C	1:A:58:GLU:N	7	137.0
(1,101)	1:A:57:MET:N	1:A:57:MET:CA	1:A:57:MET:C	1:A:58:GLU:N	7	137.0
(1,89)	1:A:51:GLU:N	1:A:51:GLU:CA	1:A:51:GLU:C	1:A:52:LYS:N	4	136.8
(1,89)	1:A:51:GLU:N	1:A:51:GLU:CA	1:A:51:GLU:C	1:A:52:LYS:N	4	136.8
(1,89)	1:A:51:GLU:N	1:A:51:GLU:CA	1:A:51:GLU:C	1:A:52:LYS:N	4	136.8
(1,157)	1:A:85:GLU:N	1:A:85:GLU:CA	1:A:85:GLU:C	1:A:86:LEU:N	2	136.8
(1,157)	1:A:85:GLU:N	1:A:85:GLU:CA	1:A:85:GLU:C	1:A:86:LEU:N	2	136.8
(1,157)	1:A:85:GLU:N	1:A:85:GLU:CA	1:A:85:GLU:C	1:A:86:LEU:N	2	136.8
(1,135)	1:A:74:GLN:N	1:A:74:GLN:CA	1:A:74:GLN:C	1:A:75:ASP:N	1	136.8
(1,135)	1:A:74:GLN:N	1:A:74:GLN:CA	1:A:74:GLN:C	1:A:75:ASP:N	1	136.8
(1,135)	1:A:74:GLN:N	1:A:74:GLN:CA	1:A:74:GLN:C	1:A:75:ASP:N	1	136.8
(1,103)	1:A:58:GLU:N	1:A:58:GLU:CA	1:A:58:GLU:C	1:A:59:GLU:N	4	136.8
(1,103)	1:A:58:GLU:N	1:A:58:GLU:CA	1:A:58:GLU:C	1:A:59:GLU:N	4	136.8
(1,103)	1:A:58:GLU:N	1:A:58:GLU:CA	1:A:58:GLU:C	1:A:59:GLU:N	4	136.8
(1,103)	1:A:58:GLU:N	1:A:58:GLU:CA	1:A:58:GLU:C	1:A:59:GLU:N	8	136.8
(1,103)	1:A:58:GLU:N	1:A:58:GLU:CA	1:A:58:GLU:C	1:A:59:GLU:N	8	136.8
(1,103)	1:A:58:GLU:N	1:A:58:GLU:CA	1:A:58:GLU:C	1:A:59:GLU:N	8	136.8
(1,141)	1:A:77:SER:N	1:A:77:SER:CA	1:A:77:SER:C	1:A:78:ALA:N	8	136.7
(1,141)	1:A:77:SER:N	1:A:77:SER:CA	1:A:77:SER:C	1:A:78:ALA:N	8	136.7
(1,141)	1:A:77:SER:N	1:A:77:SER:CA	1:A:77:SER:C	1:A:78:ALA:N	8	136.7
(1,91)	1:A:52:LYS:N	1:A:52:LYS:CA	1:A:52:LYS:C	1:A:53:MET:N	6	136.6
(1,91)	1:A:52:LYS:N	1:A:52:LYS:CA	1:A:52:LYS:C	1:A:53:MET:N	6	136.6
(1,91)	1:A:52:LYS:N	1:A:52:LYS:CA	1:A:52:LYS:C	1:A:53:MET:N	6	136.6
(1,91)	1:A:52:LYS:N	1:A:52:LYS:CA	1:A:52:LYS:C	1:A:53:MET:N	7	136.6
(1,91)	1:A:52:LYS:N	1:A:52:LYS:CA	1:A:52:LYS:C	1:A:53:MET:N	7	136.6
(1,91)	1:A:52:LYS:N	1:A:52:LYS:CA	1:A:52:LYS:C	1:A:53:MET:N	7	136.6
(1,59)	1:A:36:SER:N	1:A:36:SER:CA	1:A:36:SER:C	1:A:37:ALA:N	8	136.6
(1,59)	1:A:36:SER:N	1:A:36:SER:CA	1:A:36:SER:C	1:A:37:ALA:N	8	136.6
(1,59)	1:A:36:SER:N	1:A:36:SER:CA	1:A:36:SER:C	1:A:37:ALA:N	8	136.6
(1,51)	1:A:29:LEU:N	1:A:29:LEU:CA	1:A:29:LEU:C	1:A:30:GLY:N	2	136.6
(1,51)	1:A:29:LEU:N	1:A:29:LEU:CA	1:A:29:LEU:C	1:A:30:GLY:N	2	136.6
(1,51)	1:A:29:LEU:N	1:A:29:LEU:CA	1:A:29:LEU:C	1:A:30:GLY:N	2	136.6
(1,47)	1:A:27:GLU:N	1:A:27:GLU:CA	1:A:27:GLU:C	1:A:28:LYS:N	3	136.6
(1,47)	1:A:27:GLU:N	1:A:27:GLU:CA	1:A:27:GLU:C	1:A:28:LYS:N	3	136.6
(1,47)	1:A:27:GLU:N	1:A:27:GLU:CA	1:A:27:GLU:C	1:A:28:LYS:N	3	136.6
(1,47)	1:A:27:GLU:N	1:A:27:GLU:CA	1:A:27:GLU:C	1:A:28:LYS:N	4	136.6
(1,47)	1:A:27:GLU:N	1:A:27:GLU:CA	1:A:27:GLU:C	1:A:28:LYS:N	4	136.6
(1,47)	1:A:27:GLU:N	1:A:27:GLU:CA	1:A:27:GLU:C	1:A:28:LYS:N	4	136.6
(1,47)	1:A:27:GLU:N	1:A:27:GLU:CA	1:A:27:GLU:C	1:A:28:LYS:N	8	136.6
(1,47)	1:A:27:GLU:N	1:A:27:GLU:CA	1:A:27:GLU:C	1:A:28:LYS:N	8	136.6
(1,47)	1:A:27:GLU:N	1:A:27:GLU:CA	1:A:27:GLU:C	1:A:28:LYS:N	8	136.6
(1,157)	1:A:85:GLU:N	1:A:85:GLU:CA	1:A:85:GLU:C	1:A:86:LEU:N	3	136.6
(1,157)	1:A:85:GLU:N	1:A:85:GLU:CA	1:A:85:GLU:C	1:A:86:LEU:N	3	136.6
(1,157)	1:A:85:GLU:N	1:A:85:GLU:CA	1:A:85:GLU:C	1:A:86:LEU:N	3	136.6

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,145)	1:A:79:SER:N	1:A:79:SER:CA	1:A:79:SER:C	1:A:80:ALA:N	6	136.6
(1,145)	1:A:79:SER:N	1:A:79:SER:CA	1:A:79:SER:C	1:A:80:ALA:N	6	136.6
(1,145)	1:A:79:SER:N	1:A:79:SER:CA	1:A:79:SER:C	1:A:80:ALA:N	6	136.6
(1,139)	1:A:76:VAL:N	1:A:76:VAL:CA	1:A:76:VAL:C	1:A:77:SER:N	6	136.6
(1,139)	1:A:76:VAL:N	1:A:76:VAL:CA	1:A:76:VAL:C	1:A:77:SER:N	6	136.6
(1,139)	1:A:76:VAL:N	1:A:76:VAL:CA	1:A:76:VAL:C	1:A:77:SER:N	6	136.6
(1,89)	1:A:51:GLU:N	1:A:51:GLU:CA	1:A:51:GLU:C	1:A:52:LYS:N	6	136.5
(1,89)	1:A:51:GLU:N	1:A:51:GLU:CA	1:A:51:GLU:C	1:A:52:LYS:N	6	136.5
(1,89)	1:A:51:GLU:N	1:A:51:GLU:CA	1:A:51:GLU:C	1:A:52:LYS:N	6	136.5
(1,5)	1:A:5:SER:N	1:A:5:SER:CA	1:A:5:SER:C	1:A:6:ASN:N	3	136.4
(1,5)	1:A:5:SER:N	1:A:5:SER:CA	1:A:5:SER:C	1:A:6:ASN:N	3	136.4
(1,5)	1:A:5:SER:N	1:A:5:SER:CA	1:A:5:SER:C	1:A:6:ASN:N	3	136.4
(1,43)	1:A:25:MET:N	1:A:25:MET:CA	1:A:25:MET:C	1:A:26:ILE:N	10	136.4
(1,43)	1:A:25:MET:N	1:A:25:MET:CA	1:A:25:MET:C	1:A:26:ILE:N	10	136.4
(1,43)	1:A:25:MET:N	1:A:25:MET:CA	1:A:25:MET:C	1:A:26:ILE:N	10	136.4
(1,35)	1:A:21:GLU:N	1:A:21:GLU:CA	1:A:21:GLU:C	1:A:22:ALA:N	2	136.4
(1,35)	1:A:21:GLU:N	1:A:21:GLU:CA	1:A:21:GLU:C	1:A:22:ALA:N	2	136.4
(1,35)	1:A:21:GLU:N	1:A:21:GLU:CA	1:A:21:GLU:C	1:A:22:ALA:N	2	136.4
(1,35)	1:A:21:GLU:N	1:A:21:GLU:CA	1:A:21:GLU:C	1:A:22:ALA:N	10	136.3
(1,35)	1:A:21:GLU:N	1:A:21:GLU:CA	1:A:21:GLU:C	1:A:22:ALA:N	10	136.3
(1,35)	1:A:21:GLU:N	1:A:21:GLU:CA	1:A:21:GLU:C	1:A:22:ALA:N	10	136.3
(1,163)	1:A:88:SER:N	1:A:88:SER:CA	1:A:88:SER:C	1:A:89:ALA:N	9	136.3
(1,163)	1:A:88:SER:N	1:A:88:SER:CA	1:A:88:SER:C	1:A:89:ALA:N	9	136.3
(1,163)	1:A:88:SER:N	1:A:88:SER:CA	1:A:88:SER:C	1:A:89:ALA:N	9	136.3
(1,101)	1:A:57:MET:N	1:A:57:MET:CA	1:A:57:MET:C	1:A:58:GLU:N	6	136.3
(1,101)	1:A:57:MET:N	1:A:57:MET:CA	1:A:57:MET:C	1:A:58:GLU:N	6	136.3
(1,101)	1:A:57:MET:N	1:A:57:MET:CA	1:A:57:MET:C	1:A:58:GLU:N	6	136.3
(1,135)	1:A:74:GLN:N	1:A:74:GLN:CA	1:A:74:GLN:C	1:A:75:ASP:N	3	136.2
(1,135)	1:A:74:GLN:N	1:A:74:GLN:CA	1:A:74:GLN:C	1:A:75:ASP:N	3	136.2
(1,135)	1:A:74:GLN:N	1:A:74:GLN:CA	1:A:74:GLN:C	1:A:75:ASP:N	3	136.2
(1,91)	1:A:52:LYS:N	1:A:52:LYS:CA	1:A:52:LYS:C	1:A:53:MET:N	1	136.1
(1,91)	1:A:52:LYS:N	1:A:52:LYS:CA	1:A:52:LYS:C	1:A:53:MET:N	1	136.1
(1,91)	1:A:52:LYS:N	1:A:52:LYS:CA	1:A:52:LYS:C	1:A:53:MET:N	1	136.1
(1,89)	1:A:51:GLU:N	1:A:51:GLU:CA	1:A:51:GLU:C	1:A:52:LYS:N	10	136.1
(1,89)	1:A:51:GLU:N	1:A:51:GLU:CA	1:A:51:GLU:C	1:A:52:LYS:N	10	136.1
(1,89)	1:A:51:GLU:N	1:A:51:GLU:CA	1:A:51:GLU:C	1:A:52:LYS:N	10	136.1
(1,81)	1:A:47:LYS:N	1:A:47:LYS:CA	1:A:47:LYS:C	1:A:48:LYS:N	2	136.1
(1,81)	1:A:47:LYS:N	1:A:47:LYS:CA	1:A:47:LYS:C	1:A:48:LYS:N	2	136.1
(1,81)	1:A:47:LYS:N	1:A:47:LYS:CA	1:A:47:LYS:C	1:A:48:LYS:N	2	136.1
(1,167)	1:A:90:HIS:N	1:A:90:HIS:CA	1:A:90:HIS:C	1:A:91:SER:N	4	136.1
(1,167)	1:A:90:HIS:N	1:A:90:HIS:CA	1:A:90:HIS:C	1:A:91:SER:N	4	136.1
(1,167)	1:A:90:HIS:N	1:A:90:HIS:CA	1:A:90:HIS:C	1:A:91:SER:N	4	136.1
(1,157)	1:A:85:GLU:N	1:A:85:GLU:CA	1:A:85:GLU:C	1:A:86:LEU:N	7	136.1
(1,157)	1:A:85:GLU:N	1:A:85:GLU:CA	1:A:85:GLU:C	1:A:86:LEU:N	7	136.1
(1,157)	1:A:85:GLU:N	1:A:85:GLU:CA	1:A:85:GLU:C	1:A:86:LEU:N	7	136.1
(1,139)	1:A:76:VAL:N	1:A:76:VAL:CA	1:A:76:VAL:C	1:A:77:SER:N	4	136.1
(1,139)	1:A:76:VAL:N	1:A:76:VAL:CA	1:A:76:VAL:C	1:A:77:SER:N	4	136.1
(1,139)	1:A:76:VAL:N	1:A:76:VAL:CA	1:A:76:VAL:C	1:A:77:SER:N	4	136.1
(1,127)	1:A:70:GLU:N	1:A:70:GLU:CA	1:A:70:GLU:C	1:A:71:ASP:N	1	136.1
(1,127)	1:A:70:GLU:N	1:A:70:GLU:CA	1:A:70:GLU:C	1:A:71:ASP:N	1	136.1
(1,127)	1:A:70:GLU:N	1:A:70:GLU:CA	1:A:70:GLU:C	1:A:71:ASP:N	1	136.1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,99)	1:A:56:LYS:N	1:A:56:LYS:CA	1:A:56:LYS:C	1:A:57:MET:N	1	136.0
(1,99)	1:A:56:LYS:N	1:A:56:LYS:CA	1:A:56:LYS:C	1:A:57:MET:N	1	136.0
(1,99)	1:A:56:LYS:N	1:A:56:LYS:CA	1:A:56:LYS:C	1:A:57:MET:N	1	136.0
(1,63)	1:A:38:ASN:N	1:A:38:ASN:CA	1:A:38:ASN:C	1:A:39:LYS:N	8	136.0
(1,63)	1:A:38:ASN:N	1:A:38:ASN:CA	1:A:38:ASN:C	1:A:39:LYS:N	8	136.0
(1,63)	1:A:38:ASN:N	1:A:38:ASN:CA	1:A:38:ASN:C	1:A:39:LYS:N	8	136.0
(1,33)	1:A:20:ASP:N	1:A:20:ASP:CA	1:A:20:ASP:C	1:A:21:GLU:N	7	136.0
(1,33)	1:A:20:ASP:N	1:A:20:ASP:CA	1:A:20:ASP:C	1:A:21:GLU:N	7	136.0
(1,33)	1:A:20:ASP:N	1:A:20:ASP:CA	1:A:20:ASP:C	1:A:21:GLU:N	7	136.0
(1,135)	1:A:74:GLN:N	1:A:74:GLN:CA	1:A:74:GLN:C	1:A:75:ASP:N	7	135.9
(1,135)	1:A:74:GLN:N	1:A:74:GLN:CA	1:A:74:GLN:C	1:A:75:ASP:N	7	135.9
(1,135)	1:A:74:GLN:N	1:A:74:GLN:CA	1:A:74:GLN:C	1:A:75:ASP:N	7	135.9
(1,101)	1:A:57:MET:N	1:A:57:MET:CA	1:A:57:MET:C	1:A:58:GLU:N	5	135.9
(1,101)	1:A:57:MET:N	1:A:57:MET:CA	1:A:57:MET:C	1:A:58:GLU:N	5	135.9
(1,101)	1:A:57:MET:N	1:A:57:MET:CA	1:A:57:MET:C	1:A:58:GLU:N	5	135.9
(1,91)	1:A:52:LYS:N	1:A:52:LYS:CA	1:A:52:LYS:C	1:A:53:MET:N	4	135.8
(1,91)	1:A:52:LYS:N	1:A:52:LYS:CA	1:A:52:LYS:C	1:A:53:MET:N	4	135.8
(1,91)	1:A:52:LYS:N	1:A:52:LYS:CA	1:A:52:LYS:C	1:A:53:MET:N	4	135.8
(1,135)	1:A:74:GLN:N	1:A:74:GLN:CA	1:A:74:GLN:C	1:A:75:ASP:N	4	135.8
(1,135)	1:A:74:GLN:N	1:A:74:GLN:CA	1:A:74:GLN:C	1:A:75:ASP:N	4	135.8
(1,135)	1:A:74:GLN:N	1:A:74:GLN:CA	1:A:74:GLN:C	1:A:75:ASP:N	4	135.8
(1,103)	1:A:58:GLU:N	1:A:58:GLU:CA	1:A:58:GLU:C	1:A:59:GLU:N	7	135.8
(1,103)	1:A:58:GLU:N	1:A:58:GLU:CA	1:A:58:GLU:C	1:A:59:GLU:N	7	135.8
(1,103)	1:A:58:GLU:N	1:A:58:GLU:CA	1:A:58:GLU:C	1:A:59:GLU:N	7	135.8
(1,101)	1:A:57:MET:N	1:A:57:MET:CA	1:A:57:MET:C	1:A:58:GLU:N	9	135.8
(1,101)	1:A:57:MET:N	1:A:57:MET:CA	1:A:57:MET:C	1:A:58:GLU:N	9	135.8
(1,101)	1:A:57:MET:N	1:A:57:MET:CA	1:A:57:MET:C	1:A:58:GLU:N	9	135.8
(1,139)	1:A:76:VAL:N	1:A:76:VAL:CA	1:A:76:VAL:C	1:A:77:SER:N	9	135.7
(1,139)	1:A:76:VAL:N	1:A:76:VAL:CA	1:A:76:VAL:C	1:A:77:SER:N	9	135.7
(1,139)	1:A:76:VAL:N	1:A:76:VAL:CA	1:A:76:VAL:C	1:A:77:SER:N	9	135.7
(1,101)	1:A:57:MET:N	1:A:57:MET:CA	1:A:57:MET:C	1:A:58:GLU:N	2	135.7
(1,101)	1:A:57:MET:N	1:A:57:MET:CA	1:A:57:MET:C	1:A:58:GLU:N	2	135.7
(1,101)	1:A:57:MET:N	1:A:57:MET:CA	1:A:57:MET:C	1:A:58:GLU:N	2	135.7
(1,47)	1:A:27:GLU:N	1:A:27:GLU:CA	1:A:27:GLU:C	1:A:28:LYS:N	7	135.6
(1,47)	1:A:27:GLU:N	1:A:27:GLU:CA	1:A:27:GLU:C	1:A:28:LYS:N	7	135.6
(1,47)	1:A:27:GLU:N	1:A:27:GLU:CA	1:A:27:GLU:C	1:A:28:LYS:N	7	135.6
(1,155)	1:A:84:GLN:N	1:A:84:GLN:CA	1:A:84:GLN:C	1:A:85:GLU:N	1	135.6
(1,155)	1:A:84:GLN:N	1:A:84:GLN:CA	1:A:84:GLN:C	1:A:85:GLU:N	1	135.6
(1,155)	1:A:84:GLN:N	1:A:84:GLN:CA	1:A:84:GLN:C	1:A:85:GLU:N	1	135.6
(1,139)	1:A:76:VAL:N	1:A:76:VAL:CA	1:A:76:VAL:C	1:A:77:SER:N	2	135.6
(1,139)	1:A:76:VAL:N	1:A:76:VAL:CA	1:A:76:VAL:C	1:A:77:SER:N	2	135.6
(1,139)	1:A:76:VAL:N	1:A:76:VAL:CA	1:A:76:VAL:C	1:A:77:SER:N	2	135.6
(1,135)	1:A:74:GLN:N	1:A:74:GLN:CA	1:A:74:GLN:C	1:A:75:ASP:N	10	135.6
(1,135)	1:A:74:GLN:N	1:A:74:GLN:CA	1:A:74:GLN:C	1:A:75:ASP:N	10	135.6
(1,135)	1:A:74:GLN:N	1:A:74:GLN:CA	1:A:74:GLN:C	1:A:75:ASP:N	10	135.6
(1,97)	1:A:55:LYS:N	1:A:55:LYS:CA	1:A:55:LYS:C	1:A:56:LYS:N	4	135.5
(1,97)	1:A:55:LYS:N	1:A:55:LYS:CA	1:A:55:LYS:C	1:A:56:LYS:N	4	135.5
(1,97)	1:A:55:LYS:N	1:A:55:LYS:CA	1:A:55:LYS:C	1:A:56:LYS:N	4	135.5
(1,85)	1:A:49:GLU:N	1:A:49:GLU:CA	1:A:49:GLU:C	1:A:50:VAL:N	4	135.5
(1,85)	1:A:49:GLU:N	1:A:49:GLU:CA	1:A:49:GLU:C	1:A:50:VAL:N	4	135.5
(1,85)	1:A:49:GLU:N	1:A:49:GLU:CA	1:A:49:GLU:C	1:A:50:VAL:N	4	135.5

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,83)	1:A:48:LYS:N	1:A:48:LYS:CA	1:A:48:LYS:C	1:A:49:GLU:N	1	135.5
(1,83)	1:A:48:LYS:N	1:A:48:LYS:CA	1:A:48:LYS:C	1:A:49:GLU:N	1	135.5
(1,83)	1:A:48:LYS:N	1:A:48:LYS:CA	1:A:48:LYS:C	1:A:49:GLU:N	1	135.5
(1,43)	1:A:25:MET:N	1:A:25:MET:CA	1:A:25:MET:C	1:A:26:ILE:N	1	135.5
(1,43)	1:A:25:MET:N	1:A:25:MET:CA	1:A:25:MET:C	1:A:26:ILE:N	1	135.5
(1,43)	1:A:25:MET:N	1:A:25:MET:CA	1:A:25:MET:C	1:A:26:ILE:N	1	135.5
(1,43)	1:A:25:MET:N	1:A:25:MET:CA	1:A:25:MET:C	1:A:26:ILE:N	9	135.4
(1,43)	1:A:25:MET:N	1:A:25:MET:CA	1:A:25:MET:C	1:A:26:ILE:N	9	135.4
(1,43)	1:A:25:MET:N	1:A:25:MET:CA	1:A:25:MET:C	1:A:26:ILE:N	9	135.4
(1,47)	1:A:27:GLU:N	1:A:27:GLU:CA	1:A:27:GLU:C	1:A:28:LYS:N	1	135.3
(1,47)	1:A:27:GLU:N	1:A:27:GLU:CA	1:A:27:GLU:C	1:A:28:LYS:N	1	135.3
(1,47)	1:A:27:GLU:N	1:A:27:GLU:CA	1:A:27:GLU:C	1:A:28:LYS:N	1	135.3
(1,51)	1:A:29:LEU:N	1:A:29:LEU:CA	1:A:29:LEU:C	1:A:30:GLY:N	7	135.2
(1,51)	1:A:29:LEU:N	1:A:29:LEU:CA	1:A:29:LEU:C	1:A:30:GLY:N	7	135.2
(1,51)	1:A:29:LEU:N	1:A:29:LEU:CA	1:A:29:LEU:C	1:A:30:GLY:N	7	135.2
(1,159)	1:A:86:LEU:N	1:A:86:LEU:CA	1:A:86:LEU:C	1:A:87:LEU:N	9	135.2
(1,159)	1:A:86:LEU:N	1:A:86:LEU:CA	1:A:86:LEU:C	1:A:87:LEU:N	9	135.2
(1,159)	1:A:86:LEU:N	1:A:86:LEU:CA	1:A:86:LEU:C	1:A:87:LEU:N	9	135.2
(1,85)	1:A:49:GLU:N	1:A:49:GLU:CA	1:A:49:GLU:C	1:A:50:VAL:N	1	135.1
(1,85)	1:A:49:GLU:N	1:A:49:GLU:CA	1:A:49:GLU:C	1:A:50:VAL:N	1	135.1
(1,85)	1:A:49:GLU:N	1:A:49:GLU:CA	1:A:49:GLU:C	1:A:50:VAL:N	1	135.1
(1,81)	1:A:47:LYS:N	1:A:47:LYS:CA	1:A:47:LYS:C	1:A:48:LYS:N	7	135.1
(1,81)	1:A:47:LYS:N	1:A:47:LYS:CA	1:A:47:LYS:C	1:A:48:LYS:N	7	135.1
(1,81)	1:A:47:LYS:N	1:A:47:LYS:CA	1:A:47:LYS:C	1:A:48:LYS:N	7	135.1
(1,81)	1:A:47:LYS:N	1:A:47:LYS:CA	1:A:47:LYS:C	1:A:48:LYS:N	9	135.1
(1,81)	1:A:47:LYS:N	1:A:47:LYS:CA	1:A:47:LYS:C	1:A:48:LYS:N	9	135.1
(1,81)	1:A:47:LYS:N	1:A:47:LYS:CA	1:A:47:LYS:C	1:A:48:LYS:N	9	135.1
(1,43)	1:A:25:MET:N	1:A:25:MET:CA	1:A:25:MET:C	1:A:26:ILE:N	4	135.1
(1,43)	1:A:25:MET:N	1:A:25:MET:CA	1:A:25:MET:C	1:A:26:ILE:N	4	135.1
(1,43)	1:A:25:MET:N	1:A:25:MET:CA	1:A:25:MET:C	1:A:26:ILE:N	4	135.1
(1,169)	1:A:91:SER:N	1:A:91:SER:CA	1:A:91:SER:C	1:A:92:LEU:N	6	135.1
(1,169)	1:A:91:SER:N	1:A:91:SER:CA	1:A:91:SER:C	1:A:92:LEU:N	6	135.1
(1,169)	1:A:91:SER:N	1:A:91:SER:CA	1:A:91:SER:C	1:A:92:LEU:N	6	135.1
(1,139)	1:A:76:VAL:N	1:A:76:VAL:CA	1:A:76:VAL:C	1:A:77:SER:N	3	135.1
(1,139)	1:A:76:VAL:N	1:A:76:VAL:CA	1:A:76:VAL:C	1:A:77:SER:N	3	135.1
(1,139)	1:A:76:VAL:N	1:A:76:VAL:CA	1:A:76:VAL:C	1:A:77:SER:N	3	135.1
(1,131)	1:A:72:PHE:N	1:A:72:PHE:CA	1:A:72:PHE:C	1:A:73:LEU:N	2	135.1
(1,131)	1:A:72:PHE:N	1:A:72:PHE:CA	1:A:72:PHE:C	1:A:73:LEU:N	2	135.1
(1,131)	1:A:72:PHE:N	1:A:72:PHE:CA	1:A:72:PHE:C	1:A:73:LEU:N	2	135.1
(1,141)	1:A:77:SER:N	1:A:77:SER:CA	1:A:77:SER:C	1:A:78:ALA:N	6	135.0
(1,141)	1:A:77:SER:N	1:A:77:SER:CA	1:A:77:SER:C	1:A:78:ALA:N	6	135.0
(1,141)	1:A:77:SER:N	1:A:77:SER:CA	1:A:77:SER:C	1:A:78:ALA:N	6	135.0
(1,135)	1:A:74:GLN:N	1:A:74:GLN:CA	1:A:74:GLN:C	1:A:75:ASP:N	8	135.0
(1,135)	1:A:74:GLN:N	1:A:74:GLN:CA	1:A:74:GLN:C	1:A:75:ASP:N	8	135.0
(1,135)	1:A:74:GLN:N	1:A:74:GLN:CA	1:A:74:GLN:C	1:A:75:ASP:N	8	135.0
(1,101)	1:A:57:MET:N	1:A:57:MET:CA	1:A:57:MET:C	1:A:58:GLU:N	1	135.0
(1,101)	1:A:57:MET:N	1:A:57:MET:CA	1:A:57:MET:C	1:A:58:GLU:N	1	135.0
(1,101)	1:A:57:MET:N	1:A:57:MET:CA	1:A:57:MET:C	1:A:58:GLU:N	1	135.0
(1,101)	1:A:57:MET:N	1:A:57:MET:CA	1:A:57:MET:C	1:A:58:GLU:N	10	135.0
(1,101)	1:A:57:MET:N	1:A:57:MET:CA	1:A:57:MET:C	1:A:58:GLU:N	10	135.0
(1,101)	1:A:57:MET:N	1:A:57:MET:CA	1:A:57:MET:C	1:A:58:GLU:N	10	135.0

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,51)	1:A:29:LEU:N	1:A:29:LEU:CA	1:A:29:LEU:C	1:A:30:GLY:N	3	134.9
(1,51)	1:A:29:LEU:N	1:A:29:LEU:CA	1:A:29:LEU:C	1:A:30:GLY:N	3	134.9
(1,51)	1:A:29:LEU:N	1:A:29:LEU:CA	1:A:29:LEU:C	1:A:30:GLY:N	3	134.9
(1,155)	1:A:84:GLN:N	1:A:84:GLN:CA	1:A:84:GLN:C	1:A:85:GLU:N	10	134.9
(1,155)	1:A:84:GLN:N	1:A:84:GLN:CA	1:A:84:GLN:C	1:A:85:GLU:N	10	134.9
(1,155)	1:A:84:GLN:N	1:A:84:GLN:CA	1:A:84:GLN:C	1:A:85:GLU:N	10	134.9
(1,141)	1:A:77:SER:N	1:A:77:SER:CA	1:A:77:SER:C	1:A:78:ALA:N	10	134.9
(1,141)	1:A:77:SER:N	1:A:77:SER:CA	1:A:77:SER:C	1:A:78:ALA:N	10	134.9
(1,141)	1:A:77:SER:N	1:A:77:SER:CA	1:A:77:SER:C	1:A:78:ALA:N	10	134.9
(1,99)	1:A:56:LYS:N	1:A:56:LYS:CA	1:A:56:LYS:C	1:A:57:MET:N	3	134.8
(1,99)	1:A:56:LYS:N	1:A:56:LYS:CA	1:A:56:LYS:C	1:A:57:MET:N	3	134.8
(1,99)	1:A:56:LYS:N	1:A:56:LYS:CA	1:A:56:LYS:C	1:A:57:MET:N	3	134.8
(1,99)	1:A:56:LYS:N	1:A:56:LYS:CA	1:A:56:LYS:C	1:A:57:MET:N	10	134.8
(1,99)	1:A:56:LYS:N	1:A:56:LYS:CA	1:A:56:LYS:C	1:A:57:MET:N	10	134.8
(1,99)	1:A:56:LYS:N	1:A:56:LYS:CA	1:A:56:LYS:C	1:A:57:MET:N	10	134.8
(1,83)	1:A:48:LYS:N	1:A:48:LYS:CA	1:A:48:LYS:C	1:A:49:GLU:N	4	134.8
(1,83)	1:A:48:LYS:N	1:A:48:LYS:CA	1:A:48:LYS:C	1:A:49:GLU:N	4	134.8
(1,83)	1:A:48:LYS:N	1:A:48:LYS:CA	1:A:48:LYS:C	1:A:49:GLU:N	4	134.8
(1,169)	1:A:91:SER:N	1:A:91:SER:CA	1:A:91:SER:C	1:A:92:LEU:N	9	134.8
(1,169)	1:A:91:SER:N	1:A:91:SER:CA	1:A:91:SER:C	1:A:92:LEU:N	9	134.8
(1,169)	1:A:91:SER:N	1:A:91:SER:CA	1:A:91:SER:C	1:A:92:LEU:N	9	134.8
(1,101)	1:A:57:MET:N	1:A:57:MET:CA	1:A:57:MET:C	1:A:58:GLU:N	4	134.8
(1,101)	1:A:57:MET:N	1:A:57:MET:CA	1:A:57:MET:C	1:A:58:GLU:N	4	134.8
(1,101)	1:A:57:MET:N	1:A:57:MET:CA	1:A:57:MET:C	1:A:58:GLU:N	4	134.8
(1,101)	1:A:57:MET:N	1:A:57:MET:CA	1:A:57:MET:C	1:A:58:GLU:N	8	134.8
(1,101)	1:A:57:MET:N	1:A:57:MET:CA	1:A:57:MET:C	1:A:58:GLU:N	8	134.8
(1,101)	1:A:57:MET:N	1:A:57:MET:CA	1:A:57:MET:C	1:A:58:GLU:N	8	134.8
(1,99)	1:A:56:LYS:N	1:A:56:LYS:CA	1:A:56:LYS:C	1:A:57:MET:N	5	134.7
(1,99)	1:A:56:LYS:N	1:A:56:LYS:CA	1:A:56:LYS:C	1:A:57:MET:N	5	134.7
(1,99)	1:A:56:LYS:N	1:A:56:LYS:CA	1:A:56:LYS:C	1:A:57:MET:N	5	134.7
(1,51)	1:A:29:LEU:N	1:A:29:LEU:CA	1:A:29:LEU:C	1:A:30:GLY:N	5	134.7
(1,51)	1:A:29:LEU:N	1:A:29:LEU:CA	1:A:29:LEU:C	1:A:30:GLY:N	5	134.7
(1,51)	1:A:29:LEU:N	1:A:29:LEU:CA	1:A:29:LEU:C	1:A:30:GLY:N	5	134.7
(1,51)	1:A:29:LEU:N	1:A:29:LEU:CA	1:A:29:LEU:C	1:A:30:GLY:N	9	134.7
(1,51)	1:A:29:LEU:N	1:A:29:LEU:CA	1:A:29:LEU:C	1:A:30:GLY:N	9	134.7
(1,51)	1:A:29:LEU:N	1:A:29:LEU:CA	1:A:29:LEU:C	1:A:30:GLY:N	9	134.7
(1,43)	1:A:25:MET:N	1:A:25:MET:CA	1:A:25:MET:C	1:A:26:ILE:N	2	134.7
(1,43)	1:A:25:MET:N	1:A:25:MET:CA	1:A:25:MET:C	1:A:26:ILE:N	2	134.7
(1,43)	1:A:25:MET:N	1:A:25:MET:CA	1:A:25:MET:C	1:A:26:ILE:N	2	134.7
(1,39)	1:A:23:LYS:N	1:A:23:LYS:CA	1:A:23:LYS:C	1:A:24:ALA:N	10	134.7
(1,39)	1:A:23:LYS:N	1:A:23:LYS:CA	1:A:23:LYS:C	1:A:24:ALA:N	10	134.7
(1,39)	1:A:23:LYS:N	1:A:23:LYS:CA	1:A:23:LYS:C	1:A:24:ALA:N	10	134.7
(1,163)	1:A:88:SER:N	1:A:88:SER:CA	1:A:88:SER:C	1:A:89:ALA:N	7	134.7
(1,163)	1:A:88:SER:N	1:A:88:SER:CA	1:A:88:SER:C	1:A:89:ALA:N	7	134.7
(1,163)	1:A:88:SER:N	1:A:88:SER:CA	1:A:88:SER:C	1:A:89:ALA:N	7	134.7
(1,159)	1:A:86:LEU:N	1:A:86:LEU:CA	1:A:86:LEU:C	1:A:87:LEU:N	10	134.7
(1,159)	1:A:86:LEU:N	1:A:86:LEU:CA	1:A:86:LEU:C	1:A:87:LEU:N	10	134.7
(1,159)	1:A:86:LEU:N	1:A:86:LEU:CA	1:A:86:LEU:C	1:A:87:LEU:N	10	134.7
(1,133)	1:A:73:LEU:N	1:A:73:LEU:CA	1:A:73:LEU:C	1:A:74:GLN:N	4	134.7
(1,133)	1:A:73:LEU:N	1:A:73:LEU:CA	1:A:73:LEU:C	1:A:74:GLN:N	4	134.7
(1,133)	1:A:73:LEU:N	1:A:73:LEU:CA	1:A:73:LEU:C	1:A:74:GLN:N	4	134.7

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,85)	1:A:49:GLU:N	1:A:49:GLU:CA	1:A:49:GLU:C	1:A:50:VAL:N	9	134.6
(1,85)	1:A:49:GLU:N	1:A:49:GLU:CA	1:A:49:GLU:C	1:A:50:VAL:N	9	134.6
(1,85)	1:A:49:GLU:N	1:A:49:GLU:CA	1:A:49:GLU:C	1:A:50:VAL:N	9	134.6
(1,39)	1:A:23:LYS:N	1:A:23:LYS:CA	1:A:23:LYS:C	1:A:24:ALA:N	4	134.6
(1,39)	1:A:23:LYS:N	1:A:23:LYS:CA	1:A:23:LYS:C	1:A:24:ALA:N	4	134.6
(1,39)	1:A:23:LYS:N	1:A:23:LYS:CA	1:A:23:LYS:C	1:A:24:ALA:N	4	134.6
(1,157)	1:A:85:GLU:N	1:A:85:GLU:CA	1:A:85:GLU:C	1:A:86:LEU:N	1	134.6
(1,157)	1:A:85:GLU:N	1:A:85:GLU:CA	1:A:85:GLU:C	1:A:86:LEU:N	1	134.6
(1,157)	1:A:85:GLU:N	1:A:85:GLU:CA	1:A:85:GLU:C	1:A:86:LEU:N	1	134.6
(1,89)	1:A:51:GLU:N	1:A:51:GLU:CA	1:A:51:GLU:C	1:A:52:LYS:N	8	134.5
(1,89)	1:A:51:GLU:N	1:A:51:GLU:CA	1:A:51:GLU:C	1:A:52:LYS:N	8	134.5
(1,89)	1:A:51:GLU:N	1:A:51:GLU:CA	1:A:51:GLU:C	1:A:52:LYS:N	8	134.5
(1,163)	1:A:88:SER:N	1:A:88:SER:CA	1:A:88:SER:C	1:A:89:ALA:N	6	134.5
(1,163)	1:A:88:SER:N	1:A:88:SER:CA	1:A:88:SER:C	1:A:89:ALA:N	6	134.5
(1,163)	1:A:88:SER:N	1:A:88:SER:CA	1:A:88:SER:C	1:A:89:ALA:N	6	134.5
(1,157)	1:A:85:GLU:N	1:A:85:GLU:CA	1:A:85:GLU:C	1:A:86:LEU:N	4	134.5
(1,157)	1:A:85:GLU:N	1:A:85:GLU:CA	1:A:85:GLU:C	1:A:86:LEU:N	4	134.5
(1,157)	1:A:85:GLU:N	1:A:85:GLU:CA	1:A:85:GLU:C	1:A:86:LEU:N	4	134.5
(1,97)	1:A:55:LYS:N	1:A:55:LYS:CA	1:A:55:LYS:C	1:A:56:LYS:N	1	134.4
(1,97)	1:A:55:LYS:N	1:A:55:LYS:CA	1:A:55:LYS:C	1:A:56:LYS:N	1	134.4
(1,97)	1:A:55:LYS:N	1:A:55:LYS:CA	1:A:55:LYS:C	1:A:56:LYS:N	1	134.4
(1,167)	1:A:90:HIS:N	1:A:90:HIS:CA	1:A:90:HIS:C	1:A:91:SER:N	5	134.4
(1,167)	1:A:90:HIS:N	1:A:90:HIS:CA	1:A:90:HIS:C	1:A:91:SER:N	5	134.4
(1,167)	1:A:90:HIS:N	1:A:90:HIS:CA	1:A:90:HIS:C	1:A:91:SER:N	5	134.4
(1,163)	1:A:88:SER:N	1:A:88:SER:CA	1:A:88:SER:C	1:A:89:ALA:N	2	134.4
(1,163)	1:A:88:SER:N	1:A:88:SER:CA	1:A:88:SER:C	1:A:89:ALA:N	2	134.4
(1,163)	1:A:88:SER:N	1:A:88:SER:CA	1:A:88:SER:C	1:A:89:ALA:N	2	134.4
(1,155)	1:A:84:GLN:N	1:A:84:GLN:CA	1:A:84:GLN:C	1:A:85:GLU:N	5	134.4
(1,155)	1:A:84:GLN:N	1:A:84:GLN:CA	1:A:84:GLN:C	1:A:85:GLU:N	5	134.4
(1,155)	1:A:84:GLN:N	1:A:84:GLN:CA	1:A:84:GLN:C	1:A:85:GLU:N	5	134.4
(1,127)	1:A:70:GLU:N	1:A:70:GLU:CA	1:A:70:GLU:C	1:A:71:ASP:N	4	134.4
(1,127)	1:A:70:GLU:N	1:A:70:GLU:CA	1:A:70:GLU:C	1:A:71:ASP:N	4	134.4
(1,127)	1:A:70:GLU:N	1:A:70:GLU:CA	1:A:70:GLU:C	1:A:71:ASP:N	4	134.4
(1,99)	1:A:56:LYS:N	1:A:56:LYS:CA	1:A:56:LYS:C	1:A:57:MET:N	8	134.3
(1,99)	1:A:56:LYS:N	1:A:56:LYS:CA	1:A:56:LYS:C	1:A:57:MET:N	8	134.3
(1,99)	1:A:56:LYS:N	1:A:56:LYS:CA	1:A:56:LYS:C	1:A:57:MET:N	8	134.3
(1,91)	1:A:52:LYS:N	1:A:52:LYS:CA	1:A:52:LYS:C	1:A:53:MET:N	9	134.2
(1,91)	1:A:52:LYS:N	1:A:52:LYS:CA	1:A:52:LYS:C	1:A:53:MET:N	9	134.2
(1,91)	1:A:52:LYS:N	1:A:52:LYS:CA	1:A:52:LYS:C	1:A:53:MET:N	9	134.2
(1,161)	1:A:87:LEU:N	1:A:87:LEU:CA	1:A:87:LEU:C	1:A:88:SER:N	10	134.2
(1,161)	1:A:87:LEU:N	1:A:87:LEU:CA	1:A:87:LEU:C	1:A:88:SER:N	10	134.2
(1,161)	1:A:87:LEU:N	1:A:87:LEU:CA	1:A:87:LEU:C	1:A:88:SER:N	10	134.2
(1,97)	1:A:55:LYS:N	1:A:55:LYS:CA	1:A:55:LYS:C	1:A:56:LYS:N	3	134.1
(1,97)	1:A:55:LYS:N	1:A:55:LYS:CA	1:A:55:LYS:C	1:A:56:LYS:N	3	134.1
(1,97)	1:A:55:LYS:N	1:A:55:LYS:CA	1:A:55:LYS:C	1:A:56:LYS:N	3	134.1
(1,43)	1:A:25:MET:N	1:A:25:MET:CA	1:A:25:MET:C	1:A:26:ILE:N	3	134.1
(1,43)	1:A:25:MET:N	1:A:25:MET:CA	1:A:25:MET:C	1:A:26:ILE:N	3	134.1
(1,43)	1:A:25:MET:N	1:A:25:MET:CA	1:A:25:MET:C	1:A:26:ILE:N	3	134.1
(1,33)	1:A:20:ASP:N	1:A:20:ASP:CA	1:A:20:ASP:C	1:A:21:GLU:N	2	134.1
(1,33)	1:A:20:ASP:N	1:A:20:ASP:CA	1:A:20:ASP:C	1:A:21:GLU:N	2	134.1
(1,33)	1:A:20:ASP:N	1:A:20:ASP:CA	1:A:20:ASP:C	1:A:21:GLU:N	2	134.1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,97)	1:A:55:LYS:N	1:A:55:LYS:CA	1:A:55:LYS:C	1:A:56:LYS:N	5	134.0
(1,97)	1:A:55:LYS:N	1:A:55:LYS:CA	1:A:55:LYS:C	1:A:56:LYS:N	5	134.0
(1,97)	1:A:55:LYS:N	1:A:55:LYS:CA	1:A:55:LYS:C	1:A:56:LYS:N	5	134.0
(1,85)	1:A:49:GLU:N	1:A:49:GLU:CA	1:A:49:GLU:C	1:A:50:VAL:N	8	134.0
(1,85)	1:A:49:GLU:N	1:A:49:GLU:CA	1:A:49:GLU:C	1:A:50:VAL:N	8	134.0
(1,85)	1:A:49:GLU:N	1:A:49:GLU:CA	1:A:49:GLU:C	1:A:50:VAL:N	8	134.0
(1,35)	1:A:21:GLU:N	1:A:21:GLU:CA	1:A:21:GLU:C	1:A:22:ALA:N	7	134.0
(1,35)	1:A:21:GLU:N	1:A:21:GLU:CA	1:A:21:GLU:C	1:A:22:ALA:N	7	134.0
(1,35)	1:A:21:GLU:N	1:A:21:GLU:CA	1:A:21:GLU:C	1:A:22:ALA:N	7	134.0
(1,165)	1:A:89:ALA:N	1:A:89:ALA:CA	1:A:89:ALA:C	1:A:90:HIS:N	1	134.0
(1,165)	1:A:89:ALA:N	1:A:89:ALA:CA	1:A:89:ALA:C	1:A:90:HIS:N	1	134.0
(1,165)	1:A:89:ALA:N	1:A:89:ALA:CA	1:A:89:ALA:C	1:A:90:HIS:N	1	134.0
(1,165)	1:A:89:ALA:N	1:A:89:ALA:CA	1:A:89:ALA:C	1:A:90:HIS:N	2	134.0
(1,165)	1:A:89:ALA:N	1:A:89:ALA:CA	1:A:89:ALA:C	1:A:90:HIS:N	2	134.0
(1,165)	1:A:89:ALA:N	1:A:89:ALA:CA	1:A:89:ALA:C	1:A:90:HIS:N	2	134.0
(1,155)	1:A:84:GLN:N	1:A:84:GLN:CA	1:A:84:GLN:C	1:A:85:GLU:N	9	134.0
(1,155)	1:A:84:GLN:N	1:A:84:GLN:CA	1:A:84:GLN:C	1:A:85:GLU:N	9	134.0
(1,155)	1:A:84:GLN:N	1:A:84:GLN:CA	1:A:84:GLN:C	1:A:85:GLU:N	9	134.0
(1,141)	1:A:77:SER:N	1:A:77:SER:CA	1:A:77:SER:C	1:A:78:ALA:N	2	134.0
(1,141)	1:A:77:SER:N	1:A:77:SER:CA	1:A:77:SER:C	1:A:78:ALA:N	2	134.0
(1,141)	1:A:77:SER:N	1:A:77:SER:CA	1:A:77:SER:C	1:A:78:ALA:N	2	134.0
(1,133)	1:A:73:LEU:N	1:A:73:LEU:CA	1:A:73:LEU:C	1:A:74:GLN:N	10	134.0
(1,133)	1:A:73:LEU:N	1:A:73:LEU:CA	1:A:73:LEU:C	1:A:74:GLN:N	10	134.0
(1,133)	1:A:73:LEU:N	1:A:73:LEU:CA	1:A:73:LEU:C	1:A:74:GLN:N	10	134.0
(1,131)	1:A:72:PHE:N	1:A:72:PHE:CA	1:A:72:PHE:C	1:A:73:LEU:N	7	134.0
(1,131)	1:A:72:PHE:N	1:A:72:PHE:CA	1:A:72:PHE:C	1:A:73:LEU:N	7	134.0
(1,131)	1:A:72:PHE:N	1:A:72:PHE:CA	1:A:72:PHE:C	1:A:73:LEU:N	7	134.0
(1,99)	1:A:56:LYS:N	1:A:56:LYS:CA	1:A:56:LYS:C	1:A:57:MET:N	2	133.9
(1,99)	1:A:56:LYS:N	1:A:56:LYS:CA	1:A:56:LYS:C	1:A:57:MET:N	2	133.9
(1,99)	1:A:56:LYS:N	1:A:56:LYS:CA	1:A:56:LYS:C	1:A:57:MET:N	2	133.9
(1,99)	1:A:56:LYS:N	1:A:56:LYS:CA	1:A:56:LYS:C	1:A:57:MET:N	7	133.9
(1,99)	1:A:56:LYS:N	1:A:56:LYS:CA	1:A:56:LYS:C	1:A:57:MET:N	7	133.9
(1,99)	1:A:56:LYS:N	1:A:56:LYS:CA	1:A:56:LYS:C	1:A:57:MET:N	7	133.9
(1,83)	1:A:48:LYS:N	1:A:48:LYS:CA	1:A:48:LYS:C	1:A:49:GLU:N	8	133.9
(1,83)	1:A:48:LYS:N	1:A:48:LYS:CA	1:A:48:LYS:C	1:A:49:GLU:N	8	133.9
(1,83)	1:A:48:LYS:N	1:A:48:LYS:CA	1:A:48:LYS:C	1:A:49:GLU:N	8	133.9
(1,63)	1:A:38:ASN:N	1:A:38:ASN:CA	1:A:38:ASN:C	1:A:39:LYS:N	6	133.9
(1,63)	1:A:38:ASN:N	1:A:38:ASN:CA	1:A:38:ASN:C	1:A:39:LYS:N	6	133.9
(1,63)	1:A:38:ASN:N	1:A:38:ASN:CA	1:A:38:ASN:C	1:A:39:LYS:N	6	133.9
(1,41)	1:A:24:ALA:N	1:A:24:ALA:CA	1:A:24:ALA:C	1:A:25:MET:N	3	133.9
(1,41)	1:A:24:ALA:N	1:A:24:ALA:CA	1:A:24:ALA:C	1:A:25:MET:N	3	133.9
(1,41)	1:A:24:ALA:N	1:A:24:ALA:CA	1:A:24:ALA:C	1:A:25:MET:N	3	133.9
(1,153)	1:A:83:LEU:N	1:A:83:LEU:CA	1:A:83:LEU:C	1:A:84:GLN:N	6	133.9
(1,153)	1:A:83:LEU:N	1:A:83:LEU:CA	1:A:83:LEU:C	1:A:84:GLN:N	6	133.9
(1,153)	1:A:83:LEU:N	1:A:83:LEU:CA	1:A:83:LEU:C	1:A:84:GLN:N	6	133.9
(1,43)	1:A:25:MET:N	1:A:25:MET:CA	1:A:25:MET:C	1:A:26:ILE:N	7	133.8
(1,43)	1:A:25:MET:N	1:A:25:MET:CA	1:A:25:MET:C	1:A:26:ILE:N	7	133.8
(1,43)	1:A:25:MET:N	1:A:25:MET:CA	1:A:25:MET:C	1:A:26:ILE:N	7	133.8
(1,155)	1:A:84:GLN:N	1:A:84:GLN:CA	1:A:84:GLN:C	1:A:85:GLU:N	3	133.8
(1,155)	1:A:84:GLN:N	1:A:84:GLN:CA	1:A:84:GLN:C	1:A:85:GLU:N	3	133.8
(1,155)	1:A:84:GLN:N	1:A:84:GLN:CA	1:A:84:GLN:C	1:A:85:GLU:N	3	133.8

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,81)	1:A:47:LYS:N	1:A:47:LYS:CA	1:A:47:LYS:C	1:A:48:LYS:N	5	133.7
(1,81)	1:A:47:LYS:N	1:A:47:LYS:CA	1:A:47:LYS:C	1:A:48:LYS:N	5	133.7
(1,81)	1:A:47:LYS:N	1:A:47:LYS:CA	1:A:47:LYS:C	1:A:48:LYS:N	5	133.7
(1,51)	1:A:29:LEU:N	1:A:29:LEU:CA	1:A:29:LEU:C	1:A:30:GLY:N	4	133.7
(1,51)	1:A:29:LEU:N	1:A:29:LEU:CA	1:A:29:LEU:C	1:A:30:GLY:N	4	133.7
(1,51)	1:A:29:LEU:N	1:A:29:LEU:CA	1:A:29:LEU:C	1:A:30:GLY:N	4	133.7
(1,33)	1:A:20:ASP:N	1:A:20:ASP:CA	1:A:20:ASP:C	1:A:21:GLU:N	3	133.7
(1,33)	1:A:20:ASP:N	1:A:20:ASP:CA	1:A:20:ASP:C	1:A:21:GLU:N	3	133.7
(1,33)	1:A:20:ASP:N	1:A:20:ASP:CA	1:A:20:ASP:C	1:A:21:GLU:N	3	133.7
(1,51)	1:A:29:LEU:N	1:A:29:LEU:CA	1:A:29:LEU:C	1:A:30:GLY:N	10	133.6
(1,51)	1:A:29:LEU:N	1:A:29:LEU:CA	1:A:29:LEU:C	1:A:30:GLY:N	10	133.6
(1,51)	1:A:29:LEU:N	1:A:29:LEU:CA	1:A:29:LEU:C	1:A:30:GLY:N	10	133.6
(1,167)	1:A:90:HIS:N	1:A:90:HIS:CA	1:A:90:HIS:C	1:A:91:SER:N	3	133.6
(1,167)	1:A:90:HIS:N	1:A:90:HIS:CA	1:A:90:HIS:C	1:A:91:SER:N	3	133.6
(1,167)	1:A:90:HIS:N	1:A:90:HIS:CA	1:A:90:HIS:C	1:A:91:SER:N	3	133.6
(1,155)	1:A:84:GLN:N	1:A:84:GLN:CA	1:A:84:GLN:C	1:A:85:GLU:N	6	133.6
(1,155)	1:A:84:GLN:N	1:A:84:GLN:CA	1:A:84:GLN:C	1:A:85:GLU:N	6	133.6
(1,155)	1:A:84:GLN:N	1:A:84:GLN:CA	1:A:84:GLN:C	1:A:85:GLU:N	6	133.6
(1,47)	1:A:27:GLU:N	1:A:27:GLU:CA	1:A:27:GLU:C	1:A:28:LYS:N	2	133.5
(1,47)	1:A:27:GLU:N	1:A:27:GLU:CA	1:A:27:GLU:C	1:A:28:LYS:N	2	133.5
(1,47)	1:A:27:GLU:N	1:A:27:GLU:CA	1:A:27:GLU:C	1:A:28:LYS:N	2	133.5
(1,39)	1:A:23:LYS:N	1:A:23:LYS:CA	1:A:23:LYS:C	1:A:24:ALA:N	2	133.5
(1,39)	1:A:23:LYS:N	1:A:23:LYS:CA	1:A:23:LYS:C	1:A:24:ALA:N	2	133.5
(1,39)	1:A:23:LYS:N	1:A:23:LYS:CA	1:A:23:LYS:C	1:A:24:ALA:N	2	133.5
(1,163)	1:A:88:SER:N	1:A:88:SER:CA	1:A:88:SER:C	1:A:89:ALA:N	8	133.5
(1,163)	1:A:88:SER:N	1:A:88:SER:CA	1:A:88:SER:C	1:A:89:ALA:N	8	133.5
(1,163)	1:A:88:SER:N	1:A:88:SER:CA	1:A:88:SER:C	1:A:89:ALA:N	8	133.5
(1,101)	1:A:57:MET:N	1:A:57:MET:CA	1:A:57:MET:C	1:A:58:GLU:N	3	133.5
(1,101)	1:A:57:MET:N	1:A:57:MET:CA	1:A:57:MET:C	1:A:58:GLU:N	3	133.5
(1,101)	1:A:57:MET:N	1:A:57:MET:CA	1:A:57:MET:C	1:A:58:GLU:N	3	133.5
(1,97)	1:A:55:LYS:N	1:A:55:LYS:CA	1:A:55:LYS:C	1:A:56:LYS:N	9	133.4
(1,97)	1:A:55:LYS:N	1:A:55:LYS:CA	1:A:55:LYS:C	1:A:56:LYS:N	9	133.4
(1,97)	1:A:55:LYS:N	1:A:55:LYS:CA	1:A:55:LYS:C	1:A:56:LYS:N	9	133.4
(1,91)	1:A:52:LYS:N	1:A:52:LYS:CA	1:A:52:LYS:C	1:A:53:MET:N	8	133.4
(1,91)	1:A:52:LYS:N	1:A:52:LYS:CA	1:A:52:LYS:C	1:A:53:MET:N	8	133.4
(1,91)	1:A:52:LYS:N	1:A:52:LYS:CA	1:A:52:LYS:C	1:A:53:MET:N	8	133.4
(1,35)	1:A:21:GLU:N	1:A:21:GLU:CA	1:A:21:GLU:C	1:A:22:ALA:N	3	133.4
(1,35)	1:A:21:GLU:N	1:A:21:GLU:CA	1:A:21:GLU:C	1:A:22:ALA:N	3	133.4
(1,35)	1:A:21:GLU:N	1:A:21:GLU:CA	1:A:21:GLU:C	1:A:22:ALA:N	3	133.4
(1,33)	1:A:20:ASP:N	1:A:20:ASP:CA	1:A:20:ASP:C	1:A:21:GLU:N	5	133.4
(1,33)	1:A:20:ASP:N	1:A:20:ASP:CA	1:A:20:ASP:C	1:A:21:GLU:N	5	133.4
(1,33)	1:A:20:ASP:N	1:A:20:ASP:CA	1:A:20:ASP:C	1:A:21:GLU:N	5	133.4
(1,167)	1:A:90:HIS:N	1:A:90:HIS:CA	1:A:90:HIS:C	1:A:91:SER:N	2	133.4
(1,167)	1:A:90:HIS:N	1:A:90:HIS:CA	1:A:90:HIS:C	1:A:91:SER:N	2	133.4
(1,167)	1:A:90:HIS:N	1:A:90:HIS:CA	1:A:90:HIS:C	1:A:91:SER:N	2	133.4
(1,145)	1:A:79:SER:N	1:A:79:SER:CA	1:A:79:SER:C	1:A:80:ALA:N	8	133.4
(1,145)	1:A:79:SER:N	1:A:79:SER:CA	1:A:79:SER:C	1:A:80:ALA:N	8	133.4
(1,145)	1:A:79:SER:N	1:A:79:SER:CA	1:A:79:SER:C	1:A:80:ALA:N	8	133.4
(1,59)	1:A:36:SER:N	1:A:36:SER:CA	1:A:36:SER:C	1:A:37:ALA:N	6	133.3
(1,59)	1:A:36:SER:N	1:A:36:SER:CA	1:A:36:SER:C	1:A:37:ALA:N	6	133.3
(1,59)	1:A:36:SER:N	1:A:36:SER:CA	1:A:36:SER:C	1:A:37:ALA:N	6	133.3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,35)	1:A:21:GLU:N	1:A:21:GLU:CA	1:A:21:GLU:C	1:A:22:ALA:N	8	133.3
(1,35)	1:A:21:GLU:N	1:A:21:GLU:CA	1:A:21:GLU:C	1:A:22:ALA:N	8	133.3
(1,35)	1:A:21:GLU:N	1:A:21:GLU:CA	1:A:21:GLU:C	1:A:22:ALA:N	8	133.3
(1,141)	1:A:77:SER:N	1:A:77:SER:CA	1:A:77:SER:C	1:A:78:ALA:N	4	133.3
(1,141)	1:A:77:SER:N	1:A:77:SER:CA	1:A:77:SER:C	1:A:78:ALA:N	4	133.3
(1,141)	1:A:77:SER:N	1:A:77:SER:CA	1:A:77:SER:C	1:A:78:ALA:N	4	133.3
(1,51)	1:A:29:LEU:N	1:A:29:LEU:CA	1:A:29:LEU:C	1:A:30:GLY:N	8	133.2
(1,51)	1:A:29:LEU:N	1:A:29:LEU:CA	1:A:29:LEU:C	1:A:30:GLY:N	8	133.2
(1,51)	1:A:29:LEU:N	1:A:29:LEU:CA	1:A:29:LEU:C	1:A:30:GLY:N	8	133.2
(1,165)	1:A:89:ALA:N	1:A:89:ALA:CA	1:A:89:ALA:C	1:A:90:HIS:N	8	133.2
(1,165)	1:A:89:ALA:N	1:A:89:ALA:CA	1:A:89:ALA:C	1:A:90:HIS:N	8	133.2
(1,165)	1:A:89:ALA:N	1:A:89:ALA:CA	1:A:89:ALA:C	1:A:90:HIS:N	8	133.2
(1,51)	1:A:29:LEU:N	1:A:29:LEU:CA	1:A:29:LEU:C	1:A:30:GLY:N	6	133.1
(1,51)	1:A:29:LEU:N	1:A:29:LEU:CA	1:A:29:LEU:C	1:A:30:GLY:N	6	133.1
(1,51)	1:A:29:LEU:N	1:A:29:LEU:CA	1:A:29:LEU:C	1:A:30:GLY:N	6	133.1
(1,159)	1:A:86:LEU:N	1:A:86:LEU:CA	1:A:86:LEU:C	1:A:87:LEU:N	6	133.1
(1,159)	1:A:86:LEU:N	1:A:86:LEU:CA	1:A:86:LEU:C	1:A:87:LEU:N	6	133.1
(1,159)	1:A:86:LEU:N	1:A:86:LEU:CA	1:A:86:LEU:C	1:A:87:LEU:N	6	133.1
(1,157)	1:A:85:GLU:N	1:A:85:GLU:CA	1:A:85:GLU:C	1:A:86:LEU:N	5	133.1
(1,157)	1:A:85:GLU:N	1:A:85:GLU:CA	1:A:85:GLU:C	1:A:86:LEU:N	5	133.1
(1,157)	1:A:85:GLU:N	1:A:85:GLU:CA	1:A:85:GLU:C	1:A:86:LEU:N	5	133.1
(1,157)	1:A:85:GLU:N	1:A:85:GLU:CA	1:A:85:GLU:C	1:A:86:LEU:N	6	133.1
(1,157)	1:A:85:GLU:N	1:A:85:GLU:CA	1:A:85:GLU:C	1:A:86:LEU:N	6	133.1
(1,157)	1:A:85:GLU:N	1:A:85:GLU:CA	1:A:85:GLU:C	1:A:86:LEU:N	6	133.1
(1,157)	1:A:85:GLU:N	1:A:85:GLU:CA	1:A:85:GLU:C	1:A:86:LEU:N	6	133.1
(1,133)	1:A:73:LEU:N	1:A:73:LEU:CA	1:A:73:LEU:C	1:A:74:GLN:N	1	133.1
(1,133)	1:A:73:LEU:N	1:A:73:LEU:CA	1:A:73:LEU:C	1:A:74:GLN:N	1	133.1
(1,133)	1:A:73:LEU:N	1:A:73:LEU:CA	1:A:73:LEU:C	1:A:74:GLN:N	1	133.1
(1,131)	1:A:72:PHE:N	1:A:72:PHE:CA	1:A:72:PHE:C	1:A:73:LEU:N	8	133.1
(1,131)	1:A:72:PHE:N	1:A:72:PHE:CA	1:A:72:PHE:C	1:A:73:LEU:N	8	133.1
(1,131)	1:A:72:PHE:N	1:A:72:PHE:CA	1:A:72:PHE:C	1:A:73:LEU:N	8	133.1
(1,63)	1:A:38:ASN:N	1:A:38:ASN:CA	1:A:38:ASN:C	1:A:39:LYS:N	1	133.0
(1,63)	1:A:38:ASN:N	1:A:38:ASN:CA	1:A:38:ASN:C	1:A:39:LYS:N	1	133.0
(1,63)	1:A:38:ASN:N	1:A:38:ASN:CA	1:A:38:ASN:C	1:A:39:LYS:N	1	133.0
(1,63)	1:A:38:ASN:N	1:A:38:ASN:CA	1:A:38:ASN:C	1:A:39:LYS:N	3	133.0
(1,63)	1:A:38:ASN:N	1:A:38:ASN:CA	1:A:38:ASN:C	1:A:39:LYS:N	3	133.0
(1,63)	1:A:38:ASN:N	1:A:38:ASN:CA	1:A:38:ASN:C	1:A:39:LYS:N	3	133.0
(1,41)	1:A:24:ALA:N	1:A:24:ALA:CA	1:A:24:ALA:C	1:A:25:MET:N	5	133.0
(1,41)	1:A:24:ALA:N	1:A:24:ALA:CA	1:A:24:ALA:C	1:A:25:MET:N	5	133.0
(1,41)	1:A:24:ALA:N	1:A:24:ALA:CA	1:A:24:ALA:C	1:A:25:MET:N	5	133.0
(1,159)	1:A:86:LEU:N	1:A:86:LEU:CA	1:A:86:LEU:C	1:A:87:LEU:N	5	133.0
(1,159)	1:A:86:LEU:N	1:A:86:LEU:CA	1:A:86:LEU:C	1:A:87:LEU:N	5	133.0
(1,159)	1:A:86:LEU:N	1:A:86:LEU:CA	1:A:86:LEU:C	1:A:87:LEU:N	5	133.0
(1,155)	1:A:84:GLN:N	1:A:84:GLN:CA	1:A:84:GLN:C	1:A:85:GLU:N	2	133.0
(1,155)	1:A:84:GLN:N	1:A:84:GLN:CA	1:A:84:GLN:C	1:A:85:GLU:N	2	133.0
(1,155)	1:A:84:GLN:N	1:A:84:GLN:CA	1:A:84:GLN:C	1:A:85:GLU:N	2	133.0
(1,131)	1:A:72:PHE:N	1:A:72:PHE:CA	1:A:72:PHE:C	1:A:73:LEU:N	4	133.0
(1,131)	1:A:72:PHE:N	1:A:72:PHE:CA	1:A:72:PHE:C	1:A:73:LEU:N	4	133.0
(1,131)	1:A:72:PHE:N	1:A:72:PHE:CA	1:A:72:PHE:C	1:A:73:LEU:N	4	133.0
(1,87)	1:A:50:VAL:N	1:A:50:VAL:CA	1:A:50:VAL:C	1:A:51:GLU:N	3	132.9
(1,87)	1:A:50:VAL:N	1:A:50:VAL:CA	1:A:50:VAL:C	1:A:51:GLU:N	3	132.9
(1,87)	1:A:50:VAL:N	1:A:50:VAL:CA	1:A:50:VAL:C	1:A:51:GLU:N	3	132.9

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,87)	1:A:50:VAL:N	1:A:50:VAL:CA	1:A:50:VAL:C	1:A:51:GLU:N	8	132.9
(1,87)	1:A:50:VAL:N	1:A:50:VAL:CA	1:A:50:VAL:C	1:A:51:GLU:N	8	132.9
(1,87)	1:A:50:VAL:N	1:A:50:VAL:CA	1:A:50:VAL:C	1:A:51:GLU:N	8	132.9
(1,51)	1:A:29:LEU:N	1:A:29:LEU:CA	1:A:29:LEU:C	1:A:30:GLY:N	1	132.9
(1,51)	1:A:29:LEU:N	1:A:29:LEU:CA	1:A:29:LEU:C	1:A:30:GLY:N	1	132.9
(1,51)	1:A:29:LEU:N	1:A:29:LEU:CA	1:A:29:LEU:C	1:A:30:GLY:N	1	132.9
(1,43)	1:A:25:MET:N	1:A:25:MET:CA	1:A:25:MET:C	1:A:26:ILE:N	6	132.9
(1,43)	1:A:25:MET:N	1:A:25:MET:CA	1:A:25:MET:C	1:A:26:ILE:N	6	132.9
(1,43)	1:A:25:MET:N	1:A:25:MET:CA	1:A:25:MET:C	1:A:26:ILE:N	6	132.9
(1,19)	1:A:12:LEU:N	1:A:12:LEU:CA	1:A:12:LEU:C	1:A:13:GLY:N	2	132.9
(1,19)	1:A:12:LEU:N	1:A:12:LEU:CA	1:A:12:LEU:C	1:A:13:GLY:N	2	132.9
(1,19)	1:A:12:LEU:N	1:A:12:LEU:CA	1:A:12:LEU:C	1:A:13:GLY:N	2	132.9
(1,19)	1:A:12:LEU:N	1:A:12:LEU:CA	1:A:12:LEU:C	1:A:13:GLY:N	7	132.9
(1,19)	1:A:12:LEU:N	1:A:12:LEU:CA	1:A:12:LEU:C	1:A:13:GLY:N	7	132.9
(1,19)	1:A:12:LEU:N	1:A:12:LEU:CA	1:A:12:LEU:C	1:A:13:GLY:N	7	132.9
(1,159)	1:A:86:LEU:N	1:A:86:LEU:CA	1:A:86:LEU:C	1:A:87:LEU:N	2	132.9
(1,159)	1:A:86:LEU:N	1:A:86:LEU:CA	1:A:86:LEU:C	1:A:87:LEU:N	2	132.9
(1,159)	1:A:86:LEU:N	1:A:86:LEU:CA	1:A:86:LEU:C	1:A:87:LEU:N	2	132.9
(1,133)	1:A:73:LEU:N	1:A:73:LEU:CA	1:A:73:LEU:C	1:A:74:GLN:N	3	132.9
(1,133)	1:A:73:LEU:N	1:A:73:LEU:CA	1:A:73:LEU:C	1:A:74:GLN:N	3	132.9
(1,133)	1:A:73:LEU:N	1:A:73:LEU:CA	1:A:73:LEU:C	1:A:74:GLN:N	3	132.9
(1,133)	1:A:73:LEU:N	1:A:73:LEU:CA	1:A:73:LEU:C	1:A:74:GLN:N	7	132.9
(1,133)	1:A:73:LEU:N	1:A:73:LEU:CA	1:A:73:LEU:C	1:A:74:GLN:N	7	132.9
(1,133)	1:A:73:LEU:N	1:A:73:LEU:CA	1:A:73:LEU:C	1:A:74:GLN:N	7	132.9
(1,133)	1:A:73:LEU:N	1:A:73:LEU:CA	1:A:73:LEU:C	1:A:74:GLN:N	7	132.9
(1,131)	1:A:72:PHE:N	1:A:72:PHE:CA	1:A:72:PHE:C	1:A:73:LEU:N	5	132.9
(1,131)	1:A:72:PHE:N	1:A:72:PHE:CA	1:A:72:PHE:C	1:A:73:LEU:N	5	132.9
(1,131)	1:A:72:PHE:N	1:A:72:PHE:CA	1:A:72:PHE:C	1:A:73:LEU:N	5	132.9
(1,105)	1:A:59:GLU:N	1:A:59:GLU:CA	1:A:59:GLU:C	1:A:60:VAL:N	9	132.9
(1,105)	1:A:59:GLU:N	1:A:59:GLU:CA	1:A:59:GLU:C	1:A:60:VAL:N	9	132.9
(1,105)	1:A:59:GLU:N	1:A:59:GLU:CA	1:A:59:GLU:C	1:A:60:VAL:N	9	132.9
(1,81)	1:A:47:LYS:N	1:A:47:LYS:CA	1:A:47:LYS:C	1:A:48:LYS:N	6	132.8
(1,81)	1:A:47:LYS:N	1:A:47:LYS:CA	1:A:47:LYS:C	1:A:48:LYS:N	6	132.8
(1,81)	1:A:47:LYS:N	1:A:47:LYS:CA	1:A:47:LYS:C	1:A:48:LYS:N	6	132.8
(1,39)	1:A:23:LYS:N	1:A:23:LYS:CA	1:A:23:LYS:C	1:A:24:ALA:N	5	132.8
(1,39)	1:A:23:LYS:N	1:A:23:LYS:CA	1:A:23:LYS:C	1:A:24:ALA:N	5	132.8
(1,39)	1:A:23:LYS:N	1:A:23:LYS:CA	1:A:23:LYS:C	1:A:24:ALA:N	5	132.8
(1,133)	1:A:73:LEU:N	1:A:73:LEU:CA	1:A:73:LEU:C	1:A:74:GLN:N	9	132.8
(1,133)	1:A:73:LEU:N	1:A:73:LEU:CA	1:A:73:LEU:C	1:A:74:GLN:N	9	132.8
(1,133)	1:A:73:LEU:N	1:A:73:LEU:CA	1:A:73:LEU:C	1:A:74:GLN:N	9	132.8
(1,133)	1:A:73:LEU:N	1:A:73:LEU:CA	1:A:73:LEU:C	1:A:74:GLN:N	2	132.7
(1,133)	1:A:73:LEU:N	1:A:73:LEU:CA	1:A:73:LEU:C	1:A:74:GLN:N	2	132.7
(1,133)	1:A:73:LEU:N	1:A:73:LEU:CA	1:A:73:LEU:C	1:A:74:GLN:N	2	132.7
(1,87)	1:A:50:VAL:N	1:A:50:VAL:CA	1:A:50:VAL:C	1:A:51:GLU:N	6	132.6
(1,87)	1:A:50:VAL:N	1:A:50:VAL:CA	1:A:50:VAL:C	1:A:51:GLU:N	6	132.6
(1,87)	1:A:50:VAL:N	1:A:50:VAL:CA	1:A:50:VAL:C	1:A:51:GLU:N	6	132.6
(1,87)	1:A:50:VAL:N	1:A:50:VAL:CA	1:A:50:VAL:C	1:A:51:GLU:N	7	132.6
(1,87)	1:A:50:VAL:N	1:A:50:VAL:CA	1:A:50:VAL:C	1:A:51:GLU:N	7	132.6
(1,87)	1:A:50:VAL:N	1:A:50:VAL:CA	1:A:50:VAL:C	1:A:51:GLU:N	7	132.6
(1,187)	1:A:101:HIS:N	1:A:101:HIS:CA	1:A:101:HIS:C	1:A:102:HIS:N	4	132.6
(1,187)	1:A:101:HIS:N	1:A:101:HIS:CA	1:A:101:HIS:C	1:A:102:HIS:N	4	132.6
(1,187)	1:A:101:HIS:N	1:A:101:HIS:CA	1:A:101:HIS:C	1:A:102:HIS:N	4	132.6

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,155)	1:A:84:GLN:N	1:A:84:GLN:CA	1:A:84:GLN:C	1:A:85:GLU:N	7	132.6
(1,155)	1:A:84:GLN:N	1:A:84:GLN:CA	1:A:84:GLN:C	1:A:85:GLU:N	7	132.6
(1,155)	1:A:84:GLN:N	1:A:84:GLN:CA	1:A:84:GLN:C	1:A:85:GLU:N	7	132.6
(1,153)	1:A:83:LEU:N	1:A:83:LEU:CA	1:A:83:LEU:C	1:A:84:GLN:N	3	132.6
(1,153)	1:A:83:LEU:N	1:A:83:LEU:CA	1:A:83:LEU:C	1:A:84:GLN:N	3	132.6
(1,153)	1:A:83:LEU:N	1:A:83:LEU:CA	1:A:83:LEU:C	1:A:84:GLN:N	3	132.6
(1,133)	1:A:73:LEU:N	1:A:73:LEU:CA	1:A:73:LEU:C	1:A:74:GLN:N	8	132.6
(1,133)	1:A:73:LEU:N	1:A:73:LEU:CA	1:A:73:LEU:C	1:A:74:GLN:N	8	132.6
(1,133)	1:A:73:LEU:N	1:A:73:LEU:CA	1:A:73:LEU:C	1:A:74:GLN:N	8	132.6
(1,91)	1:A:52:LYS:N	1:A:52:LYS:CA	1:A:52:LYS:C	1:A:53:MET:N	2	132.5
(1,91)	1:A:52:LYS:N	1:A:52:LYS:CA	1:A:52:LYS:C	1:A:53:MET:N	2	132.5
(1,91)	1:A:52:LYS:N	1:A:52:LYS:CA	1:A:52:LYS:C	1:A:53:MET:N	2	132.5
(1,25)	1:A:16:SER:N	1:A:16:SER:CA	1:A:16:SER:C	1:A:17:GLN:N	4	132.5
(1,25)	1:A:16:SER:N	1:A:16:SER:CA	1:A:16:SER:C	1:A:17:GLN:N	4	132.5
(1,25)	1:A:16:SER:N	1:A:16:SER:CA	1:A:16:SER:C	1:A:17:GLN:N	4	132.5
(1,153)	1:A:83:LEU:N	1:A:83:LEU:CA	1:A:83:LEU:C	1:A:84:GLN:N	8	132.5
(1,153)	1:A:83:LEU:N	1:A:83:LEU:CA	1:A:83:LEU:C	1:A:84:GLN:N	8	132.5
(1,153)	1:A:83:LEU:N	1:A:83:LEU:CA	1:A:83:LEU:C	1:A:84:GLN:N	8	132.5
(1,131)	1:A:72:PHE:N	1:A:72:PHE:CA	1:A:72:PHE:C	1:A:73:LEU:N	9	132.5
(1,131)	1:A:72:PHE:N	1:A:72:PHE:CA	1:A:72:PHE:C	1:A:73:LEU:N	9	132.5
(1,131)	1:A:72:PHE:N	1:A:72:PHE:CA	1:A:72:PHE:C	1:A:73:LEU:N	9	132.5
(1,99)	1:A:56:LYS:N	1:A:56:LYS:CA	1:A:56:LYS:C	1:A:57:MET:N	4	132.4
(1,99)	1:A:56:LYS:N	1:A:56:LYS:CA	1:A:56:LYS:C	1:A:57:MET:N	4	132.4
(1,99)	1:A:56:LYS:N	1:A:56:LYS:CA	1:A:56:LYS:C	1:A:57:MET:N	4	132.4
(1,99)	1:A:56:LYS:N	1:A:56:LYS:CA	1:A:56:LYS:C	1:A:57:MET:N	6	132.4
(1,99)	1:A:56:LYS:N	1:A:56:LYS:CA	1:A:56:LYS:C	1:A:57:MET:N	6	132.4
(1,99)	1:A:56:LYS:N	1:A:56:LYS:CA	1:A:56:LYS:C	1:A:57:MET:N	6	132.4
(1,91)	1:A:52:LYS:N	1:A:52:LYS:CA	1:A:52:LYS:C	1:A:53:MET:N	5	132.4
(1,91)	1:A:52:LYS:N	1:A:52:LYS:CA	1:A:52:LYS:C	1:A:53:MET:N	5	132.4
(1,91)	1:A:52:LYS:N	1:A:52:LYS:CA	1:A:52:LYS:C	1:A:53:MET:N	5	132.4
(1,25)	1:A:16:SER:N	1:A:16:SER:CA	1:A:16:SER:C	1:A:17:GLN:N	1	132.4
(1,25)	1:A:16:SER:N	1:A:16:SER:CA	1:A:16:SER:C	1:A:17:GLN:N	1	132.4
(1,25)	1:A:16:SER:N	1:A:16:SER:CA	1:A:16:SER:C	1:A:17:GLN:N	1	132.4
(1,131)	1:A:72:PHE:N	1:A:72:PHE:CA	1:A:72:PHE:C	1:A:73:LEU:N	1	132.4
(1,131)	1:A:72:PHE:N	1:A:72:PHE:CA	1:A:72:PHE:C	1:A:73:LEU:N	1	132.4
(1,131)	1:A:72:PHE:N	1:A:72:PHE:CA	1:A:72:PHE:C	1:A:73:LEU:N	1	132.4
(1,105)	1:A:59:GLU:N	1:A:59:GLU:CA	1:A:59:GLU:C	1:A:60:VAL:N	7	132.4
(1,105)	1:A:59:GLU:N	1:A:59:GLU:CA	1:A:59:GLU:C	1:A:60:VAL:N	7	132.4
(1,105)	1:A:59:GLU:N	1:A:59:GLU:CA	1:A:59:GLU:C	1:A:60:VAL:N	7	132.4
(1,19)	1:A:12:LEU:N	1:A:12:LEU:CA	1:A:12:LEU:C	1:A:13:GLY:N	9	132.3
(1,19)	1:A:12:LEU:N	1:A:12:LEU:CA	1:A:12:LEU:C	1:A:13:GLY:N	9	132.3
(1,19)	1:A:12:LEU:N	1:A:12:LEU:CA	1:A:12:LEU:C	1:A:13:GLY:N	9	132.3
(1,59)	1:A:36:SER:N	1:A:36:SER:CA	1:A:36:SER:C	1:A:37:ALA:N	2	132.2
(1,59)	1:A:36:SER:N	1:A:36:SER:CA	1:A:36:SER:C	1:A:37:ALA:N	2	132.2
(1,59)	1:A:36:SER:N	1:A:36:SER:CA	1:A:36:SER:C	1:A:37:ALA:N	2	132.2
(1,163)	1:A:88:SER:N	1:A:88:SER:CA	1:A:88:SER:C	1:A:89:ALA:N	4	132.2
(1,163)	1:A:88:SER:N	1:A:88:SER:CA	1:A:88:SER:C	1:A:89:ALA:N	4	132.2
(1,163)	1:A:88:SER:N	1:A:88:SER:CA	1:A:88:SER:C	1:A:89:ALA:N	4	132.2
(1,159)	1:A:86:LEU:N	1:A:86:LEU:CA	1:A:86:LEU:C	1:A:87:LEU:N	1	132.2
(1,159)	1:A:86:LEU:N	1:A:86:LEU:CA	1:A:86:LEU:C	1:A:87:LEU:N	1	132.2
(1,159)	1:A:86:LEU:N	1:A:86:LEU:CA	1:A:86:LEU:C	1:A:87:LEU:N	1	132.2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,153)	1:A:83:LEU:N	1:A:83:LEU:CA	1:A:83:LEU:C	1:A:84:GLN:N	7	132.2
(1,153)	1:A:83:LEU:N	1:A:83:LEU:CA	1:A:83:LEU:C	1:A:84:GLN:N	7	132.2
(1,153)	1:A:83:LEU:N	1:A:83:LEU:CA	1:A:83:LEU:C	1:A:84:GLN:N	7	132.2
(1,139)	1:A:76:VAL:N	1:A:76:VAL:CA	1:A:76:VAL:C	1:A:77:SER:N	5	132.2
(1,139)	1:A:76:VAL:N	1:A:76:VAL:CA	1:A:76:VAL:C	1:A:77:SER:N	5	132.2
(1,139)	1:A:76:VAL:N	1:A:76:VAL:CA	1:A:76:VAL:C	1:A:77:SER:N	5	132.2
(1,99)	1:A:56:LYS:N	1:A:56:LYS:CA	1:A:56:LYS:C	1:A:57:MET:N	9	132.1
(1,99)	1:A:56:LYS:N	1:A:56:LYS:CA	1:A:56:LYS:C	1:A:57:MET:N	9	132.1
(1,99)	1:A:56:LYS:N	1:A:56:LYS:CA	1:A:56:LYS:C	1:A:57:MET:N	9	132.1
(1,91)	1:A:52:LYS:N	1:A:52:LYS:CA	1:A:52:LYS:C	1:A:53:MET:N	3	132.1
(1,91)	1:A:52:LYS:N	1:A:52:LYS:CA	1:A:52:LYS:C	1:A:53:MET:N	3	132.1
(1,91)	1:A:52:LYS:N	1:A:52:LYS:CA	1:A:52:LYS:C	1:A:53:MET:N	3	132.1
(1,85)	1:A:49:GLU:N	1:A:49:GLU:CA	1:A:49:GLU:C	1:A:50:VAL:N	6	132.1
(1,85)	1:A:49:GLU:N	1:A:49:GLU:CA	1:A:49:GLU:C	1:A:50:VAL:N	6	132.1
(1,85)	1:A:49:GLU:N	1:A:49:GLU:CA	1:A:49:GLU:C	1:A:50:VAL:N	6	132.1
(1,83)	1:A:48:LYS:N	1:A:48:LYS:CA	1:A:48:LYS:C	1:A:49:GLU:N	7	132.1
(1,83)	1:A:48:LYS:N	1:A:48:LYS:CA	1:A:48:LYS:C	1:A:49:GLU:N	7	132.1
(1,83)	1:A:48:LYS:N	1:A:48:LYS:CA	1:A:48:LYS:C	1:A:49:GLU:N	7	132.1
(1,39)	1:A:23:LYS:N	1:A:23:LYS:CA	1:A:23:LYS:C	1:A:24:ALA:N	3	132.1
(1,39)	1:A:23:LYS:N	1:A:23:LYS:CA	1:A:23:LYS:C	1:A:24:ALA:N	3	132.1
(1,39)	1:A:23:LYS:N	1:A:23:LYS:CA	1:A:23:LYS:C	1:A:24:ALA:N	3	132.1
(1,159)	1:A:86:LEU:N	1:A:86:LEU:CA	1:A:86:LEU:C	1:A:87:LEU:N	8	132.1
(1,159)	1:A:86:LEU:N	1:A:86:LEU:CA	1:A:86:LEU:C	1:A:87:LEU:N	8	132.1
(1,159)	1:A:86:LEU:N	1:A:86:LEU:CA	1:A:86:LEU:C	1:A:87:LEU:N	8	132.1
(1,153)	1:A:83:LEU:N	1:A:83:LEU:CA	1:A:83:LEU:C	1:A:84:GLN:N	10	132.1
(1,153)	1:A:83:LEU:N	1:A:83:LEU:CA	1:A:83:LEU:C	1:A:84:GLN:N	10	132.1
(1,153)	1:A:83:LEU:N	1:A:83:LEU:CA	1:A:83:LEU:C	1:A:84:GLN:N	10	132.1
(1,131)	1:A:72:PHE:N	1:A:72:PHE:CA	1:A:72:PHE:C	1:A:73:LEU:N	3	132.1
(1,131)	1:A:72:PHE:N	1:A:72:PHE:CA	1:A:72:PHE:C	1:A:73:LEU:N	3	132.1
(1,131)	1:A:72:PHE:N	1:A:72:PHE:CA	1:A:72:PHE:C	1:A:73:LEU:N	3	132.1
(1,59)	1:A:36:SER:N	1:A:36:SER:CA	1:A:36:SER:C	1:A:37:ALA:N	5	132.0
(1,59)	1:A:36:SER:N	1:A:36:SER:CA	1:A:36:SER:C	1:A:37:ALA:N	5	132.0
(1,59)	1:A:36:SER:N	1:A:36:SER:CA	1:A:36:SER:C	1:A:37:ALA:N	5	132.0
(1,39)	1:A:23:LYS:N	1:A:23:LYS:CA	1:A:23:LYS:C	1:A:24:ALA:N	9	132.0
(1,39)	1:A:23:LYS:N	1:A:23:LYS:CA	1:A:23:LYS:C	1:A:24:ALA:N	9	132.0
(1,39)	1:A:23:LYS:N	1:A:23:LYS:CA	1:A:23:LYS:C	1:A:24:ALA:N	9	132.0
(1,163)	1:A:88:SER:N	1:A:88:SER:CA	1:A:88:SER:C	1:A:89:ALA:N	3	132.0
(1,163)	1:A:88:SER:N	1:A:88:SER:CA	1:A:88:SER:C	1:A:89:ALA:N	3	132.0
(1,163)	1:A:88:SER:N	1:A:88:SER:CA	1:A:88:SER:C	1:A:89:ALA:N	3	132.0
(1,153)	1:A:83:LEU:N	1:A:83:LEU:CA	1:A:83:LEU:C	1:A:84:GLN:N	5	132.0
(1,153)	1:A:83:LEU:N	1:A:83:LEU:CA	1:A:83:LEU:C	1:A:84:GLN:N	5	132.0
(1,153)	1:A:83:LEU:N	1:A:83:LEU:CA	1:A:83:LEU:C	1:A:84:GLN:N	5	132.0
(1,83)	1:A:48:LYS:N	1:A:48:LYS:CA	1:A:48:LYS:C	1:A:49:GLU:N	2	131.9
(1,83)	1:A:48:LYS:N	1:A:48:LYS:CA	1:A:48:LYS:C	1:A:49:GLU:N	2	131.9
(1,83)	1:A:48:LYS:N	1:A:48:LYS:CA	1:A:48:LYS:C	1:A:49:GLU:N	2	131.9
(1,19)	1:A:12:LEU:N	1:A:12:LEU:CA	1:A:12:LEU:C	1:A:13:GLY:N	5	131.9
(1,19)	1:A:12:LEU:N	1:A:12:LEU:CA	1:A:12:LEU:C	1:A:13:GLY:N	5	131.9
(1,19)	1:A:12:LEU:N	1:A:12:LEU:CA	1:A:12:LEU:C	1:A:13:GLY:N	5	131.9
(1,155)	1:A:84:GLN:N	1:A:84:GLN:CA	1:A:84:GLN:C	1:A:85:GLU:N	4	131.9
(1,155)	1:A:84:GLN:N	1:A:84:GLN:CA	1:A:84:GLN:C	1:A:85:GLU:N	4	131.9
(1,155)	1:A:84:GLN:N	1:A:84:GLN:CA	1:A:84:GLN:C	1:A:85:GLU:N	4	131.9

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,133)	1:A:73:LEU:N	1:A:73:LEU:CA	1:A:73:LEU:C	1:A:74:GLN:N	6	131.9
(1,133)	1:A:73:LEU:N	1:A:73:LEU:CA	1:A:73:LEU:C	1:A:74:GLN:N	6	131.9
(1,133)	1:A:73:LEU:N	1:A:73:LEU:CA	1:A:73:LEU:C	1:A:74:GLN:N	6	131.9
(1,87)	1:A:50:VAL:N	1:A:50:VAL:CA	1:A:50:VAL:C	1:A:51:GLU:N	2	131.8
(1,87)	1:A:50:VAL:N	1:A:50:VAL:CA	1:A:50:VAL:C	1:A:51:GLU:N	2	131.8
(1,87)	1:A:50:VAL:N	1:A:50:VAL:CA	1:A:50:VAL:C	1:A:51:GLU:N	2	131.8
(1,87)	1:A:50:VAL:N	1:A:50:VAL:CA	1:A:50:VAL:C	1:A:51:GLU:N	4	131.8
(1,87)	1:A:50:VAL:N	1:A:50:VAL:CA	1:A:50:VAL:C	1:A:51:GLU:N	4	131.8
(1,87)	1:A:50:VAL:N	1:A:50:VAL:CA	1:A:50:VAL:C	1:A:51:GLU:N	4	131.8
(1,49)	1:A:28:LYS:N	1:A:28:LYS:CA	1:A:28:LYS:C	1:A:29:LEU:N	3	131.8
(1,49)	1:A:28:LYS:N	1:A:28:LYS:CA	1:A:28:LYS:C	1:A:29:LEU:N	3	131.8
(1,49)	1:A:28:LYS:N	1:A:28:LYS:CA	1:A:28:LYS:C	1:A:29:LEU:N	3	131.8
(1,127)	1:A:70:GLU:N	1:A:70:GLU:CA	1:A:70:GLU:C	1:A:71:ASP:N	6	131.8
(1,127)	1:A:70:GLU:N	1:A:70:GLU:CA	1:A:70:GLU:C	1:A:71:ASP:N	6	131.8
(1,127)	1:A:70:GLU:N	1:A:70:GLU:CA	1:A:70:GLU:C	1:A:71:ASP:N	6	131.8
(1,87)	1:A:50:VAL:N	1:A:50:VAL:CA	1:A:50:VAL:C	1:A:51:GLU:N	9	131.7
(1,87)	1:A:50:VAL:N	1:A:50:VAL:CA	1:A:50:VAL:C	1:A:51:GLU:N	9	131.7
(1,87)	1:A:50:VAL:N	1:A:50:VAL:CA	1:A:50:VAL:C	1:A:51:GLU:N	9	131.7
(1,25)	1:A:16:SER:N	1:A:16:SER:CA	1:A:16:SER:C	1:A:17:GLN:N	9	131.7
(1,25)	1:A:16:SER:N	1:A:16:SER:CA	1:A:16:SER:C	1:A:17:GLN:N	9	131.7
(1,25)	1:A:16:SER:N	1:A:16:SER:CA	1:A:16:SER:C	1:A:17:GLN:N	9	131.7
(1,19)	1:A:12:LEU:N	1:A:12:LEU:CA	1:A:12:LEU:C	1:A:13:GLY:N	8	131.7
(1,19)	1:A:12:LEU:N	1:A:12:LEU:CA	1:A:12:LEU:C	1:A:13:GLY:N	8	131.7
(1,19)	1:A:12:LEU:N	1:A:12:LEU:CA	1:A:12:LEU:C	1:A:13:GLY:N	8	131.7
(1,153)	1:A:83:LEU:N	1:A:83:LEU:CA	1:A:83:LEU:C	1:A:84:GLN:N	4	131.7
(1,153)	1:A:83:LEU:N	1:A:83:LEU:CA	1:A:83:LEU:C	1:A:84:GLN:N	4	131.7
(1,153)	1:A:83:LEU:N	1:A:83:LEU:CA	1:A:83:LEU:C	1:A:84:GLN:N	4	131.7
(1,105)	1:A:59:GLU:N	1:A:59:GLU:CA	1:A:59:GLU:C	1:A:60:VAL:N	2	131.7
(1,105)	1:A:59:GLU:N	1:A:59:GLU:CA	1:A:59:GLU:C	1:A:60:VAL:N	2	131.7
(1,105)	1:A:59:GLU:N	1:A:59:GLU:CA	1:A:59:GLU:C	1:A:60:VAL:N	2	131.7
(1,45)	1:A:26:ILE:N	1:A:26:ILE:CA	1:A:26:ILE:C	1:A:27:GLU:N	4	131.6
(1,45)	1:A:26:ILE:N	1:A:26:ILE:CA	1:A:26:ILE:C	1:A:27:GLU:N	4	131.6
(1,45)	1:A:26:ILE:N	1:A:26:ILE:CA	1:A:26:ILE:C	1:A:27:GLU:N	4	131.6
(1,39)	1:A:23:LYS:N	1:A:23:LYS:CA	1:A:23:LYS:C	1:A:24:ALA:N	6	131.6
(1,39)	1:A:23:LYS:N	1:A:23:LYS:CA	1:A:23:LYS:C	1:A:24:ALA:N	6	131.6
(1,39)	1:A:23:LYS:N	1:A:23:LYS:CA	1:A:23:LYS:C	1:A:24:ALA:N	6	131.6
(1,141)	1:A:77:SER:N	1:A:77:SER:CA	1:A:77:SER:C	1:A:78:ALA:N	7	131.6
(1,141)	1:A:77:SER:N	1:A:77:SER:CA	1:A:77:SER:C	1:A:78:ALA:N	7	131.6
(1,141)	1:A:77:SER:N	1:A:77:SER:CA	1:A:77:SER:C	1:A:78:ALA:N	7	131.6
(1,133)	1:A:73:LEU:N	1:A:73:LEU:CA	1:A:73:LEU:C	1:A:74:GLN:N	5	131.6
(1,133)	1:A:73:LEU:N	1:A:73:LEU:CA	1:A:73:LEU:C	1:A:74:GLN:N	5	131.6
(1,133)	1:A:73:LEU:N	1:A:73:LEU:CA	1:A:73:LEU:C	1:A:74:GLN:N	5	131.6
(1,83)	1:A:48:LYS:N	1:A:48:LYS:CA	1:A:48:LYS:C	1:A:49:GLU:N	10	131.5
(1,83)	1:A:48:LYS:N	1:A:48:LYS:CA	1:A:48:LYS:C	1:A:49:GLU:N	10	131.5
(1,83)	1:A:48:LYS:N	1:A:48:LYS:CA	1:A:48:LYS:C	1:A:49:GLU:N	10	131.5
(1,41)	1:A:24:ALA:N	1:A:24:ALA:CA	1:A:24:ALA:C	1:A:25:MET:N	10	131.5
(1,41)	1:A:24:ALA:N	1:A:24:ALA:CA	1:A:24:ALA:C	1:A:25:MET:N	10	131.5
(1,41)	1:A:24:ALA:N	1:A:24:ALA:CA	1:A:24:ALA:C	1:A:25:MET:N	10	131.5
(1,187)	1:A:101:HIS:N	1:A:101:HIS:CA	1:A:101:HIS:C	1:A:102:HIS:N	6	131.5
(1,187)	1:A:101:HIS:N	1:A:101:HIS:CA	1:A:101:HIS:C	1:A:102:HIS:N	6	131.5
(1,187)	1:A:101:HIS:N	1:A:101:HIS:CA	1:A:101:HIS:C	1:A:102:HIS:N	6	131.5

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,153)	1:A:83:LEU:N	1:A:83:LEU:CA	1:A:83:LEU:C	1:A:84:GLN:N	9	131.5
(1,153)	1:A:83:LEU:N	1:A:83:LEU:CA	1:A:83:LEU:C	1:A:84:GLN:N	9	131.5
(1,153)	1:A:83:LEU:N	1:A:83:LEU:CA	1:A:83:LEU:C	1:A:84:GLN:N	9	131.5
(1,85)	1:A:49:GLU:N	1:A:49:GLU:CA	1:A:49:GLU:C	1:A:50:VAL:N	7	131.4
(1,85)	1:A:49:GLU:N	1:A:49:GLU:CA	1:A:49:GLU:C	1:A:50:VAL:N	7	131.4
(1,85)	1:A:49:GLU:N	1:A:49:GLU:CA	1:A:49:GLU:C	1:A:50:VAL:N	7	131.4
(1,85)	1:A:49:GLU:N	1:A:49:GLU:CA	1:A:49:GLU:C	1:A:50:VAL:N	10	131.4
(1,85)	1:A:49:GLU:N	1:A:49:GLU:CA	1:A:49:GLU:C	1:A:50:VAL:N	10	131.4
(1,85)	1:A:49:GLU:N	1:A:49:GLU:CA	1:A:49:GLU:C	1:A:50:VAL:N	10	131.4
(1,83)	1:A:48:LYS:N	1:A:48:LYS:CA	1:A:48:LYS:C	1:A:49:GLU:N	5	131.4
(1,83)	1:A:48:LYS:N	1:A:48:LYS:CA	1:A:48:LYS:C	1:A:49:GLU:N	5	131.4
(1,83)	1:A:48:LYS:N	1:A:48:LYS:CA	1:A:48:LYS:C	1:A:49:GLU:N	5	131.4
(1,49)	1:A:28:LYS:N	1:A:28:LYS:CA	1:A:28:LYS:C	1:A:29:LEU:N	6	131.4
(1,49)	1:A:28:LYS:N	1:A:28:LYS:CA	1:A:28:LYS:C	1:A:29:LEU:N	6	131.4
(1,49)	1:A:28:LYS:N	1:A:28:LYS:CA	1:A:28:LYS:C	1:A:29:LEU:N	6	131.4
(1,33)	1:A:20:ASP:N	1:A:20:ASP:CA	1:A:20:ASP:C	1:A:21:GLU:N	10	131.4
(1,33)	1:A:20:ASP:N	1:A:20:ASP:CA	1:A:20:ASP:C	1:A:21:GLU:N	10	131.4
(1,33)	1:A:20:ASP:N	1:A:20:ASP:CA	1:A:20:ASP:C	1:A:21:GLU:N	10	131.4
(1,25)	1:A:16:SER:N	1:A:16:SER:CA	1:A:16:SER:C	1:A:17:GLN:N	10	131.4
(1,25)	1:A:16:SER:N	1:A:16:SER:CA	1:A:16:SER:C	1:A:17:GLN:N	10	131.4
(1,25)	1:A:16:SER:N	1:A:16:SER:CA	1:A:16:SER:C	1:A:17:GLN:N	10	131.4
(1,193)	1:A:104:HIS:N	1:A:104:HIS:CA	1:A:104:HIS:C	1:A:105:HIS:N	6	131.4
(1,193)	1:A:104:HIS:N	1:A:104:HIS:CA	1:A:104:HIS:C	1:A:105:HIS:N	6	131.4
(1,193)	1:A:104:HIS:N	1:A:104:HIS:CA	1:A:104:HIS:C	1:A:105:HIS:N	6	131.4
(1,89)	1:A:51:GLU:N	1:A:51:GLU:CA	1:A:51:GLU:C	1:A:52:LYS:N	3	131.3
(1,89)	1:A:51:GLU:N	1:A:51:GLU:CA	1:A:51:GLU:C	1:A:52:LYS:N	3	131.3
(1,89)	1:A:51:GLU:N	1:A:51:GLU:CA	1:A:51:GLU:C	1:A:52:LYS:N	3	131.3
(1,39)	1:A:23:LYS:N	1:A:23:LYS:CA	1:A:23:LYS:C	1:A:24:ALA:N	8	131.3
(1,39)	1:A:23:LYS:N	1:A:23:LYS:CA	1:A:23:LYS:C	1:A:24:ALA:N	8	131.3
(1,39)	1:A:23:LYS:N	1:A:23:LYS:CA	1:A:23:LYS:C	1:A:24:ALA:N	8	131.3
(1,195)	1:A:105:HIS:N	1:A:105:HIS:CA	1:A:105:HIS:C	1:A:106:HIS:N	9	131.3
(1,195)	1:A:105:HIS:N	1:A:105:HIS:CA	1:A:105:HIS:C	1:A:106:HIS:N	9	131.3
(1,195)	1:A:105:HIS:N	1:A:105:HIS:CA	1:A:105:HIS:C	1:A:106:HIS:N	9	131.3
(1,165)	1:A:89:ALA:N	1:A:89:ALA:CA	1:A:89:ALA:C	1:A:90:HIS:N	3	131.3
(1,165)	1:A:89:ALA:N	1:A:89:ALA:CA	1:A:89:ALA:C	1:A:90:HIS:N	3	131.3
(1,165)	1:A:89:ALA:N	1:A:89:ALA:CA	1:A:89:ALA:C	1:A:90:HIS:N	3	131.3
(1,153)	1:A:83:LEU:N	1:A:83:LEU:CA	1:A:83:LEU:C	1:A:84:GLN:N	1	131.3
(1,153)	1:A:83:LEU:N	1:A:83:LEU:CA	1:A:83:LEU:C	1:A:84:GLN:N	1	131.3
(1,153)	1:A:83:LEU:N	1:A:83:LEU:CA	1:A:83:LEU:C	1:A:84:GLN:N	1	131.3
(1,141)	1:A:77:SER:N	1:A:77:SER:CA	1:A:77:SER:C	1:A:78:ALA:N	1	131.3
(1,141)	1:A:77:SER:N	1:A:77:SER:CA	1:A:77:SER:C	1:A:78:ALA:N	1	131.3
(1,141)	1:A:77:SER:N	1:A:77:SER:CA	1:A:77:SER:C	1:A:78:ALA:N	1	131.3
(1,141)	1:A:77:SER:N	1:A:77:SER:CA	1:A:77:SER:C	1:A:78:ALA:N	3	131.3
(1,141)	1:A:77:SER:N	1:A:77:SER:CA	1:A:77:SER:C	1:A:78:ALA:N	3	131.3
(1,141)	1:A:77:SER:N	1:A:77:SER:CA	1:A:77:SER:C	1:A:78:ALA:N	3	131.3
(1,109)	1:A:61:LYS:N	1:A:61:LYS:CA	1:A:61:LYS:C	1:A:62:ALA:N	4	131.3
(1,109)	1:A:61:LYS:N	1:A:61:LYS:CA	1:A:61:LYS:C	1:A:62:ALA:N	4	131.3
(1,109)	1:A:61:LYS:N	1:A:61:LYS:CA	1:A:61:LYS:C	1:A:62:ALA:N	4	131.3
(1,97)	1:A:55:LYS:N	1:A:55:LYS:CA	1:A:55:LYS:C	1:A:56:LYS:N	7	131.2
(1,97)	1:A:55:LYS:N	1:A:55:LYS:CA	1:A:55:LYS:C	1:A:56:LYS:N	7	131.2
(1,97)	1:A:55:LYS:N	1:A:55:LYS:CA	1:A:55:LYS:C	1:A:56:LYS:N	7	131.2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,45)	1:A:26:ILE:N	1:A:26:ILE:CA	1:A:26:ILE:C	1:A:27:GLU:N	3	131.2
(1,45)	1:A:26:ILE:N	1:A:26:ILE:CA	1:A:26:ILE:C	1:A:27:GLU:N	3	131.2
(1,45)	1:A:26:ILE:N	1:A:26:ILE:CA	1:A:26:ILE:C	1:A:27:GLU:N	3	131.2
(1,39)	1:A:23:LYS:N	1:A:23:LYS:CA	1:A:23:LYS:C	1:A:24:ALA:N	7	131.2
(1,39)	1:A:23:LYS:N	1:A:23:LYS:CA	1:A:23:LYS:C	1:A:24:ALA:N	7	131.2
(1,39)	1:A:23:LYS:N	1:A:23:LYS:CA	1:A:23:LYS:C	1:A:24:ALA:N	7	131.2
(1,35)	1:A:21:GLU:N	1:A:21:GLU:CA	1:A:21:GLU:C	1:A:22:ALA:N	9	131.2
(1,35)	1:A:21:GLU:N	1:A:21:GLU:CA	1:A:21:GLU:C	1:A:22:ALA:N	9	131.2
(1,35)	1:A:21:GLU:N	1:A:21:GLU:CA	1:A:21:GLU:C	1:A:22:ALA:N	9	131.2
(1,25)	1:A:16:SER:N	1:A:16:SER:CA	1:A:16:SER:C	1:A:17:GLN:N	6	131.2
(1,25)	1:A:16:SER:N	1:A:16:SER:CA	1:A:16:SER:C	1:A:17:GLN:N	6	131.2
(1,25)	1:A:16:SER:N	1:A:16:SER:CA	1:A:16:SER:C	1:A:17:GLN:N	6	131.2
(1,145)	1:A:79:SER:N	1:A:79:SER:CA	1:A:79:SER:C	1:A:80:ALA:N	10	131.2
(1,145)	1:A:79:SER:N	1:A:79:SER:CA	1:A:79:SER:C	1:A:80:ALA:N	10	131.2
(1,145)	1:A:79:SER:N	1:A:79:SER:CA	1:A:79:SER:C	1:A:80:ALA:N	10	131.2
(1,127)	1:A:70:GLU:N	1:A:70:GLU:CA	1:A:70:GLU:C	1:A:71:ASP:N	3	131.2
(1,127)	1:A:70:GLU:N	1:A:70:GLU:CA	1:A:70:GLU:C	1:A:71:ASP:N	3	131.2
(1,127)	1:A:70:GLU:N	1:A:70:GLU:CA	1:A:70:GLU:C	1:A:71:ASP:N	3	131.2
(1,87)	1:A:50:VAL:N	1:A:50:VAL:CA	1:A:50:VAL:C	1:A:51:GLU:N	1	131.1
(1,87)	1:A:50:VAL:N	1:A:50:VAL:CA	1:A:50:VAL:C	1:A:51:GLU:N	1	131.1
(1,87)	1:A:50:VAL:N	1:A:50:VAL:CA	1:A:50:VAL:C	1:A:51:GLU:N	1	131.1
(1,83)	1:A:48:LYS:N	1:A:48:LYS:CA	1:A:48:LYS:C	1:A:49:GLU:N	9	131.1
(1,83)	1:A:48:LYS:N	1:A:48:LYS:CA	1:A:48:LYS:C	1:A:49:GLU:N	9	131.1
(1,83)	1:A:48:LYS:N	1:A:48:LYS:CA	1:A:48:LYS:C	1:A:49:GLU:N	9	131.1
(1,49)	1:A:28:LYS:N	1:A:28:LYS:CA	1:A:28:LYS:C	1:A:29:LEU:N	1	131.1
(1,49)	1:A:28:LYS:N	1:A:28:LYS:CA	1:A:28:LYS:C	1:A:29:LEU:N	1	131.1
(1,49)	1:A:28:LYS:N	1:A:28:LYS:CA	1:A:28:LYS:C	1:A:29:LEU:N	1	131.1
(1,49)	1:A:28:LYS:N	1:A:28:LYS:CA	1:A:28:LYS:C	1:A:29:LEU:N	4	131.1
(1,49)	1:A:28:LYS:N	1:A:28:LYS:CA	1:A:28:LYS:C	1:A:29:LEU:N	4	131.1
(1,49)	1:A:28:LYS:N	1:A:28:LYS:CA	1:A:28:LYS:C	1:A:29:LEU:N	4	131.1
(1,131)	1:A:72:PHE:N	1:A:72:PHE:CA	1:A:72:PHE:C	1:A:73:LEU:N	6	131.1
(1,131)	1:A:72:PHE:N	1:A:72:PHE:CA	1:A:72:PHE:C	1:A:73:LEU:N	6	131.1
(1,131)	1:A:72:PHE:N	1:A:72:PHE:CA	1:A:72:PHE:C	1:A:73:LEU:N	6	131.1
(1,45)	1:A:26:ILE:N	1:A:26:ILE:CA	1:A:26:ILE:C	1:A:27:GLU:N	1	131.0
(1,45)	1:A:26:ILE:N	1:A:26:ILE:CA	1:A:26:ILE:C	1:A:27:GLU:N	1	131.0
(1,45)	1:A:26:ILE:N	1:A:26:ILE:CA	1:A:26:ILE:C	1:A:27:GLU:N	1	131.0
(1,161)	1:A:87:LEU:N	1:A:87:LEU:CA	1:A:87:LEU:C	1:A:88:SER:N	9	131.0
(1,161)	1:A:87:LEU:N	1:A:87:LEU:CA	1:A:87:LEU:C	1:A:88:SER:N	9	131.0
(1,161)	1:A:87:LEU:N	1:A:87:LEU:CA	1:A:87:LEU:C	1:A:88:SER:N	9	131.0
(1,159)	1:A:86:LEU:N	1:A:86:LEU:CA	1:A:86:LEU:C	1:A:87:LEU:N	7	131.0
(1,159)	1:A:86:LEU:N	1:A:86:LEU:CA	1:A:86:LEU:C	1:A:87:LEU:N	7	131.0
(1,159)	1:A:86:LEU:N	1:A:86:LEU:CA	1:A:86:LEU:C	1:A:87:LEU:N	7	131.0
(1,105)	1:A:59:GLU:N	1:A:59:GLU:CA	1:A:59:GLU:C	1:A:60:VAL:N	4	131.0
(1,105)	1:A:59:GLU:N	1:A:59:GLU:CA	1:A:59:GLU:C	1:A:60:VAL:N	4	131.0
(1,105)	1:A:59:GLU:N	1:A:59:GLU:CA	1:A:59:GLU:C	1:A:60:VAL:N	4	131.0
(1,159)	1:A:86:LEU:N	1:A:86:LEU:CA	1:A:86:LEU:C	1:A:87:LEU:N	3	130.9
(1,159)	1:A:86:LEU:N	1:A:86:LEU:CA	1:A:86:LEU:C	1:A:87:LEU:N	3	130.9
(1,159)	1:A:86:LEU:N	1:A:86:LEU:CA	1:A:86:LEU:C	1:A:87:LEU:N	3	130.9
(1,141)	1:A:77:SER:N	1:A:77:SER:CA	1:A:77:SER:C	1:A:78:ALA:N	9	130.9
(1,141)	1:A:77:SER:N	1:A:77:SER:CA	1:A:77:SER:C	1:A:78:ALA:N	9	130.9
(1,141)	1:A:77:SER:N	1:A:77:SER:CA	1:A:77:SER:C	1:A:78:ALA:N	9	130.9

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,45)	1:A:26:ILE:N	1:A:26:ILE:CA	1:A:26:ILE:C	1:A:27:GLU:N	2	130.8
(1,45)	1:A:26:ILE:N	1:A:26:ILE:CA	1:A:26:ILE:C	1:A:27:GLU:N	2	130.8
(1,45)	1:A:26:ILE:N	1:A:26:ILE:CA	1:A:26:ILE:C	1:A:27:GLU:N	2	130.8
(1,45)	1:A:26:ILE:N	1:A:26:ILE:CA	1:A:26:ILE:C	1:A:27:GLU:N	7	130.8
(1,45)	1:A:26:ILE:N	1:A:26:ILE:CA	1:A:26:ILE:C	1:A:27:GLU:N	7	130.8
(1,45)	1:A:26:ILE:N	1:A:26:ILE:CA	1:A:26:ILE:C	1:A:27:GLU:N	7	130.8
(1,45)	1:A:26:ILE:N	1:A:26:ILE:CA	1:A:26:ILE:C	1:A:27:GLU:N	9	130.8
(1,45)	1:A:26:ILE:N	1:A:26:ILE:CA	1:A:26:ILE:C	1:A:27:GLU:N	9	130.8
(1,45)	1:A:26:ILE:N	1:A:26:ILE:CA	1:A:26:ILE:C	1:A:27:GLU:N	9	130.8
(1,25)	1:A:16:SER:N	1:A:16:SER:CA	1:A:16:SER:C	1:A:17:GLN:N	3	130.8
(1,25)	1:A:16:SER:N	1:A:16:SER:CA	1:A:16:SER:C	1:A:17:GLN:N	3	130.8
(1,25)	1:A:16:SER:N	1:A:16:SER:CA	1:A:16:SER:C	1:A:17:GLN:N	3	130.8
(1,159)	1:A:86:LEU:N	1:A:86:LEU:CA	1:A:86:LEU:C	1:A:87:LEU:N	4	130.8
(1,159)	1:A:86:LEU:N	1:A:86:LEU:CA	1:A:86:LEU:C	1:A:87:LEU:N	4	130.8
(1,159)	1:A:86:LEU:N	1:A:86:LEU:CA	1:A:86:LEU:C	1:A:87:LEU:N	4	130.8
(1,109)	1:A:61:LYS:N	1:A:61:LYS:CA	1:A:61:LYS:C	1:A:62:ALA:N	10	130.7
(1,109)	1:A:61:LYS:N	1:A:61:LYS:CA	1:A:61:LYS:C	1:A:62:ALA:N	10	130.7
(1,109)	1:A:61:LYS:N	1:A:61:LYS:CA	1:A:61:LYS:C	1:A:62:ALA:N	10	130.7
(1,91)	1:A:52:LYS:N	1:A:52:LYS:CA	1:A:52:LYS:C	1:A:53:MET:N	10	130.6
(1,91)	1:A:52:LYS:N	1:A:52:LYS:CA	1:A:52:LYS:C	1:A:53:MET:N	10	130.6
(1,91)	1:A:52:LYS:N	1:A:52:LYS:CA	1:A:52:LYS:C	1:A:53:MET:N	10	130.6
(1,63)	1:A:38:ASN:N	1:A:38:ASN:CA	1:A:38:ASN:C	1:A:39:LYS:N	9	130.6
(1,63)	1:A:38:ASN:N	1:A:38:ASN:CA	1:A:38:ASN:C	1:A:39:LYS:N	9	130.6
(1,63)	1:A:38:ASN:N	1:A:38:ASN:CA	1:A:38:ASN:C	1:A:39:LYS:N	9	130.6
(1,45)	1:A:26:ILE:N	1:A:26:ILE:CA	1:A:26:ILE:C	1:A:27:GLU:N	6	130.6
(1,45)	1:A:26:ILE:N	1:A:26:ILE:CA	1:A:26:ILE:C	1:A:27:GLU:N	6	130.6
(1,45)	1:A:26:ILE:N	1:A:26:ILE:CA	1:A:26:ILE:C	1:A:27:GLU:N	6	130.6
(1,41)	1:A:24:ALA:N	1:A:24:ALA:CA	1:A:24:ALA:C	1:A:25:MET:N	4	130.6
(1,41)	1:A:24:ALA:N	1:A:24:ALA:CA	1:A:24:ALA:C	1:A:25:MET:N	4	130.6
(1,41)	1:A:24:ALA:N	1:A:24:ALA:CA	1:A:24:ALA:C	1:A:25:MET:N	4	130.6
(1,153)	1:A:83:LEU:N	1:A:83:LEU:CA	1:A:83:LEU:C	1:A:84:GLN:N	2	130.6
(1,153)	1:A:83:LEU:N	1:A:83:LEU:CA	1:A:83:LEU:C	1:A:84:GLN:N	2	130.6
(1,153)	1:A:83:LEU:N	1:A:83:LEU:CA	1:A:83:LEU:C	1:A:84:GLN:N	2	130.6
(1,131)	1:A:72:PHE:N	1:A:72:PHE:CA	1:A:72:PHE:C	1:A:73:LEU:N	10	130.6
(1,131)	1:A:72:PHE:N	1:A:72:PHE:CA	1:A:72:PHE:C	1:A:73:LEU:N	10	130.6
(1,131)	1:A:72:PHE:N	1:A:72:PHE:CA	1:A:72:PHE:C	1:A:73:LEU:N	10	130.6
(1,109)	1:A:61:LYS:N	1:A:61:LYS:CA	1:A:61:LYS:C	1:A:62:ALA:N	7	130.6
(1,109)	1:A:61:LYS:N	1:A:61:LYS:CA	1:A:61:LYS:C	1:A:62:ALA:N	7	130.6
(1,109)	1:A:61:LYS:N	1:A:61:LYS:CA	1:A:61:LYS:C	1:A:62:ALA:N	7	130.6
(1,107)	1:A:60:VAL:N	1:A:60:VAL:CA	1:A:60:VAL:C	1:A:61:LYS:N	5	130.6
(1,107)	1:A:60:VAL:N	1:A:60:VAL:CA	1:A:60:VAL:C	1:A:61:LYS:N	5	130.6
(1,107)	1:A:60:VAL:N	1:A:60:VAL:CA	1:A:60:VAL:C	1:A:61:LYS:N	5	130.6
(1,45)	1:A:26:ILE:N	1:A:26:ILE:CA	1:A:26:ILE:C	1:A:27:GLU:N	5	130.5
(1,45)	1:A:26:ILE:N	1:A:26:ILE:CA	1:A:26:ILE:C	1:A:27:GLU:N	5	130.5
(1,45)	1:A:26:ILE:N	1:A:26:ILE:CA	1:A:26:ILE:C	1:A:27:GLU:N	5	130.5
(1,109)	1:A:61:LYS:N	1:A:61:LYS:CA	1:A:61:LYS:C	1:A:62:ALA:N	8	130.5
(1,109)	1:A:61:LYS:N	1:A:61:LYS:CA	1:A:61:LYS:C	1:A:62:ALA:N	8	130.5
(1,109)	1:A:61:LYS:N	1:A:61:LYS:CA	1:A:61:LYS:C	1:A:62:ALA:N	8	130.5
(1,41)	1:A:24:ALA:N	1:A:24:ALA:CA	1:A:24:ALA:C	1:A:25:MET:N	6	130.4
(1,41)	1:A:24:ALA:N	1:A:24:ALA:CA	1:A:24:ALA:C	1:A:25:MET:N	6	130.4
(1,41)	1:A:24:ALA:N	1:A:24:ALA:CA	1:A:24:ALA:C	1:A:25:MET:N	6	130.4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,25)	1:A:16:SER:N	1:A:16:SER:CA	1:A:16:SER:C	1:A:17:GLN:N	5	130.4
(1,25)	1:A:16:SER:N	1:A:16:SER:CA	1:A:16:SER:C	1:A:17:GLN:N	5	130.4
(1,25)	1:A:16:SER:N	1:A:16:SER:CA	1:A:16:SER:C	1:A:17:GLN:N	5	130.4
(1,25)	1:A:16:SER:N	1:A:16:SER:CA	1:A:16:SER:C	1:A:17:GLN:N	7	130.4
(1,25)	1:A:16:SER:N	1:A:16:SER:CA	1:A:16:SER:C	1:A:17:GLN:N	7	130.4
(1,25)	1:A:16:SER:N	1:A:16:SER:CA	1:A:16:SER:C	1:A:17:GLN:N	7	130.4
(1,107)	1:A:60:VAL:N	1:A:60:VAL:CA	1:A:60:VAL:C	1:A:61:LYS:N	9	130.4
(1,107)	1:A:60:VAL:N	1:A:60:VAL:CA	1:A:60:VAL:C	1:A:61:LYS:N	9	130.4
(1,107)	1:A:60:VAL:N	1:A:60:VAL:CA	1:A:60:VAL:C	1:A:61:LYS:N	9	130.4
(1,105)	1:A:59:GLU:N	1:A:59:GLU:CA	1:A:59:GLU:C	1:A:60:VAL:N	1	130.4
(1,105)	1:A:59:GLU:N	1:A:59:GLU:CA	1:A:59:GLU:C	1:A:60:VAL:N	1	130.4
(1,105)	1:A:59:GLU:N	1:A:59:GLU:CA	1:A:59:GLU:C	1:A:60:VAL:N	1	130.4
(1,45)	1:A:26:ILE:N	1:A:26:ILE:CA	1:A:26:ILE:C	1:A:27:GLU:N	8	130.3
(1,45)	1:A:26:ILE:N	1:A:26:ILE:CA	1:A:26:ILE:C	1:A:27:GLU:N	8	130.3
(1,45)	1:A:26:ILE:N	1:A:26:ILE:CA	1:A:26:ILE:C	1:A:27:GLU:N	8	130.3
(1,39)	1:A:23:LYS:N	1:A:23:LYS:CA	1:A:23:LYS:C	1:A:24:ALA:N	1	130.3
(1,39)	1:A:23:LYS:N	1:A:23:LYS:CA	1:A:23:LYS:C	1:A:24:ALA:N	1	130.3
(1,39)	1:A:23:LYS:N	1:A:23:LYS:CA	1:A:23:LYS:C	1:A:24:ALA:N	1	130.3
(1,141)	1:A:77:SER:N	1:A:77:SER:CA	1:A:77:SER:C	1:A:78:ALA:N	5	130.3
(1,141)	1:A:77:SER:N	1:A:77:SER:CA	1:A:77:SER:C	1:A:78:ALA:N	5	130.3
(1,141)	1:A:77:SER:N	1:A:77:SER:CA	1:A:77:SER:C	1:A:78:ALA:N	5	130.3
(1,107)	1:A:60:VAL:N	1:A:60:VAL:CA	1:A:60:VAL:C	1:A:61:LYS:N	1	130.3
(1,107)	1:A:60:VAL:N	1:A:60:VAL:CA	1:A:60:VAL:C	1:A:61:LYS:N	1	130.3
(1,107)	1:A:60:VAL:N	1:A:60:VAL:CA	1:A:60:VAL:C	1:A:61:LYS:N	1	130.3
(1,63)	1:A:38:ASN:N	1:A:38:ASN:CA	1:A:38:ASN:C	1:A:39:LYS:N	4	130.2
(1,63)	1:A:38:ASN:N	1:A:38:ASN:CA	1:A:38:ASN:C	1:A:39:LYS:N	4	130.2
(1,63)	1:A:38:ASN:N	1:A:38:ASN:CA	1:A:38:ASN:C	1:A:39:LYS:N	4	130.2
(1,49)	1:A:28:LYS:N	1:A:28:LYS:CA	1:A:28:LYS:C	1:A:29:LEU:N	7	130.2
(1,49)	1:A:28:LYS:N	1:A:28:LYS:CA	1:A:28:LYS:C	1:A:29:LEU:N	7	130.2
(1,49)	1:A:28:LYS:N	1:A:28:LYS:CA	1:A:28:LYS:C	1:A:29:LEU:N	7	130.2
(1,43)	1:A:25:MET:N	1:A:25:MET:CA	1:A:25:MET:C	1:A:26:ILE:N	8	130.2
(1,43)	1:A:25:MET:N	1:A:25:MET:CA	1:A:25:MET:C	1:A:26:ILE:N	8	130.2
(1,43)	1:A:25:MET:N	1:A:25:MET:CA	1:A:25:MET:C	1:A:26:ILE:N	8	130.2
(1,109)	1:A:61:LYS:N	1:A:61:LYS:CA	1:A:61:LYS:C	1:A:62:ALA:N	3	130.2
(1,109)	1:A:61:LYS:N	1:A:61:LYS:CA	1:A:61:LYS:C	1:A:62:ALA:N	3	130.2
(1,109)	1:A:61:LYS:N	1:A:61:LYS:CA	1:A:61:LYS:C	1:A:62:ALA:N	3	130.2
(1,49)	1:A:28:LYS:N	1:A:28:LYS:CA	1:A:28:LYS:C	1:A:29:LEU:N	2	130.1
(1,49)	1:A:28:LYS:N	1:A:28:LYS:CA	1:A:28:LYS:C	1:A:29:LEU:N	2	130.1
(1,49)	1:A:28:LYS:N	1:A:28:LYS:CA	1:A:28:LYS:C	1:A:29:LEU:N	2	130.1
(1,45)	1:A:26:ILE:N	1:A:26:ILE:CA	1:A:26:ILE:C	1:A:27:GLU:N	10	130.1
(1,45)	1:A:26:ILE:N	1:A:26:ILE:CA	1:A:26:ILE:C	1:A:27:GLU:N	10	130.1
(1,45)	1:A:26:ILE:N	1:A:26:ILE:CA	1:A:26:ILE:C	1:A:27:GLU:N	10	130.1
(1,155)	1:A:84:GLN:N	1:A:84:GLN:CA	1:A:84:GLN:C	1:A:85:GLU:N	8	130.1
(1,155)	1:A:84:GLN:N	1:A:84:GLN:CA	1:A:84:GLN:C	1:A:85:GLU:N	8	130.1
(1,155)	1:A:84:GLN:N	1:A:84:GLN:CA	1:A:84:GLN:C	1:A:85:GLU:N	8	130.1
(1,107)	1:A:60:VAL:N	1:A:60:VAL:CA	1:A:60:VAL:C	1:A:61:LYS:N	6	130.1
(1,107)	1:A:60:VAL:N	1:A:60:VAL:CA	1:A:60:VAL:C	1:A:61:LYS:N	6	130.1
(1,107)	1:A:60:VAL:N	1:A:60:VAL:CA	1:A:60:VAL:C	1:A:61:LYS:N	6	130.1
(1,35)	1:A:21:GLU:N	1:A:21:GLU:CA	1:A:21:GLU:C	1:A:22:ALA:N	5	130.0
(1,35)	1:A:21:GLU:N	1:A:21:GLU:CA	1:A:21:GLU:C	1:A:22:ALA:N	5	130.0
(1,35)	1:A:21:GLU:N	1:A:21:GLU:CA	1:A:21:GLU:C	1:A:22:ALA:N	5	130.0

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,105)	1:A:59:GLU:N	1:A:59:GLU:CA	1:A:59:GLU:C	1:A:60:VAL:N	5	130.0
(1,105)	1:A:59:GLU:N	1:A:59:GLU:CA	1:A:59:GLU:C	1:A:60:VAL:N	5	130.0
(1,105)	1:A:59:GLU:N	1:A:59:GLU:CA	1:A:59:GLU:C	1:A:60:VAL:N	5	130.0
(1,109)	1:A:61:LYS:N	1:A:61:LYS:CA	1:A:61:LYS:C	1:A:62:ALA:N	6	129.9
(1,109)	1:A:61:LYS:N	1:A:61:LYS:CA	1:A:61:LYS:C	1:A:62:ALA:N	6	129.9
(1,109)	1:A:61:LYS:N	1:A:61:LYS:CA	1:A:61:LYS:C	1:A:62:ALA:N	6	129.9
(1,107)	1:A:60:VAL:N	1:A:60:VAL:CA	1:A:60:VAL:C	1:A:61:LYS:N	2	129.9
(1,107)	1:A:60:VAL:N	1:A:60:VAL:CA	1:A:60:VAL:C	1:A:61:LYS:N	2	129.9
(1,107)	1:A:60:VAL:N	1:A:60:VAL:CA	1:A:60:VAL:C	1:A:61:LYS:N	2	129.9
(1,105)	1:A:59:GLU:N	1:A:59:GLU:CA	1:A:59:GLU:C	1:A:60:VAL:N	3	129.9
(1,105)	1:A:59:GLU:N	1:A:59:GLU:CA	1:A:59:GLU:C	1:A:60:VAL:N	3	129.9
(1,105)	1:A:59:GLU:N	1:A:59:GLU:CA	1:A:59:GLU:C	1:A:60:VAL:N	3	129.9
(1,35)	1:A:21:GLU:N	1:A:21:GLU:CA	1:A:21:GLU:C	1:A:22:ALA:N	1	129.8
(1,35)	1:A:21:GLU:N	1:A:21:GLU:CA	1:A:21:GLU:C	1:A:22:ALA:N	1	129.8
(1,35)	1:A:21:GLU:N	1:A:21:GLU:CA	1:A:21:GLU:C	1:A:22:ALA:N	1	129.8
(1,171)	1:A:92:LEU:N	1:A:92:LEU:CA	1:A:92:LEU:C	1:A:93:SER:N	5	129.6
(1,171)	1:A:92:LEU:N	1:A:92:LEU:CA	1:A:92:LEU:C	1:A:93:SER:N	5	129.6
(1,171)	1:A:92:LEU:N	1:A:92:LEU:CA	1:A:92:LEU:C	1:A:93:SER:N	5	129.6
(1,169)	1:A:91:SER:N	1:A:91:SER:CA	1:A:91:SER:C	1:A:92:LEU:N	5	129.6
(1,169)	1:A:91:SER:N	1:A:91:SER:CA	1:A:91:SER:C	1:A:92:LEU:N	5	129.6
(1,169)	1:A:91:SER:N	1:A:91:SER:CA	1:A:91:SER:C	1:A:92:LEU:N	5	129.6
(1,165)	1:A:89:ALA:N	1:A:89:ALA:CA	1:A:89:ALA:C	1:A:90:HIS:N	4	129.6
(1,165)	1:A:89:ALA:N	1:A:89:ALA:CA	1:A:89:ALA:C	1:A:90:HIS:N	4	129.6
(1,165)	1:A:89:ALA:N	1:A:89:ALA:CA	1:A:89:ALA:C	1:A:90:HIS:N	4	129.6
(1,105)	1:A:59:GLU:N	1:A:59:GLU:CA	1:A:59:GLU:C	1:A:60:VAL:N	8	129.5
(1,105)	1:A:59:GLU:N	1:A:59:GLU:CA	1:A:59:GLU:C	1:A:60:VAL:N	8	129.5
(1,105)	1:A:59:GLU:N	1:A:59:GLU:CA	1:A:59:GLU:C	1:A:60:VAL:N	8	129.5
(1,35)	1:A:21:GLU:N	1:A:21:GLU:CA	1:A:21:GLU:C	1:A:22:ALA:N	6	129.2
(1,35)	1:A:21:GLU:N	1:A:21:GLU:CA	1:A:21:GLU:C	1:A:22:ALA:N	6	129.2
(1,35)	1:A:21:GLU:N	1:A:21:GLU:CA	1:A:21:GLU:C	1:A:22:ALA:N	6	129.2
(1,109)	1:A:61:LYS:N	1:A:61:LYS:CA	1:A:61:LYS:C	1:A:62:ALA:N	5	129.2
(1,109)	1:A:61:LYS:N	1:A:61:LYS:CA	1:A:61:LYS:C	1:A:62:ALA:N	5	129.2
(1,109)	1:A:61:LYS:N	1:A:61:LYS:CA	1:A:61:LYS:C	1:A:62:ALA:N	5	129.2
(1,105)	1:A:59:GLU:N	1:A:59:GLU:CA	1:A:59:GLU:C	1:A:60:VAL:N	10	129.2
(1,105)	1:A:59:GLU:N	1:A:59:GLU:CA	1:A:59:GLU:C	1:A:60:VAL:N	10	129.2
(1,105)	1:A:59:GLU:N	1:A:59:GLU:CA	1:A:59:GLU:C	1:A:60:VAL:N	10	129.2
(1,49)	1:A:28:LYS:N	1:A:28:LYS:CA	1:A:28:LYS:C	1:A:29:LEU:N	8	129.1
(1,49)	1:A:28:LYS:N	1:A:28:LYS:CA	1:A:28:LYS:C	1:A:29:LEU:N	8	129.1
(1,49)	1:A:28:LYS:N	1:A:28:LYS:CA	1:A:28:LYS:C	1:A:29:LEU:N	8	129.1
(1,49)	1:A:28:LYS:N	1:A:28:LYS:CA	1:A:28:LYS:C	1:A:29:LEU:N	9	129.1
(1,49)	1:A:28:LYS:N	1:A:28:LYS:CA	1:A:28:LYS:C	1:A:29:LEU:N	9	129.1
(1,49)	1:A:28:LYS:N	1:A:28:LYS:CA	1:A:28:LYS:C	1:A:29:LEU:N	9	129.1
(1,43)	1:A:25:MET:N	1:A:25:MET:CA	1:A:25:MET:C	1:A:26:ILE:N	5	129.0
(1,43)	1:A:25:MET:N	1:A:25:MET:CA	1:A:25:MET:C	1:A:26:ILE:N	5	129.0
(1,43)	1:A:25:MET:N	1:A:25:MET:CA	1:A:25:MET:C	1:A:26:ILE:N	5	129.0
(1,185)	1:A:100:LYS:N	1:A:100:LYS:CA	1:A:100:LYS:C	1:A:101:HIS:N	8	129.0
(1,185)	1:A:100:LYS:N	1:A:100:LYS:CA	1:A:100:LYS:C	1:A:101:HIS:N	8	129.0
(1,185)	1:A:100:LYS:N	1:A:100:LYS:CA	1:A:100:LYS:C	1:A:101:HIS:N	8	129.0
(1,107)	1:A:60:VAL:N	1:A:60:VAL:CA	1:A:60:VAL:C	1:A:61:LYS:N	3	129.0
(1,107)	1:A:60:VAL:N	1:A:60:VAL:CA	1:A:60:VAL:C	1:A:61:LYS:N	3	129.0
(1,107)	1:A:60:VAL:N	1:A:60:VAL:CA	1:A:60:VAL:C	1:A:61:LYS:N	3	129.0

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,47)	1:A:27:GLU:N	1:A:27:GLU:CA	1:A:27:GLU:C	1:A:28:LYS:N	9	128.9
(1,47)	1:A:27:GLU:N	1:A:27:GLU:CA	1:A:27:GLU:C	1:A:28:LYS:N	9	128.9
(1,47)	1:A:27:GLU:N	1:A:27:GLU:CA	1:A:27:GLU:C	1:A:28:LYS:N	9	128.9
(1,191)	1:A:103:HIS:N	1:A:103:HIS:CA	1:A:103:HIS:C	1:A:104:HIS:N	10	128.9
(1,191)	1:A:103:HIS:N	1:A:103:HIS:CA	1:A:103:HIS:C	1:A:104:HIS:N	10	128.9
(1,191)	1:A:103:HIS:N	1:A:103:HIS:CA	1:A:103:HIS:C	1:A:104:HIS:N	10	128.9
(1,109)	1:A:61:LYS:N	1:A:61:LYS:CA	1:A:61:LYS:C	1:A:62:ALA:N	1	128.9
(1,109)	1:A:61:LYS:N	1:A:61:LYS:CA	1:A:61:LYS:C	1:A:62:ALA:N	1	128.9
(1,109)	1:A:61:LYS:N	1:A:61:LYS:CA	1:A:61:LYS:C	1:A:62:ALA:N	1	128.9
(1,105)	1:A:59:GLU:N	1:A:59:GLU:CA	1:A:59:GLU:C	1:A:60:VAL:N	6	128.9
(1,105)	1:A:59:GLU:N	1:A:59:GLU:CA	1:A:59:GLU:C	1:A:60:VAL:N	6	128.9
(1,105)	1:A:59:GLU:N	1:A:59:GLU:CA	1:A:59:GLU:C	1:A:60:VAL:N	6	128.9
(1,37)	1:A:22:ALA:N	1:A:22:ALA:CA	1:A:22:ALA:C	1:A:23:LYS:N	5	128.8
(1,37)	1:A:22:ALA:N	1:A:22:ALA:CA	1:A:22:ALA:C	1:A:23:LYS:N	5	128.8
(1,37)	1:A:22:ALA:N	1:A:22:ALA:CA	1:A:22:ALA:C	1:A:23:LYS:N	5	128.8
(1,31)	1:A:19:LYS:N	1:A:19:LYS:CA	1:A:19:LYS:C	1:A:20:ASP:N	4	128.8
(1,31)	1:A:19:LYS:N	1:A:19:LYS:CA	1:A:19:LYS:C	1:A:20:ASP:N	4	128.8
(1,31)	1:A:19:LYS:N	1:A:19:LYS:CA	1:A:19:LYS:C	1:A:20:ASP:N	4	128.8
(1,37)	1:A:22:ALA:N	1:A:22:ALA:CA	1:A:22:ALA:C	1:A:23:LYS:N	6	128.7
(1,37)	1:A:22:ALA:N	1:A:22:ALA:CA	1:A:22:ALA:C	1:A:23:LYS:N	6	128.7
(1,37)	1:A:22:ALA:N	1:A:22:ALA:CA	1:A:22:ALA:C	1:A:23:LYS:N	6	128.7
(1,107)	1:A:60:VAL:N	1:A:60:VAL:CA	1:A:60:VAL:C	1:A:61:LYS:N	10	128.7
(1,107)	1:A:60:VAL:N	1:A:60:VAL:CA	1:A:60:VAL:C	1:A:61:LYS:N	10	128.7
(1,107)	1:A:60:VAL:N	1:A:60:VAL:CA	1:A:60:VAL:C	1:A:61:LYS:N	10	128.7
(1,193)	1:A:104:HIS:N	1:A:104:HIS:CA	1:A:104:HIS:C	1:A:105:HIS:N	8	128.6
(1,193)	1:A:104:HIS:N	1:A:104:HIS:CA	1:A:104:HIS:C	1:A:105:HIS:N	8	128.6
(1,193)	1:A:104:HIS:N	1:A:104:HIS:CA	1:A:104:HIS:C	1:A:105:HIS:N	8	128.6
(1,129)	1:A:71:ASP:N	1:A:71:ASP:CA	1:A:71:ASP:C	1:A:72:PHE:N	4	128.6
(1,129)	1:A:71:ASP:N	1:A:71:ASP:CA	1:A:71:ASP:C	1:A:72:PHE:N	4	128.6
(1,129)	1:A:71:ASP:N	1:A:71:ASP:CA	1:A:71:ASP:C	1:A:72:PHE:N	4	128.6
(1,107)	1:A:60:VAL:N	1:A:60:VAL:CA	1:A:60:VAL:C	1:A:61:LYS:N	8	128.6
(1,107)	1:A:60:VAL:N	1:A:60:VAL:CA	1:A:60:VAL:C	1:A:61:LYS:N	8	128.6
(1,107)	1:A:60:VAL:N	1:A:60:VAL:CA	1:A:60:VAL:C	1:A:61:LYS:N	8	128.6
(1,41)	1:A:24:ALA:N	1:A:24:ALA:CA	1:A:24:ALA:C	1:A:25:MET:N	1	128.5
(1,41)	1:A:24:ALA:N	1:A:24:ALA:CA	1:A:24:ALA:C	1:A:25:MET:N	1	128.5
(1,41)	1:A:24:ALA:N	1:A:24:ALA:CA	1:A:24:ALA:C	1:A:25:MET:N	1	128.5
(1,191)	1:A:103:HIS:N	1:A:103:HIS:CA	1:A:103:HIS:C	1:A:104:HIS:N	4	128.5
(1,191)	1:A:103:HIS:N	1:A:103:HIS:CA	1:A:103:HIS:C	1:A:104:HIS:N	4	128.5
(1,191)	1:A:103:HIS:N	1:A:103:HIS:CA	1:A:103:HIS:C	1:A:104:HIS:N	4	128.5
(1,145)	1:A:79:SER:N	1:A:79:SER:CA	1:A:79:SER:C	1:A:80:ALA:N	2	128.5
(1,145)	1:A:79:SER:N	1:A:79:SER:CA	1:A:79:SER:C	1:A:80:ALA:N	2	128.5
(1,145)	1:A:79:SER:N	1:A:79:SER:CA	1:A:79:SER:C	1:A:80:ALA:N	2	128.5
(1,87)	1:A:50:VAL:N	1:A:50:VAL:CA	1:A:50:VAL:C	1:A:51:GLU:N	5	128.4
(1,87)	1:A:50:VAL:N	1:A:50:VAL:CA	1:A:50:VAL:C	1:A:51:GLU:N	5	128.4
(1,87)	1:A:50:VAL:N	1:A:50:VAL:CA	1:A:50:VAL:C	1:A:51:GLU:N	5	128.4
(1,31)	1:A:19:LYS:N	1:A:19:LYS:CA	1:A:19:LYS:C	1:A:20:ASP:N	5	128.3
(1,31)	1:A:19:LYS:N	1:A:19:LYS:CA	1:A:19:LYS:C	1:A:20:ASP:N	5	128.3
(1,31)	1:A:19:LYS:N	1:A:19:LYS:CA	1:A:19:LYS:C	1:A:20:ASP:N	5	128.3
(1,25)	1:A:16:SER:N	1:A:16:SER:CA	1:A:16:SER:C	1:A:17:GLN:N	8	128.3
(1,25)	1:A:16:SER:N	1:A:16:SER:CA	1:A:16:SER:C	1:A:17:GLN:N	8	128.3
(1,25)	1:A:16:SER:N	1:A:16:SER:CA	1:A:16:SER:C	1:A:17:GLN:N	8	128.3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,47)	1:A:27:GLU:N	1:A:27:GLU:CA	1:A:27:GLU:C	1:A:28:LYS:N	10	128.1
(1,47)	1:A:27:GLU:N	1:A:27:GLU:CA	1:A:27:GLU:C	1:A:28:LYS:N	10	128.1
(1,47)	1:A:27:GLU:N	1:A:27:GLU:CA	1:A:27:GLU:C	1:A:28:LYS:N	10	128.1
(1,111)	1:A:62:ALA:N	1:A:62:ALA:CA	1:A:62:ALA:C	1:A:63:ALA:N	5	128.1
(1,111)	1:A:62:ALA:N	1:A:62:ALA:CA	1:A:62:ALA:C	1:A:63:ALA:N	5	128.1
(1,111)	1:A:62:ALA:N	1:A:62:ALA:CA	1:A:62:ALA:C	1:A:63:ALA:N	5	128.1
(1,109)	1:A:61:LYS:N	1:A:61:LYS:CA	1:A:61:LYS:C	1:A:62:ALA:N	2	128.1
(1,109)	1:A:61:LYS:N	1:A:61:LYS:CA	1:A:61:LYS:C	1:A:62:ALA:N	2	128.1
(1,109)	1:A:61:LYS:N	1:A:61:LYS:CA	1:A:61:LYS:C	1:A:62:ALA:N	2	128.1
(1,63)	1:A:38:ASN:N	1:A:38:ASN:CA	1:A:38:ASN:C	1:A:39:LYS:N	10	127.9
(1,63)	1:A:38:ASN:N	1:A:38:ASN:CA	1:A:38:ASN:C	1:A:39:LYS:N	10	127.9
(1,63)	1:A:38:ASN:N	1:A:38:ASN:CA	1:A:38:ASN:C	1:A:39:LYS:N	10	127.9
(1,31)	1:A:19:LYS:N	1:A:19:LYS:CA	1:A:19:LYS:C	1:A:20:ASP:N	9	127.9
(1,31)	1:A:19:LYS:N	1:A:19:LYS:CA	1:A:19:LYS:C	1:A:20:ASP:N	9	127.9
(1,31)	1:A:19:LYS:N	1:A:19:LYS:CA	1:A:19:LYS:C	1:A:20:ASP:N	9	127.9
(1,185)	1:A:100:LYS:N	1:A:100:LYS:CA	1:A:100:LYS:C	1:A:101:HIS:N	4	127.8
(1,185)	1:A:100:LYS:N	1:A:100:LYS:CA	1:A:100:LYS:C	1:A:101:HIS:N	4	127.8
(1,185)	1:A:100:LYS:N	1:A:100:LYS:CA	1:A:100:LYS:C	1:A:101:HIS:N	4	127.8
(1,49)	1:A:28:LYS:N	1:A:28:LYS:CA	1:A:28:LYS:C	1:A:29:LEU:N	5	127.7
(1,49)	1:A:28:LYS:N	1:A:28:LYS:CA	1:A:28:LYS:C	1:A:29:LEU:N	5	127.7
(1,49)	1:A:28:LYS:N	1:A:28:LYS:CA	1:A:28:LYS:C	1:A:29:LEU:N	5	127.7
(1,161)	1:A:87:LEU:N	1:A:87:LEU:CA	1:A:87:LEU:C	1:A:88:SER:N	4	127.6
(1,161)	1:A:87:LEU:N	1:A:87:LEU:CA	1:A:87:LEU:C	1:A:88:SER:N	4	127.6
(1,161)	1:A:87:LEU:N	1:A:87:LEU:CA	1:A:87:LEU:C	1:A:88:SER:N	4	127.6
(1,69)	1:A:41:SER:N	1:A:41:SER:CA	1:A:41:SER:C	1:A:42:LEU:N	10	127.4
(1,69)	1:A:41:SER:N	1:A:41:SER:CA	1:A:41:SER:C	1:A:42:LEU:N	10	127.4
(1,69)	1:A:41:SER:N	1:A:41:SER:CA	1:A:41:SER:C	1:A:42:LEU:N	10	127.4
(1,137)	1:A:75:ASP:N	1:A:75:ASP:CA	1:A:75:ASP:C	1:A:76:VAL:N	9	127.4
(1,137)	1:A:75:ASP:N	1:A:75:ASP:CA	1:A:75:ASP:C	1:A:76:VAL:N	9	127.4
(1,137)	1:A:75:ASP:N	1:A:75:ASP:CA	1:A:75:ASP:C	1:A:76:VAL:N	9	127.4
(1,81)	1:A:47:LYS:N	1:A:47:LYS:CA	1:A:47:LYS:C	1:A:48:LYS:N	10	127.3
(1,81)	1:A:47:LYS:N	1:A:47:LYS:CA	1:A:47:LYS:C	1:A:48:LYS:N	10	127.3
(1,81)	1:A:47:LYS:N	1:A:47:LYS:CA	1:A:47:LYS:C	1:A:48:LYS:N	10	127.3
(1,41)	1:A:24:ALA:N	1:A:24:ALA:CA	1:A:24:ALA:C	1:A:25:MET:N	2	127.3
(1,41)	1:A:24:ALA:N	1:A:24:ALA:CA	1:A:24:ALA:C	1:A:25:MET:N	2	127.3
(1,41)	1:A:24:ALA:N	1:A:24:ALA:CA	1:A:24:ALA:C	1:A:25:MET:N	2	127.3
(1,41)	1:A:24:ALA:N	1:A:24:ALA:CA	1:A:24:ALA:C	1:A:25:MET:N	8	127.3
(1,41)	1:A:24:ALA:N	1:A:24:ALA:CA	1:A:24:ALA:C	1:A:25:MET:N	8	127.3
(1,41)	1:A:24:ALA:N	1:A:24:ALA:CA	1:A:24:ALA:C	1:A:25:MET:N	8	127.3
(1,137)	1:A:75:ASP:N	1:A:75:ASP:CA	1:A:75:ASP:C	1:A:76:VAL:N	6	127.3
(1,137)	1:A:75:ASP:N	1:A:75:ASP:CA	1:A:75:ASP:C	1:A:76:VAL:N	6	127.3
(1,137)	1:A:75:ASP:N	1:A:75:ASP:CA	1:A:75:ASP:C	1:A:76:VAL:N	6	127.3
(1,33)	1:A:20:ASP:N	1:A:20:ASP:CA	1:A:20:ASP:C	1:A:21:GLU:N	9	127.2
(1,33)	1:A:20:ASP:N	1:A:20:ASP:CA	1:A:20:ASP:C	1:A:21:GLU:N	9	127.2
(1,33)	1:A:20:ASP:N	1:A:20:ASP:CA	1:A:20:ASP:C	1:A:21:GLU:N	9	127.2
(1,185)	1:A:100:LYS:N	1:A:100:LYS:CA	1:A:100:LYS:C	1:A:101:HIS:N	1	127.2
(1,185)	1:A:100:LYS:N	1:A:100:LYS:CA	1:A:100:LYS:C	1:A:101:HIS:N	1	127.2
(1,185)	1:A:100:LYS:N	1:A:100:LYS:CA	1:A:100:LYS:C	1:A:101:HIS:N	1	127.2
(1,137)	1:A:75:ASP:N	1:A:75:ASP:CA	1:A:75:ASP:C	1:A:76:VAL:N	4	127.2
(1,137)	1:A:75:ASP:N	1:A:75:ASP:CA	1:A:75:ASP:C	1:A:76:VAL:N	4	127.2
(1,137)	1:A:75:ASP:N	1:A:75:ASP:CA	1:A:75:ASP:C	1:A:76:VAL:N	4	127.2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,165)	1:A:89:ALA:N	1:A:89:ALA:CA	1:A:89:ALA:C	1:A:90:HIS:N	7	127.0
(1,165)	1:A:89:ALA:N	1:A:89:ALA:CA	1:A:89:ALA:C	1:A:90:HIS:N	7	127.0
(1,165)	1:A:89:ALA:N	1:A:89:ALA:CA	1:A:89:ALA:C	1:A:90:HIS:N	7	127.0
(1,137)	1:A:75:ASP:N	1:A:75:ASP:CA	1:A:75:ASP:C	1:A:76:VAL:N	8	127.0
(1,137)	1:A:75:ASP:N	1:A:75:ASP:CA	1:A:75:ASP:C	1:A:76:VAL:N	8	127.0
(1,137)	1:A:75:ASP:N	1:A:75:ASP:CA	1:A:75:ASP:C	1:A:76:VAL:N	8	127.0
(1,107)	1:A:60:VAL:N	1:A:60:VAL:CA	1:A:60:VAL:C	1:A:61:LYS:N	4	127.0
(1,107)	1:A:60:VAL:N	1:A:60:VAL:CA	1:A:60:VAL:C	1:A:61:LYS:N	4	127.0
(1,107)	1:A:60:VAL:N	1:A:60:VAL:CA	1:A:60:VAL:C	1:A:61:LYS:N	4	127.0
(1,107)	1:A:60:VAL:N	1:A:60:VAL:CA	1:A:60:VAL:C	1:A:61:LYS:N	7	127.0
(1,107)	1:A:60:VAL:N	1:A:60:VAL:CA	1:A:60:VAL:C	1:A:61:LYS:N	7	127.0
(1,107)	1:A:60:VAL:N	1:A:60:VAL:CA	1:A:60:VAL:C	1:A:61:LYS:N	7	127.0
(1,31)	1:A:19:LYS:N	1:A:19:LYS:CA	1:A:19:LYS:C	1:A:20:ASP:N	2	126.9
(1,31)	1:A:19:LYS:N	1:A:19:LYS:CA	1:A:19:LYS:C	1:A:20:ASP:N	2	126.9
(1,31)	1:A:19:LYS:N	1:A:19:LYS:CA	1:A:19:LYS:C	1:A:20:ASP:N	2	126.9
(1,33)	1:A:20:ASP:N	1:A:20:ASP:CA	1:A:20:ASP:C	1:A:21:GLU:N	4	126.7
(1,33)	1:A:20:ASP:N	1:A:20:ASP:CA	1:A:20:ASP:C	1:A:21:GLU:N	4	126.7
(1,33)	1:A:20:ASP:N	1:A:20:ASP:CA	1:A:20:ASP:C	1:A:21:GLU:N	4	126.7
(1,33)	1:A:20:ASP:N	1:A:20:ASP:CA	1:A:20:ASP:C	1:A:21:GLU:N	8	126.7
(1,33)	1:A:20:ASP:N	1:A:20:ASP:CA	1:A:20:ASP:C	1:A:21:GLU:N	8	126.7
(1,33)	1:A:20:ASP:N	1:A:20:ASP:CA	1:A:20:ASP:C	1:A:21:GLU:N	8	126.7
(1,33)	1:A:20:ASP:N	1:A:20:ASP:CA	1:A:20:ASP:C	1:A:21:GLU:N	8	126.7
(1,167)	1:A:90:HIS:N	1:A:90:HIS:CA	1:A:90:HIS:C	1:A:91:SER:N	8	126.7
(1,167)	1:A:90:HIS:N	1:A:90:HIS:CA	1:A:90:HIS:C	1:A:91:SER:N	8	126.7
(1,167)	1:A:90:HIS:N	1:A:90:HIS:CA	1:A:90:HIS:C	1:A:91:SER:N	8	126.7
(1,137)	1:A:75:ASP:N	1:A:75:ASP:CA	1:A:75:ASP:C	1:A:76:VAL:N	5	126.7
(1,137)	1:A:75:ASP:N	1:A:75:ASP:CA	1:A:75:ASP:C	1:A:76:VAL:N	5	126.7
(1,137)	1:A:75:ASP:N	1:A:75:ASP:CA	1:A:75:ASP:C	1:A:76:VAL:N	5	126.7
(1,109)	1:A:61:LYS:N	1:A:61:LYS:CA	1:A:61:LYS:C	1:A:62:ALA:N	9	126.7
(1,109)	1:A:61:LYS:N	1:A:61:LYS:CA	1:A:61:LYS:C	1:A:62:ALA:N	9	126.7
(1,109)	1:A:61:LYS:N	1:A:61:LYS:CA	1:A:61:LYS:C	1:A:62:ALA:N	9	126.7
(1,189)	1:A:102:HIS:N	1:A:102:HIS:CA	1:A:102:HIS:C	1:A:103:HIS:N	3	126.6
(1,189)	1:A:102:HIS:N	1:A:102:HIS:CA	1:A:102:HIS:C	1:A:103:HIS:N	3	126.6
(1,189)	1:A:102:HIS:N	1:A:102:HIS:CA	1:A:102:HIS:C	1:A:103:HIS:N	3	126.6
(1,49)	1:A:28:LYS:N	1:A:28:LYS:CA	1:A:28:LYS:C	1:A:29:LEU:N	10	126.5
(1,49)	1:A:28:LYS:N	1:A:28:LYS:CA	1:A:28:LYS:C	1:A:29:LEU:N	10	126.5
(1,49)	1:A:28:LYS:N	1:A:28:LYS:CA	1:A:28:LYS:C	1:A:29:LEU:N	10	126.5
(1,171)	1:A:92:LEU:N	1:A:92:LEU:CA	1:A:92:LEU:C	1:A:93:SER:N	7	126.5
(1,171)	1:A:92:LEU:N	1:A:92:LEU:CA	1:A:92:LEU:C	1:A:93:SER:N	7	126.5
(1,171)	1:A:92:LEU:N	1:A:92:LEU:CA	1:A:92:LEU:C	1:A:93:SER:N	7	126.5
(1,137)	1:A:75:ASP:N	1:A:75:ASP:CA	1:A:75:ASP:C	1:A:76:VAL:N	7	126.4
(1,137)	1:A:75:ASP:N	1:A:75:ASP:CA	1:A:75:ASP:C	1:A:76:VAL:N	7	126.4
(1,137)	1:A:75:ASP:N	1:A:75:ASP:CA	1:A:75:ASP:C	1:A:76:VAL:N	7	126.4
(1,137)	1:A:75:ASP:N	1:A:75:ASP:CA	1:A:75:ASP:C	1:A:76:VAL:N	1	126.3
(1,137)	1:A:75:ASP:N	1:A:75:ASP:CA	1:A:75:ASP:C	1:A:76:VAL:N	1	126.3
(1,137)	1:A:75:ASP:N	1:A:75:ASP:CA	1:A:75:ASP:C	1:A:76:VAL:N	1	126.3
(1,143)	1:A:78:ALA:N	1:A:78:ALA:CA	1:A:78:ALA:C	1:A:79:SER:N	5	126.0
(1,143)	1:A:78:ALA:N	1:A:78:ALA:CA	1:A:78:ALA:C	1:A:79:SER:N	5	126.0
(1,143)	1:A:78:ALA:N	1:A:78:ALA:CA	1:A:78:ALA:C	1:A:79:SER:N	5	126.0
(1,37)	1:A:22:ALA:N	1:A:22:ALA:CA	1:A:22:ALA:C	1:A:23:LYS:N	3	125.9
(1,37)	1:A:22:ALA:N	1:A:22:ALA:CA	1:A:22:ALA:C	1:A:23:LYS:N	3	125.9
(1,37)	1:A:22:ALA:N	1:A:22:ALA:CA	1:A:22:ALA:C	1:A:23:LYS:N	3	125.9

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,165)	1:A:89:ALA:N	1:A:89:ALA:CA	1:A:89:ALA:C	1:A:90:HIS:N	6	125.9
(1,165)	1:A:89:ALA:N	1:A:89:ALA:CA	1:A:89:ALA:C	1:A:90:HIS:N	6	125.9
(1,165)	1:A:89:ALA:N	1:A:89:ALA:CA	1:A:89:ALA:C	1:A:90:HIS:N	6	125.9
(1,41)	1:A:24:ALA:N	1:A:24:ALA:CA	1:A:24:ALA:C	1:A:25:MET:N	7	125.5
(1,41)	1:A:24:ALA:N	1:A:24:ALA:CA	1:A:24:ALA:C	1:A:25:MET:N	7	125.5
(1,41)	1:A:24:ALA:N	1:A:24:ALA:CA	1:A:24:ALA:C	1:A:25:MET:N	7	125.5
(1,87)	1:A:50:VAL:N	1:A:50:VAL:CA	1:A:50:VAL:C	1:A:51:GLU:N	10	125.4
(1,87)	1:A:50:VAL:N	1:A:50:VAL:CA	1:A:50:VAL:C	1:A:51:GLU:N	10	125.4
(1,87)	1:A:50:VAL:N	1:A:50:VAL:CA	1:A:50:VAL:C	1:A:51:GLU:N	10	125.4
(1,69)	1:A:41:SER:N	1:A:41:SER:CA	1:A:41:SER:C	1:A:42:LEU:N	3	125.4
(1,69)	1:A:41:SER:N	1:A:41:SER:CA	1:A:41:SER:C	1:A:42:LEU:N	3	125.4
(1,69)	1:A:41:SER:N	1:A:41:SER:CA	1:A:41:SER:C	1:A:42:LEU:N	3	125.4
(1,37)	1:A:22:ALA:N	1:A:22:ALA:CA	1:A:22:ALA:C	1:A:23:LYS:N	8	125.4
(1,37)	1:A:22:ALA:N	1:A:22:ALA:CA	1:A:22:ALA:C	1:A:23:LYS:N	8	125.4
(1,37)	1:A:22:ALA:N	1:A:22:ALA:CA	1:A:22:ALA:C	1:A:23:LYS:N	8	125.4
(1,137)	1:A:75:ASP:N	1:A:75:ASP:CA	1:A:75:ASP:C	1:A:76:VAL:N	3	125.4
(1,137)	1:A:75:ASP:N	1:A:75:ASP:CA	1:A:75:ASP:C	1:A:76:VAL:N	3	125.4
(1,137)	1:A:75:ASP:N	1:A:75:ASP:CA	1:A:75:ASP:C	1:A:76:VAL:N	3	125.4
(1,137)	1:A:75:ASP:N	1:A:75:ASP:CA	1:A:75:ASP:C	1:A:76:VAL:N	2	125.3
(1,137)	1:A:75:ASP:N	1:A:75:ASP:CA	1:A:75:ASP:C	1:A:76:VAL:N	2	125.3
(1,137)	1:A:75:ASP:N	1:A:75:ASP:CA	1:A:75:ASP:C	1:A:76:VAL:N	2	125.3
(1,41)	1:A:24:ALA:N	1:A:24:ALA:CA	1:A:24:ALA:C	1:A:25:MET:N	9	125.2
(1,41)	1:A:24:ALA:N	1:A:24:ALA:CA	1:A:24:ALA:C	1:A:25:MET:N	9	125.2
(1,41)	1:A:24:ALA:N	1:A:24:ALA:CA	1:A:24:ALA:C	1:A:25:MET:N	9	125.2
(1,5)	1:A:5:SER:N	1:A:5:SER:CA	1:A:5:SER:C	1:A:6:ASN:N	2	124.8
(1,5)	1:A:5:SER:N	1:A:5:SER:CA	1:A:5:SER:C	1:A:6:ASN:N	2	124.8
(1,5)	1:A:5:SER:N	1:A:5:SER:CA	1:A:5:SER:C	1:A:6:ASN:N	2	124.8
(1,137)	1:A:75:ASP:N	1:A:75:ASP:CA	1:A:75:ASP:C	1:A:76:VAL:N	10	124.8
(1,137)	1:A:75:ASP:N	1:A:75:ASP:CA	1:A:75:ASP:C	1:A:76:VAL:N	10	124.8
(1,137)	1:A:75:ASP:N	1:A:75:ASP:CA	1:A:75:ASP:C	1:A:76:VAL:N	10	124.8
(1,187)	1:A:101:HIS:N	1:A:101:HIS:CA	1:A:101:HIS:C	1:A:102:HIS:N	10	124.6
(1,187)	1:A:101:HIS:N	1:A:101:HIS:CA	1:A:101:HIS:C	1:A:102:HIS:N	10	124.6
(1,187)	1:A:101:HIS:N	1:A:101:HIS:CA	1:A:101:HIS:C	1:A:102:HIS:N	10	124.6
(1,37)	1:A:22:ALA:N	1:A:22:ALA:CA	1:A:22:ALA:C	1:A:23:LYS:N	1	124.3
(1,37)	1:A:22:ALA:N	1:A:22:ALA:CA	1:A:22:ALA:C	1:A:23:LYS:N	1	124.3
(1,37)	1:A:22:ALA:N	1:A:22:ALA:CA	1:A:22:ALA:C	1:A:23:LYS:N	1	124.3
(1,89)	1:A:51:GLU:N	1:A:51:GLU:CA	1:A:51:GLU:C	1:A:52:LYS:N	9	124.2
(1,89)	1:A:51:GLU:N	1:A:51:GLU:CA	1:A:51:GLU:C	1:A:52:LYS:N	9	124.2
(1,89)	1:A:51:GLU:N	1:A:51:GLU:CA	1:A:51:GLU:C	1:A:52:LYS:N	9	124.2
(1,37)	1:A:22:ALA:N	1:A:22:ALA:CA	1:A:22:ALA:C	1:A:23:LYS:N	7	124.1
(1,37)	1:A:22:ALA:N	1:A:22:ALA:CA	1:A:22:ALA:C	1:A:23:LYS:N	7	124.1
(1,37)	1:A:22:ALA:N	1:A:22:ALA:CA	1:A:22:ALA:C	1:A:23:LYS:N	7	124.1
(1,195)	1:A:105:HIS:N	1:A:105:HIS:CA	1:A:105:HIS:C	1:A:106:HIS:N	2	124.0
(1,195)	1:A:105:HIS:N	1:A:105:HIS:CA	1:A:105:HIS:C	1:A:106:HIS:N	2	124.0
(1,195)	1:A:105:HIS:N	1:A:105:HIS:CA	1:A:105:HIS:C	1:A:106:HIS:N	2	124.0
(1,129)	1:A:71:ASP:N	1:A:71:ASP:CA	1:A:71:ASP:C	1:A:72:PHE:N	6	123.9
(1,129)	1:A:71:ASP:N	1:A:71:ASP:CA	1:A:71:ASP:C	1:A:72:PHE:N	6	123.9
(1,129)	1:A:71:ASP:N	1:A:71:ASP:CA	1:A:71:ASP:C	1:A:72:PHE:N	6	123.9
(1,31)	1:A:19:LYS:N	1:A:19:LYS:CA	1:A:19:LYS:C	1:A:20:ASP:N	1	123.1
(1,31)	1:A:19:LYS:N	1:A:19:LYS:CA	1:A:19:LYS:C	1:A:20:ASP:N	1	123.1
(1,31)	1:A:19:LYS:N	1:A:19:LYS:CA	1:A:19:LYS:C	1:A:20:ASP:N	1	123.1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,191)	1:A:103:HIS:N	1:A:103:HIS:CA	1:A:103:HIS:C	1:A:104:HIS:N	9	122.8
(1,191)	1:A:103:HIS:N	1:A:103:HIS:CA	1:A:103:HIS:C	1:A:104:HIS:N	9	122.8
(1,191)	1:A:103:HIS:N	1:A:103:HIS:CA	1:A:103:HIS:C	1:A:104:HIS:N	9	122.8
(1,89)	1:A:51:GLU:N	1:A:51:GLU:CA	1:A:51:GLU:C	1:A:52:LYS:N	2	122.6
(1,89)	1:A:51:GLU:N	1:A:51:GLU:CA	1:A:51:GLU:C	1:A:52:LYS:N	2	122.6
(1,89)	1:A:51:GLU:N	1:A:51:GLU:CA	1:A:51:GLU:C	1:A:52:LYS:N	2	122.6
(1,5)	1:A:5:SER:N	1:A:5:SER:CA	1:A:5:SER:C	1:A:6:ASN:N	1	122.5
(1,5)	1:A:5:SER:N	1:A:5:SER:CA	1:A:5:SER:C	1:A:6:ASN:N	1	122.5
(1,5)	1:A:5:SER:N	1:A:5:SER:CA	1:A:5:SER:C	1:A:6:ASN:N	1	122.5
(1,129)	1:A:71:ASP:N	1:A:71:ASP:CA	1:A:71:ASP:C	1:A:72:PHE:N	3	122.4
(1,129)	1:A:71:ASP:N	1:A:71:ASP:CA	1:A:71:ASP:C	1:A:72:PHE:N	3	122.4
(1,129)	1:A:71:ASP:N	1:A:71:ASP:CA	1:A:71:ASP:C	1:A:72:PHE:N	3	122.4
(1,5)	1:A:5:SER:N	1:A:5:SER:CA	1:A:5:SER:C	1:A:6:ASN:N	9	122.3
(1,5)	1:A:5:SER:N	1:A:5:SER:CA	1:A:5:SER:C	1:A:6:ASN:N	9	122.3
(1,5)	1:A:5:SER:N	1:A:5:SER:CA	1:A:5:SER:C	1:A:6:ASN:N	9	122.3
(1,5)	1:A:5:SER:N	1:A:5:SER:CA	1:A:5:SER:C	1:A:6:ASN:N	4	122.2
(1,5)	1:A:5:SER:N	1:A:5:SER:CA	1:A:5:SER:C	1:A:6:ASN:N	4	122.2
(1,5)	1:A:5:SER:N	1:A:5:SER:CA	1:A:5:SER:C	1:A:6:ASN:N	4	122.2
(1,161)	1:A:87:LEU:N	1:A:87:LEU:CA	1:A:87:LEU:C	1:A:88:SER:N	7	122.1
(1,161)	1:A:87:LEU:N	1:A:87:LEU:CA	1:A:87:LEU:C	1:A:88:SER:N	7	122.1
(1,161)	1:A:87:LEU:N	1:A:87:LEU:CA	1:A:87:LEU:C	1:A:88:SER:N	7	122.1
(1,129)	1:A:71:ASP:N	1:A:71:ASP:CA	1:A:71:ASP:C	1:A:72:PHE:N	2	121.9
(1,129)	1:A:71:ASP:N	1:A:71:ASP:CA	1:A:71:ASP:C	1:A:72:PHE:N	2	121.9
(1,129)	1:A:71:ASP:N	1:A:71:ASP:CA	1:A:71:ASP:C	1:A:72:PHE:N	2	121.9
(1,1)	1:A:1:MET:N	1:A:1:MET:CA	1:A:1:MET:C	1:A:2:LYS:N	5	121.3
(1,1)	1:A:1:MET:N	1:A:1:MET:CA	1:A:1:MET:C	1:A:2:LYS:N	5	121.3
(1,1)	1:A:1:MET:N	1:A:1:MET:CA	1:A:1:MET:C	1:A:2:LYS:N	5	121.3
(1,1)	1:A:1:MET:N	1:A:1:MET:CA	1:A:1:MET:C	1:A:2:LYS:N	5	121.3
(1,111)	1:A:62:ALA:N	1:A:62:ALA:CA	1:A:62:ALA:C	1:A:63:ALA:N	9	121.0
(1,111)	1:A:62:ALA:N	1:A:62:ALA:CA	1:A:62:ALA:C	1:A:63:ALA:N	9	121.0
(1,111)	1:A:62:ALA:N	1:A:62:ALA:CA	1:A:62:ALA:C	1:A:63:ALA:N	9	121.0
(1,129)	1:A:71:ASP:N	1:A:71:ASP:CA	1:A:71:ASP:C	1:A:72:PHE:N	5	120.9
(1,129)	1:A:71:ASP:N	1:A:71:ASP:CA	1:A:71:ASP:C	1:A:72:PHE:N	5	120.9
(1,129)	1:A:71:ASP:N	1:A:71:ASP:CA	1:A:71:ASP:C	1:A:72:PHE:N	5	120.9
(1,129)	1:A:71:ASP:N	1:A:71:ASP:CA	1:A:71:ASP:C	1:A:72:PHE:N	8	120.9
(1,129)	1:A:71:ASP:N	1:A:71:ASP:CA	1:A:71:ASP:C	1:A:72:PHE:N	8	120.9
(1,129)	1:A:71:ASP:N	1:A:71:ASP:CA	1:A:71:ASP:C	1:A:72:PHE:N	8	120.9
(1,69)	1:A:41:SER:N	1:A:41:SER:CA	1:A:41:SER:C	1:A:42:LEU:N	2	120.2
(1,69)	1:A:41:SER:N	1:A:41:SER:CA	1:A:41:SER:C	1:A:42:LEU:N	2	120.2
(1,69)	1:A:41:SER:N	1:A:41:SER:CA	1:A:41:SER:C	1:A:42:LEU:N	2	120.2
(1,37)	1:A:22:ALA:N	1:A:22:ALA:CA	1:A:22:ALA:C	1:A:23:LYS:N	9	120.2
(1,37)	1:A:22:ALA:N	1:A:22:ALA:CA	1:A:22:ALA:C	1:A:23:LYS:N	9	120.2
(1,37)	1:A:22:ALA:N	1:A:22:ALA:CA	1:A:22:ALA:C	1:A:23:LYS:N	9	120.2
(1,129)	1:A:71:ASP:N	1:A:71:ASP:CA	1:A:71:ASP:C	1:A:72:PHE:N	7	119.2
(1,129)	1:A:71:ASP:N	1:A:71:ASP:CA	1:A:71:ASP:C	1:A:72:PHE:N	7	119.2
(1,129)	1:A:71:ASP:N	1:A:71:ASP:CA	1:A:71:ASP:C	1:A:72:PHE:N	7	119.2
(1,129)	1:A:71:ASP:N	1:A:71:ASP:CA	1:A:71:ASP:C	1:A:72:PHE:N	9	119.1
(1,129)	1:A:71:ASP:N	1:A:71:ASP:CA	1:A:71:ASP:C	1:A:72:PHE:N	9	119.1
(1,129)	1:A:71:ASP:N	1:A:71:ASP:CA	1:A:71:ASP:C	1:A:72:PHE:N	9	119.1
(1,111)	1:A:62:ALA:N	1:A:62:ALA:CA	1:A:62:ALA:C	1:A:63:ALA:N	4	119.0
(1,111)	1:A:62:ALA:N	1:A:62:ALA:CA	1:A:62:ALA:C	1:A:63:ALA:N	4	119.0

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,111)	1:A:62:ALA:N	1:A:62:ALA:CA	1:A:62:ALA:C	1:A:63:ALA:N	4	119.0
(1,175)	1:A:94:SER:N	1:A:94:SER:CA	1:A:94:SER:C	1:A:95:TRP:N	5	118.7
(1,175)	1:A:94:SER:N	1:A:94:SER:CA	1:A:94:SER:C	1:A:95:TRP:N	5	118.7
(1,175)	1:A:94:SER:N	1:A:94:SER:CA	1:A:94:SER:C	1:A:95:TRP:N	5	118.7
(1,111)	1:A:62:ALA:N	1:A:62:ALA:CA	1:A:62:ALA:C	1:A:63:ALA:N	3	118.5
(1,111)	1:A:62:ALA:N	1:A:62:ALA:CA	1:A:62:ALA:C	1:A:63:ALA:N	3	118.5
(1,111)	1:A:62:ALA:N	1:A:62:ALA:CA	1:A:62:ALA:C	1:A:63:ALA:N	3	118.5
(1,37)	1:A:22:ALA:N	1:A:22:ALA:CA	1:A:22:ALA:C	1:A:23:LYS:N	2	118.2
(1,37)	1:A:22:ALA:N	1:A:22:ALA:CA	1:A:22:ALA:C	1:A:23:LYS:N	2	118.2
(1,37)	1:A:22:ALA:N	1:A:22:ALA:CA	1:A:22:ALA:C	1:A:23:LYS:N	2	118.2
(1,129)	1:A:71:ASP:N	1:A:71:ASP:CA	1:A:71:ASP:C	1:A:72:PHE:N	10	117.5
(1,129)	1:A:71:ASP:N	1:A:71:ASP:CA	1:A:71:ASP:C	1:A:72:PHE:N	10	117.5
(1,129)	1:A:71:ASP:N	1:A:71:ASP:CA	1:A:71:ASP:C	1:A:72:PHE:N	10	117.5
(1,111)	1:A:62:ALA:N	1:A:62:ALA:CA	1:A:62:ALA:C	1:A:63:ALA:N	2	117.4
(1,111)	1:A:62:ALA:N	1:A:62:ALA:CA	1:A:62:ALA:C	1:A:63:ALA:N	2	117.4
(1,111)	1:A:62:ALA:N	1:A:62:ALA:CA	1:A:62:ALA:C	1:A:63:ALA:N	2	117.4
(1,65)	1:A:39:LYS:N	1:A:39:LYS:CA	1:A:39:LYS:C	1:A:40:ALA:N	2	117.1
(1,65)	1:A:39:LYS:N	1:A:39:LYS:CA	1:A:39:LYS:C	1:A:40:ALA:N	2	117.1
(1,65)	1:A:39:LYS:N	1:A:39:LYS:CA	1:A:39:LYS:C	1:A:40:ALA:N	2	117.1
(1,161)	1:A:87:LEU:N	1:A:87:LEU:CA	1:A:87:LEU:C	1:A:88:SER:N	2	116.6
(1,161)	1:A:87:LEU:N	1:A:87:LEU:CA	1:A:87:LEU:C	1:A:88:SER:N	2	116.6
(1,161)	1:A:87:LEU:N	1:A:87:LEU:CA	1:A:87:LEU:C	1:A:88:SER:N	2	116.6
(1,111)	1:A:62:ALA:N	1:A:62:ALA:CA	1:A:62:ALA:C	1:A:63:ALA:N	6	116.6
(1,111)	1:A:62:ALA:N	1:A:62:ALA:CA	1:A:62:ALA:C	1:A:63:ALA:N	6	116.6
(1,111)	1:A:62:ALA:N	1:A:62:ALA:CA	1:A:62:ALA:C	1:A:63:ALA:N	6	116.6
(1,31)	1:A:19:LYS:N	1:A:19:LYS:CA	1:A:19:LYS:C	1:A:20:ASP:N	3	116.4
(1,31)	1:A:19:LYS:N	1:A:19:LYS:CA	1:A:19:LYS:C	1:A:20:ASP:N	3	116.4
(1,31)	1:A:19:LYS:N	1:A:19:LYS:CA	1:A:19:LYS:C	1:A:20:ASP:N	3	116.4
(1,167)	1:A:90:HIS:N	1:A:90:HIS:CA	1:A:90:HIS:C	1:A:91:SER:N	7	116.4
(1,167)	1:A:90:HIS:N	1:A:90:HIS:CA	1:A:90:HIS:C	1:A:91:SER:N	7	116.4
(1,167)	1:A:90:HIS:N	1:A:90:HIS:CA	1:A:90:HIS:C	1:A:91:SER:N	7	116.4
(1,111)	1:A:62:ALA:N	1:A:62:ALA:CA	1:A:62:ALA:C	1:A:63:ALA:N	1	116.4
(1,111)	1:A:62:ALA:N	1:A:62:ALA:CA	1:A:62:ALA:C	1:A:63:ALA:N	1	116.4
(1,111)	1:A:62:ALA:N	1:A:62:ALA:CA	1:A:62:ALA:C	1:A:63:ALA:N	1	116.4
(1,171)	1:A:92:LEU:N	1:A:92:LEU:CA	1:A:92:LEU:C	1:A:93:SER:N	10	116.3
(1,171)	1:A:92:LEU:N	1:A:92:LEU:CA	1:A:92:LEU:C	1:A:93:SER:N	10	116.3
(1,171)	1:A:92:LEU:N	1:A:92:LEU:CA	1:A:92:LEU:C	1:A:93:SER:N	10	116.3
(1,111)	1:A:62:ALA:N	1:A:62:ALA:CA	1:A:62:ALA:C	1:A:63:ALA:N	8	116.3
(1,111)	1:A:62:ALA:N	1:A:62:ALA:CA	1:A:62:ALA:C	1:A:63:ALA:N	8	116.3
(1,111)	1:A:62:ALA:N	1:A:62:ALA:CA	1:A:62:ALA:C	1:A:63:ALA:N	8	116.3
(1,1)	1:A:1:MET:N	1:A:1:MET:CA	1:A:1:MET:C	1:A:2:LYS:N	3	116.3
(1,1)	1:A:1:MET:N	1:A:1:MET:CA	1:A:1:MET:C	1:A:2:LYS:N	3	116.3
(1,1)	1:A:1:MET:N	1:A:1:MET:CA	1:A:1:MET:C	1:A:2:LYS:N	3	116.3
(1,1)	1:A:1:MET:N	1:A:1:MET:CA	1:A:1:MET:C	1:A:2:LYS:N	3	116.3
(1,31)	1:A:19:LYS:N	1:A:19:LYS:CA	1:A:19:LYS:C	1:A:20:ASP:N	6	116.2
(1,31)	1:A:19:LYS:N	1:A:19:LYS:CA	1:A:19:LYS:C	1:A:20:ASP:N	6	116.2
(1,31)	1:A:19:LYS:N	1:A:19:LYS:CA	1:A:19:LYS:C	1:A:20:ASP:N	6	116.2
(1,83)	1:A:48:LYS:N	1:A:48:LYS:CA	1:A:48:LYS:C	1:A:49:GLU:N	3	116.1
(1,83)	1:A:48:LYS:N	1:A:48:LYS:CA	1:A:48:LYS:C	1:A:49:GLU:N	3	116.1
(1,83)	1:A:48:LYS:N	1:A:48:LYS:CA	1:A:48:LYS:C	1:A:49:GLU:N	3	116.1
(1,161)	1:A:87:LEU:N	1:A:87:LEU:CA	1:A:87:LEU:C	1:A:88:SER:N	8	116.1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,161)	1:A:87:LEU:N	1:A:87:LEU:CA	1:A:87:LEU:C	1:A:88:SER:N	8	116.1
(1,161)	1:A:87:LEU:N	1:A:87:LEU:CA	1:A:87:LEU:C	1:A:88:SER:N	8	116.1
(1,111)	1:A:62:ALA:N	1:A:62:ALA:CA	1:A:62:ALA:C	1:A:63:ALA:N	7	115.8
(1,111)	1:A:62:ALA:N	1:A:62:ALA:CA	1:A:62:ALA:C	1:A:63:ALA:N	7	115.8
(1,111)	1:A:62:ALA:N	1:A:62:ALA:CA	1:A:62:ALA:C	1:A:63:ALA:N	7	115.8
(1,113)	1:A:63:ALA:N	1:A:63:ALA:CA	1:A:63:ALA:C	1:A:64:ASN:N	10	115.5
(1,113)	1:A:63:ALA:N	1:A:63:ALA:CA	1:A:63:ALA:C	1:A:64:ASN:N	10	115.5
(1,113)	1:A:63:ALA:N	1:A:63:ALA:CA	1:A:63:ALA:C	1:A:64:ASN:N	10	115.5
(1,35)	1:A:21:GLU:N	1:A:21:GLU:CA	1:A:21:GLU:C	1:A:22:ALA:N	4	115.3
(1,35)	1:A:21:GLU:N	1:A:21:GLU:CA	1:A:21:GLU:C	1:A:22:ALA:N	4	115.3
(1,35)	1:A:21:GLU:N	1:A:21:GLU:CA	1:A:21:GLU:C	1:A:22:ALA:N	4	115.3
(1,33)	1:A:20:ASP:N	1:A:20:ASP:CA	1:A:20:ASP:C	1:A:21:GLU:N	1	115.2
(1,33)	1:A:20:ASP:N	1:A:20:ASP:CA	1:A:20:ASP:C	1:A:21:GLU:N	1	115.2
(1,33)	1:A:20:ASP:N	1:A:20:ASP:CA	1:A:20:ASP:C	1:A:21:GLU:N	1	115.2
(1,185)	1:A:100:LYS:N	1:A:100:LYS:CA	1:A:100:LYS:C	1:A:101:HIS:N	9	115.2
(1,185)	1:A:100:LYS:N	1:A:100:LYS:CA	1:A:100:LYS:C	1:A:101:HIS:N	9	115.2
(1,185)	1:A:100:LYS:N	1:A:100:LYS:CA	1:A:100:LYS:C	1:A:101:HIS:N	9	115.2
(1,129)	1:A:71:ASP:N	1:A:71:ASP:CA	1:A:71:ASP:C	1:A:72:PHE:N	1	115.1
(1,129)	1:A:71:ASP:N	1:A:71:ASP:CA	1:A:71:ASP:C	1:A:72:PHE:N	1	115.1
(1,129)	1:A:71:ASP:N	1:A:71:ASP:CA	1:A:71:ASP:C	1:A:72:PHE:N	1	115.1
(1,143)	1:A:78:ALA:N	1:A:78:ALA:CA	1:A:78:ALA:C	1:A:79:SER:N	10	115.0
(1,143)	1:A:78:ALA:N	1:A:78:ALA:CA	1:A:78:ALA:C	1:A:79:SER:N	10	115.0
(1,143)	1:A:78:ALA:N	1:A:78:ALA:CA	1:A:78:ALA:C	1:A:79:SER:N	10	115.0
(1,3)	1:A:4:LEU:N	1:A:4:LEU:CA	1:A:4:LEU:C	1:A:5:SER:N	2	114.6
(1,3)	1:A:4:LEU:N	1:A:4:LEU:CA	1:A:4:LEU:C	1:A:5:SER:N	2	114.6
(1,3)	1:A:4:LEU:N	1:A:4:LEU:CA	1:A:4:LEU:C	1:A:5:SER:N	2	114.6
(1,83)	1:A:48:LYS:N	1:A:48:LYS:CA	1:A:48:LYS:C	1:A:49:GLU:N	6	114.5
(1,83)	1:A:48:LYS:N	1:A:48:LYS:CA	1:A:48:LYS:C	1:A:49:GLU:N	6	114.5
(1,83)	1:A:48:LYS:N	1:A:48:LYS:CA	1:A:48:LYS:C	1:A:49:GLU:N	6	114.5
(1,161)	1:A:87:LEU:N	1:A:87:LEU:CA	1:A:87:LEU:C	1:A:88:SER:N	3	114.1
(1,161)	1:A:87:LEU:N	1:A:87:LEU:CA	1:A:87:LEU:C	1:A:88:SER:N	3	114.1
(1,161)	1:A:87:LEU:N	1:A:87:LEU:CA	1:A:87:LEU:C	1:A:88:SER:N	3	114.1
(1,69)	1:A:41:SER:N	1:A:41:SER:CA	1:A:41:SER:C	1:A:42:LEU:N	6	113.6
(1,69)	1:A:41:SER:N	1:A:41:SER:CA	1:A:41:SER:C	1:A:42:LEU:N	6	113.6
(1,69)	1:A:41:SER:N	1:A:41:SER:CA	1:A:41:SER:C	1:A:42:LEU:N	6	113.6
(1,37)	1:A:22:ALA:N	1:A:22:ALA:CA	1:A:22:ALA:C	1:A:23:LYS:N	4	113.6
(1,37)	1:A:22:ALA:N	1:A:22:ALA:CA	1:A:22:ALA:C	1:A:23:LYS:N	4	113.6
(1,37)	1:A:22:ALA:N	1:A:22:ALA:CA	1:A:22:ALA:C	1:A:23:LYS:N	4	113.6
(1,161)	1:A:87:LEU:N	1:A:87:LEU:CA	1:A:87:LEU:C	1:A:88:SER:N	1	113.0
(1,161)	1:A:87:LEU:N	1:A:87:LEU:CA	1:A:87:LEU:C	1:A:88:SER:N	1	113.0
(1,161)	1:A:87:LEU:N	1:A:87:LEU:CA	1:A:87:LEU:C	1:A:88:SER:N	1	113.0
(1,187)	1:A:101:HIS:N	1:A:101:HIS:CA	1:A:101:HIS:C	1:A:102:HIS:N	7	112.9
(1,187)	1:A:101:HIS:N	1:A:101:HIS:CA	1:A:101:HIS:C	1:A:102:HIS:N	7	112.9
(1,187)	1:A:101:HIS:N	1:A:101:HIS:CA	1:A:101:HIS:C	1:A:102:HIS:N	7	112.9
(1,5)	1:A:5:SER:N	1:A:5:SER:CA	1:A:5:SER:C	1:A:6:ASN:N	8	112.8
(1,5)	1:A:5:SER:N	1:A:5:SER:CA	1:A:5:SER:C	1:A:6:ASN:N	8	112.8
(1,5)	1:A:5:SER:N	1:A:5:SER:CA	1:A:5:SER:C	1:A:6:ASN:N	8	112.8
(1,167)	1:A:90:HIS:N	1:A:90:HIS:CA	1:A:90:HIS:C	1:A:91:SER:N	6	112.5
(1,167)	1:A:90:HIS:N	1:A:90:HIS:CA	1:A:90:HIS:C	1:A:91:SER:N	6	112.5
(1,167)	1:A:90:HIS:N	1:A:90:HIS:CA	1:A:90:HIS:C	1:A:91:SER:N	6	112.5
(1,113)	1:A:63:ALA:N	1:A:63:ALA:CA	1:A:63:ALA:C	1:A:64:ASN:N	4	112.0

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,113)	1:A:63:ALA:N	1:A:63:ALA:CA	1:A:63:ALA:C	1:A:64:ASN:N	4	112.0
(1,113)	1:A:63:ALA:N	1:A:63:ALA:CA	1:A:63:ALA:C	1:A:64:ASN:N	4	112.0
(1,5)	1:A:5:SER:N	1:A:5:SER:CA	1:A:5:SER:C	1:A:6:ASN:N	5	111.9
(1,5)	1:A:5:SER:N	1:A:5:SER:CA	1:A:5:SER:C	1:A:6:ASN:N	5	111.9
(1,5)	1:A:5:SER:N	1:A:5:SER:CA	1:A:5:SER:C	1:A:6:ASN:N	5	111.9
(1,143)	1:A:78:ALA:N	1:A:78:ALA:CA	1:A:78:ALA:C	1:A:79:SER:N	7	111.9
(1,143)	1:A:78:ALA:N	1:A:78:ALA:CA	1:A:78:ALA:C	1:A:79:SER:N	7	111.9
(1,143)	1:A:78:ALA:N	1:A:78:ALA:CA	1:A:78:ALA:C	1:A:79:SER:N	7	111.9
(1,7)	1:A:6:ASN:N	1:A:6:ASN:CA	1:A:6:ASN:C	1:A:7:MET:N	10	111.8
(1,7)	1:A:6:ASN:N	1:A:6:ASN:CA	1:A:6:ASN:C	1:A:7:MET:N	10	111.8
(1,7)	1:A:6:ASN:N	1:A:6:ASN:CA	1:A:6:ASN:C	1:A:7:MET:N	10	111.8
(1,113)	1:A:63:ALA:N	1:A:63:ALA:CA	1:A:63:ALA:C	1:A:64:ASN:N	1	111.6
(1,113)	1:A:63:ALA:N	1:A:63:ALA:CA	1:A:63:ALA:C	1:A:64:ASN:N	1	111.6
(1,113)	1:A:63:ALA:N	1:A:63:ALA:CA	1:A:63:ALA:C	1:A:64:ASN:N	1	111.6
(1,113)	1:A:63:ALA:N	1:A:63:ALA:CA	1:A:63:ALA:C	1:A:64:ASN:N	2	111.6
(1,113)	1:A:63:ALA:N	1:A:63:ALA:CA	1:A:63:ALA:C	1:A:64:ASN:N	2	111.6
(1,113)	1:A:63:ALA:N	1:A:63:ALA:CA	1:A:63:ALA:C	1:A:64:ASN:N	2	111.6
(1,31)	1:A:19:LYS:N	1:A:19:LYS:CA	1:A:19:LYS:C	1:A:20:ASP:N	7	111.3
(1,31)	1:A:19:LYS:N	1:A:19:LYS:CA	1:A:19:LYS:C	1:A:20:ASP:N	7	111.3
(1,31)	1:A:19:LYS:N	1:A:19:LYS:CA	1:A:19:LYS:C	1:A:20:ASP:N	7	111.3
(1,193)	1:A:104:HIS:N	1:A:104:HIS:CA	1:A:104:HIS:C	1:A:105:HIS:N	1	110.9
(1,193)	1:A:104:HIS:N	1:A:104:HIS:CA	1:A:104:HIS:C	1:A:105:HIS:N	1	110.9
(1,193)	1:A:104:HIS:N	1:A:104:HIS:CA	1:A:104:HIS:C	1:A:105:HIS:N	1	110.9
(1,143)	1:A:78:ALA:N	1:A:78:ALA:CA	1:A:78:ALA:C	1:A:79:SER:N	1	110.7
(1,143)	1:A:78:ALA:N	1:A:78:ALA:CA	1:A:78:ALA:C	1:A:79:SER:N	1	110.7
(1,143)	1:A:78:ALA:N	1:A:78:ALA:CA	1:A:78:ALA:C	1:A:79:SER:N	1	110.7
(1,171)	1:A:92:LEU:N	1:A:92:LEU:CA	1:A:92:LEU:C	1:A:93:SER:N	1	110.2
(1,171)	1:A:92:LEU:N	1:A:92:LEU:CA	1:A:92:LEU:C	1:A:93:SER:N	1	110.2
(1,171)	1:A:92:LEU:N	1:A:92:LEU:CA	1:A:92:LEU:C	1:A:93:SER:N	1	110.2
(1,143)	1:A:78:ALA:N	1:A:78:ALA:CA	1:A:78:ALA:C	1:A:79:SER:N	8	110.2
(1,143)	1:A:78:ALA:N	1:A:78:ALA:CA	1:A:78:ALA:C	1:A:79:SER:N	8	110.2
(1,143)	1:A:78:ALA:N	1:A:78:ALA:CA	1:A:78:ALA:C	1:A:79:SER:N	8	110.2
(1,161)	1:A:87:LEU:N	1:A:87:LEU:CA	1:A:87:LEU:C	1:A:88:SER:N	6	110.1
(1,161)	1:A:87:LEU:N	1:A:87:LEU:CA	1:A:87:LEU:C	1:A:88:SER:N	6	110.1
(1,161)	1:A:87:LEU:N	1:A:87:LEU:CA	1:A:87:LEU:C	1:A:88:SER:N	6	110.1
(1,113)	1:A:63:ALA:N	1:A:63:ALA:CA	1:A:63:ALA:C	1:A:64:ASN:N	5	109.7
(1,113)	1:A:63:ALA:N	1:A:63:ALA:CA	1:A:63:ALA:C	1:A:64:ASN:N	5	109.7
(1,113)	1:A:63:ALA:N	1:A:63:ALA:CA	1:A:63:ALA:C	1:A:64:ASN:N	5	109.7
(1,161)	1:A:87:LEU:N	1:A:87:LEU:CA	1:A:87:LEU:C	1:A:88:SER:N	5	109.6
(1,161)	1:A:87:LEU:N	1:A:87:LEU:CA	1:A:87:LEU:C	1:A:88:SER:N	5	109.6
(1,161)	1:A:87:LEU:N	1:A:87:LEU:CA	1:A:87:LEU:C	1:A:88:SER:N	5	109.6
(1,37)	1:A:22:ALA:N	1:A:22:ALA:CA	1:A:22:ALA:C	1:A:23:LYS:N	10	109.4
(1,37)	1:A:22:ALA:N	1:A:22:ALA:CA	1:A:22:ALA:C	1:A:23:LYS:N	10	109.4
(1,37)	1:A:22:ALA:N	1:A:22:ALA:CA	1:A:22:ALA:C	1:A:23:LYS:N	10	109.4
(1,167)	1:A:90:HIS:N	1:A:90:HIS:CA	1:A:90:HIS:C	1:A:91:SER:N	9	109.4
(1,167)	1:A:90:HIS:N	1:A:90:HIS:CA	1:A:90:HIS:C	1:A:91:SER:N	9	109.4
(1,167)	1:A:90:HIS:N	1:A:90:HIS:CA	1:A:90:HIS:C	1:A:91:SER:N	9	109.4
(1,3)	1:A:4:LEU:N	1:A:4:LEU:CA	1:A:4:LEU:C	1:A:5:SER:N	1	109.0
(1,3)	1:A:4:LEU:N	1:A:4:LEU:CA	1:A:4:LEU:C	1:A:5:SER:N	1	109.0
(1,3)	1:A:4:LEU:N	1:A:4:LEU:CA	1:A:4:LEU:C	1:A:5:SER:N	1	109.0
(1,3)	1:A:4:LEU:N	1:A:4:LEU:CA	1:A:4:LEU:C	1:A:5:SER:N	4	108.9

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,3)	1:A:4:LEU:N	1:A:4:LEU:CA	1:A:4:LEU:C	1:A:5:SER:N	4	108.9
(1,3)	1:A:4:LEU:N	1:A:4:LEU:CA	1:A:4:LEU:C	1:A:5:SER:N	4	108.9
(1,69)	1:A:41:SER:N	1:A:41:SER:CA	1:A:41:SER:C	1:A:42:LEU:N	4	108.8
(1,69)	1:A:41:SER:N	1:A:41:SER:CA	1:A:41:SER:C	1:A:42:LEU:N	4	108.8
(1,69)	1:A:41:SER:N	1:A:41:SER:CA	1:A:41:SER:C	1:A:42:LEU:N	4	108.8
(1,61)	1:A:37:ALA:N	1:A:37:ALA:CA	1:A:37:ALA:C	1:A:38:ASN:N	9	108.6
(1,61)	1:A:37:ALA:N	1:A:37:ALA:CA	1:A:37:ALA:C	1:A:38:ASN:N	9	108.6
(1,61)	1:A:37:ALA:N	1:A:37:ALA:CA	1:A:37:ALA:C	1:A:38:ASN:N	9	108.6
(1,185)	1:A:100:LYS:N	1:A:100:LYS:CA	1:A:100:LYS:C	1:A:101:HIS:N	10	108.5
(1,185)	1:A:100:LYS:N	1:A:100:LYS:CA	1:A:100:LYS:C	1:A:101:HIS:N	10	108.5
(1,185)	1:A:100:LYS:N	1:A:100:LYS:CA	1:A:100:LYS:C	1:A:101:HIS:N	10	108.5
(1,143)	1:A:78:ALA:N	1:A:78:ALA:CA	1:A:78:ALA:C	1:A:79:SER:N	6	108.4
(1,143)	1:A:78:ALA:N	1:A:78:ALA:CA	1:A:78:ALA:C	1:A:79:SER:N	6	108.4
(1,143)	1:A:78:ALA:N	1:A:78:ALA:CA	1:A:78:ALA:C	1:A:79:SER:N	6	108.4
(1,143)	1:A:78:ALA:N	1:A:78:ALA:CA	1:A:78:ALA:C	1:A:79:SER:N	2	107.9
(1,143)	1:A:78:ALA:N	1:A:78:ALA:CA	1:A:78:ALA:C	1:A:79:SER:N	2	107.9
(1,143)	1:A:78:ALA:N	1:A:78:ALA:CA	1:A:78:ALA:C	1:A:79:SER:N	2	107.9
(1,143)	1:A:78:ALA:N	1:A:78:ALA:CA	1:A:78:ALA:C	1:A:79:SER:N	9	107.8
(1,143)	1:A:78:ALA:N	1:A:78:ALA:CA	1:A:78:ALA:C	1:A:79:SER:N	9	107.8
(1,143)	1:A:78:ALA:N	1:A:78:ALA:CA	1:A:78:ALA:C	1:A:79:SER:N	9	107.8
(1,113)	1:A:63:ALA:N	1:A:63:ALA:CA	1:A:63:ALA:C	1:A:64:ASN:N	7	107.7
(1,113)	1:A:63:ALA:N	1:A:63:ALA:CA	1:A:63:ALA:C	1:A:64:ASN:N	7	107.7
(1,113)	1:A:63:ALA:N	1:A:63:ALA:CA	1:A:63:ALA:C	1:A:64:ASN:N	7	107.7
(1,3)	1:A:4:LEU:N	1:A:4:LEU:CA	1:A:4:LEU:C	1:A:5:SER:N	7	107.6
(1,3)	1:A:4:LEU:N	1:A:4:LEU:CA	1:A:4:LEU:C	1:A:5:SER:N	7	107.6
(1,3)	1:A:4:LEU:N	1:A:4:LEU:CA	1:A:4:LEU:C	1:A:5:SER:N	7	107.6
(1,171)	1:A:92:LEU:N	1:A:92:LEU:CA	1:A:92:LEU:C	1:A:93:SER:N	4	107.4
(1,171)	1:A:92:LEU:N	1:A:92:LEU:CA	1:A:92:LEU:C	1:A:93:SER:N	4	107.4
(1,171)	1:A:92:LEU:N	1:A:92:LEU:CA	1:A:92:LEU:C	1:A:93:SER:N	4	107.4
(1,63)	1:A:38:ASN:N	1:A:38:ASN:CA	1:A:38:ASN:C	1:A:39:LYS:N	2	107.2
(1,63)	1:A:38:ASN:N	1:A:38:ASN:CA	1:A:38:ASN:C	1:A:39:LYS:N	2	107.2
(1,63)	1:A:38:ASN:N	1:A:38:ASN:CA	1:A:38:ASN:C	1:A:39:LYS:N	2	107.2
(1,3)	1:A:4:LEU:N	1:A:4:LEU:CA	1:A:4:LEU:C	1:A:5:SER:N	10	107.2
(1,3)	1:A:4:LEU:N	1:A:4:LEU:CA	1:A:4:LEU:C	1:A:5:SER:N	10	107.2
(1,3)	1:A:4:LEU:N	1:A:4:LEU:CA	1:A:4:LEU:C	1:A:5:SER:N	10	107.2
(1,143)	1:A:78:ALA:N	1:A:78:ALA:CA	1:A:78:ALA:C	1:A:79:SER:N	4	107.0
(1,143)	1:A:78:ALA:N	1:A:78:ALA:CA	1:A:78:ALA:C	1:A:79:SER:N	4	107.0
(1,143)	1:A:78:ALA:N	1:A:78:ALA:CA	1:A:78:ALA:C	1:A:79:SER:N	4	107.0
(1,113)	1:A:63:ALA:N	1:A:63:ALA:CA	1:A:63:ALA:C	1:A:64:ASN:N	9	107.0
(1,113)	1:A:63:ALA:N	1:A:63:ALA:CA	1:A:63:ALA:C	1:A:64:ASN:N	9	107.0
(1,113)	1:A:63:ALA:N	1:A:63:ALA:CA	1:A:63:ALA:C	1:A:64:ASN:N	9	107.0
(1,69)	1:A:41:SER:N	1:A:41:SER:CA	1:A:41:SER:C	1:A:42:LEU:N	7	106.9
(1,69)	1:A:41:SER:N	1:A:41:SER:CA	1:A:41:SER:C	1:A:42:LEU:N	7	106.9
(1,69)	1:A:41:SER:N	1:A:41:SER:CA	1:A:41:SER:C	1:A:42:LEU:N	7	106.9
(1,113)	1:A:63:ALA:N	1:A:63:ALA:CA	1:A:63:ALA:C	1:A:64:ASN:N	3	106.9
(1,113)	1:A:63:ALA:N	1:A:63:ALA:CA	1:A:63:ALA:C	1:A:64:ASN:N	3	106.9
(1,113)	1:A:63:ALA:N	1:A:63:ALA:CA	1:A:63:ALA:C	1:A:64:ASN:N	3	106.9
(1,171)	1:A:92:LEU:N	1:A:92:LEU:CA	1:A:92:LEU:C	1:A:93:SER:N	2	106.8
(1,171)	1:A:92:LEU:N	1:A:92:LEU:CA	1:A:92:LEU:C	1:A:93:SER:N	2	106.8
(1,171)	1:A:92:LEU:N	1:A:92:LEU:CA	1:A:92:LEU:C	1:A:93:SER:N	2	106.8
(1,69)	1:A:41:SER:N	1:A:41:SER:CA	1:A:41:SER:C	1:A:42:LEU:N	5	106.5

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,69)	1:A:41:SER:N	1:A:41:SER:CA	1:A:41:SER:C	1:A:42:LEU:N	5	106.5
(1,69)	1:A:41:SER:N	1:A:41:SER:CA	1:A:41:SER:C	1:A:42:LEU:N	5	106.5
(1,187)	1:A:101:HIS:N	1:A:101:HIS:CA	1:A:101:HIS:C	1:A:102:HIS:N	5	106.1
(1,187)	1:A:101:HIS:N	1:A:101:HIS:CA	1:A:101:HIS:C	1:A:102:HIS:N	5	106.1
(1,187)	1:A:101:HIS:N	1:A:101:HIS:CA	1:A:101:HIS:C	1:A:102:HIS:N	5	106.1
(1,143)	1:A:78:ALA:N	1:A:78:ALA:CA	1:A:78:ALA:C	1:A:79:SER:N	3	105.8
(1,143)	1:A:78:ALA:N	1:A:78:ALA:CA	1:A:78:ALA:C	1:A:79:SER:N	3	105.8
(1,143)	1:A:78:ALA:N	1:A:78:ALA:CA	1:A:78:ALA:C	1:A:79:SER:N	3	105.8
(1,175)	1:A:94:SER:N	1:A:94:SER:CA	1:A:94:SER:C	1:A:95:TRP:N	10	105.7
(1,175)	1:A:94:SER:N	1:A:94:SER:CA	1:A:94:SER:C	1:A:95:TRP:N	10	105.7
(1,175)	1:A:94:SER:N	1:A:94:SER:CA	1:A:94:SER:C	1:A:95:TRP:N	10	105.7
(1,69)	1:A:41:SER:N	1:A:41:SER:CA	1:A:41:SER:C	1:A:42:LEU:N	9	105.4
(1,69)	1:A:41:SER:N	1:A:41:SER:CA	1:A:41:SER:C	1:A:42:LEU:N	9	105.4
(1,69)	1:A:41:SER:N	1:A:41:SER:CA	1:A:41:SER:C	1:A:42:LEU:N	9	105.4
(1,61)	1:A:37:ALA:N	1:A:37:ALA:CA	1:A:37:ALA:C	1:A:38:ASN:N	1	105.1
(1,61)	1:A:37:ALA:N	1:A:37:ALA:CA	1:A:37:ALA:C	1:A:38:ASN:N	1	105.1
(1,61)	1:A:37:ALA:N	1:A:37:ALA:CA	1:A:37:ALA:C	1:A:38:ASN:N	1	105.1
(1,165)	1:A:89:ALA:N	1:A:89:ALA:CA	1:A:89:ALA:C	1:A:90:HIS:N	10	105.1
(1,165)	1:A:89:ALA:N	1:A:89:ALA:CA	1:A:89:ALA:C	1:A:90:HIS:N	10	105.1
(1,165)	1:A:89:ALA:N	1:A:89:ALA:CA	1:A:89:ALA:C	1:A:90:HIS:N	10	105.1
(1,113)	1:A:63:ALA:N	1:A:63:ALA:CA	1:A:63:ALA:C	1:A:64:ASN:N	6	104.8
(1,113)	1:A:63:ALA:N	1:A:63:ALA:CA	1:A:63:ALA:C	1:A:64:ASN:N	6	104.8
(1,113)	1:A:63:ALA:N	1:A:63:ALA:CA	1:A:63:ALA:C	1:A:64:ASN:N	6	104.8
(1,175)	1:A:94:SER:N	1:A:94:SER:CA	1:A:94:SER:C	1:A:95:TRP:N	1	104.6
(1,175)	1:A:94:SER:N	1:A:94:SER:CA	1:A:94:SER:C	1:A:95:TRP:N	1	104.6
(1,175)	1:A:94:SER:N	1:A:94:SER:CA	1:A:94:SER:C	1:A:95:TRP:N	1	104.6
(1,113)	1:A:63:ALA:N	1:A:63:ALA:CA	1:A:63:ALA:C	1:A:64:ASN:N	8	104.5
(1,113)	1:A:63:ALA:N	1:A:63:ALA:CA	1:A:63:ALA:C	1:A:64:ASN:N	8	104.5
(1,113)	1:A:63:ALA:N	1:A:63:ALA:CA	1:A:63:ALA:C	1:A:64:ASN:N	8	104.5
(1,3)	1:A:4:LEU:N	1:A:4:LEU:CA	1:A:4:LEU:C	1:A:5:SER:N	8	104.2
(1,3)	1:A:4:LEU:N	1:A:4:LEU:CA	1:A:4:LEU:C	1:A:5:SER:N	8	104.2
(1,3)	1:A:4:LEU:N	1:A:4:LEU:CA	1:A:4:LEU:C	1:A:5:SER:N	8	104.2
(1,3)	1:A:4:LEU:N	1:A:4:LEU:CA	1:A:4:LEU:C	1:A:5:SER:N	5	103.7
(1,3)	1:A:4:LEU:N	1:A:4:LEU:CA	1:A:4:LEU:C	1:A:5:SER:N	5	103.7
(1,3)	1:A:4:LEU:N	1:A:4:LEU:CA	1:A:4:LEU:C	1:A:5:SER:N	5	103.7
(1,3)	1:A:4:LEU:N	1:A:4:LEU:CA	1:A:4:LEU:C	1:A:5:SER:N	6	103.7
(1,3)	1:A:4:LEU:N	1:A:4:LEU:CA	1:A:4:LEU:C	1:A:5:SER:N	6	103.7
(1,3)	1:A:4:LEU:N	1:A:4:LEU:CA	1:A:4:LEU:C	1:A:5:SER:N	6	103.7
(1,31)	1:A:19:LYS:N	1:A:19:LYS:CA	1:A:19:LYS:C	1:A:20:ASP:N	10	103.6
(1,31)	1:A:19:LYS:N	1:A:19:LYS:CA	1:A:19:LYS:C	1:A:20:ASP:N	10	103.6
(1,31)	1:A:19:LYS:N	1:A:19:LYS:CA	1:A:19:LYS:C	1:A:20:ASP:N	10	103.6
(1,31)	1:A:19:LYS:N	1:A:19:LYS:CA	1:A:19:LYS:C	1:A:20:ASP:N	8	103.2
(1,31)	1:A:19:LYS:N	1:A:19:LYS:CA	1:A:19:LYS:C	1:A:20:ASP:N	8	103.2
(1,31)	1:A:19:LYS:N	1:A:19:LYS:CA	1:A:19:LYS:C	1:A:20:ASP:N	8	103.2
(1,187)	1:A:101:HIS:N	1:A:101:HIS:CA	1:A:101:HIS:C	1:A:102:HIS:N	9	103.1
(1,187)	1:A:101:HIS:N	1:A:101:HIS:CA	1:A:101:HIS:C	1:A:102:HIS:N	9	103.1
(1,187)	1:A:101:HIS:N	1:A:101:HIS:CA	1:A:101:HIS:C	1:A:102:HIS:N	9	103.1
(1,69)	1:A:41:SER:N	1:A:41:SER:CA	1:A:41:SER:C	1:A:42:LEU:N	1	103.0
(1,69)	1:A:41:SER:N	1:A:41:SER:CA	1:A:41:SER:C	1:A:42:LEU:N	1	103.0
(1,69)	1:A:41:SER:N	1:A:41:SER:CA	1:A:41:SER:C	1:A:42:LEU:N	1	103.0
(1,191)	1:A:103:HIS:N	1:A:103:HIS:CA	1:A:103:HIS:C	1:A:104:HIS:N	8	102.9

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,191)	1:A:103:HIS:N	1:A:103:HIS:CA	1:A:103:HIS:C	1:A:104:HIS:N	8	102.9
(1,191)	1:A:103:HIS:N	1:A:103:HIS:CA	1:A:103:HIS:C	1:A:104:HIS:N	8	102.9
(1,185)	1:A:100:LYS:N	1:A:100:LYS:CA	1:A:100:LYS:C	1:A:101:HIS:N	6	102.8
(1,185)	1:A:100:LYS:N	1:A:100:LYS:CA	1:A:100:LYS:C	1:A:101:HIS:N	6	102.8
(1,185)	1:A:100:LYS:N	1:A:100:LYS:CA	1:A:100:LYS:C	1:A:101:HIS:N	6	102.8
(1,3)	1:A:4:LEU:N	1:A:4:LEU:CA	1:A:4:LEU:C	1:A:5:SER:N	3	102.7
(1,3)	1:A:4:LEU:N	1:A:4:LEU:CA	1:A:4:LEU:C	1:A:5:SER:N	3	102.7
(1,3)	1:A:4:LEU:N	1:A:4:LEU:CA	1:A:4:LEU:C	1:A:5:SER:N	3	102.7
(1,111)	1:A:62:ALA:N	1:A:62:ALA:CA	1:A:62:ALA:C	1:A:63:ALA:N	10	102.4
(1,111)	1:A:62:ALA:N	1:A:62:ALA:CA	1:A:62:ALA:C	1:A:63:ALA:N	10	102.4
(1,111)	1:A:62:ALA:N	1:A:62:ALA:CA	1:A:62:ALA:C	1:A:63:ALA:N	10	102.4
(1,171)	1:A:92:LEU:N	1:A:92:LEU:CA	1:A:92:LEU:C	1:A:93:SER:N	8	102.2
(1,171)	1:A:92:LEU:N	1:A:92:LEU:CA	1:A:92:LEU:C	1:A:93:SER:N	8	102.2
(1,171)	1:A:92:LEU:N	1:A:92:LEU:CA	1:A:92:LEU:C	1:A:93:SER:N	8	102.2
(1,3)	1:A:4:LEU:N	1:A:4:LEU:CA	1:A:4:LEU:C	1:A:5:SER:N	9	101.8
(1,3)	1:A:4:LEU:N	1:A:4:LEU:CA	1:A:4:LEU:C	1:A:5:SER:N	9	101.8
(1,3)	1:A:4:LEU:N	1:A:4:LEU:CA	1:A:4:LEU:C	1:A:5:SER:N	9	101.8
(1,61)	1:A:37:ALA:N	1:A:37:ALA:CA	1:A:37:ALA:C	1:A:38:ASN:N	3	101.5
(1,61)	1:A:37:ALA:N	1:A:37:ALA:CA	1:A:37:ALA:C	1:A:38:ASN:N	3	101.5
(1,61)	1:A:37:ALA:N	1:A:37:ALA:CA	1:A:37:ALA:C	1:A:38:ASN:N	3	101.5
(1,7)	1:A:6:ASN:N	1:A:6:ASN:CA	1:A:6:ASN:C	1:A:7:MET:N	9	101.1
(1,7)	1:A:6:ASN:N	1:A:6:ASN:CA	1:A:6:ASN:C	1:A:7:MET:N	9	101.1
(1,7)	1:A:6:ASN:N	1:A:6:ASN:CA	1:A:6:ASN:C	1:A:7:MET:N	9	101.1
(1,171)	1:A:92:LEU:N	1:A:92:LEU:CA	1:A:92:LEU:C	1:A:93:SER:N	9	100.4
(1,171)	1:A:92:LEU:N	1:A:92:LEU:CA	1:A:92:LEU:C	1:A:93:SER:N	9	100.4
(1,171)	1:A:92:LEU:N	1:A:92:LEU:CA	1:A:92:LEU:C	1:A:93:SER:N	9	100.4
(1,167)	1:A:90:HIS:N	1:A:90:HIS:CA	1:A:90:HIS:C	1:A:91:SER:N	10	100.4
(1,167)	1:A:90:HIS:N	1:A:90:HIS:CA	1:A:90:HIS:C	1:A:91:SER:N	10	100.4
(1,167)	1:A:90:HIS:N	1:A:90:HIS:CA	1:A:90:HIS:C	1:A:91:SER:N	10	100.4
(1,29)	1:A:18:ASN:N	1:A:18:ASN:CA	1:A:18:ASN:C	1:A:19:LYS:N	7	98.4
(1,29)	1:A:18:ASN:N	1:A:18:ASN:CA	1:A:18:ASN:C	1:A:19:LYS:N	7	98.4
(1,29)	1:A:18:ASN:N	1:A:18:ASN:CA	1:A:18:ASN:C	1:A:19:LYS:N	7	98.4
(1,69)	1:A:41:SER:N	1:A:41:SER:CA	1:A:41:SER:C	1:A:42:LEU:N	8	98.1
(1,69)	1:A:41:SER:N	1:A:41:SER:CA	1:A:41:SER:C	1:A:42:LEU:N	8	98.1
(1,69)	1:A:41:SER:N	1:A:41:SER:CA	1:A:41:SER:C	1:A:42:LEU:N	8	98.1
(1,19)	1:A:12:LEU:N	1:A:12:LEU:CA	1:A:12:LEU:C	1:A:13:GLY:N	6	97.8
(1,19)	1:A:12:LEU:N	1:A:12:LEU:CA	1:A:12:LEU:C	1:A:13:GLY:N	6	97.8
(1,19)	1:A:12:LEU:N	1:A:12:LEU:CA	1:A:12:LEU:C	1:A:13:GLY:N	6	97.8
(1,147)	1:A:80:ALA:N	1:A:80:ALA:CA	1:A:80:ALA:C	1:A:81:LYS:N	4	97.4
(1,147)	1:A:80:ALA:N	1:A:80:ALA:CA	1:A:80:ALA:C	1:A:81:LYS:N	4	97.4
(1,147)	1:A:80:ALA:N	1:A:80:ALA:CA	1:A:80:ALA:C	1:A:81:LYS:N	4	97.4
(1,7)	1:A:6:ASN:N	1:A:6:ASN:CA	1:A:6:ASN:C	1:A:7:MET:N	1	97.0
(1,7)	1:A:6:ASN:N	1:A:6:ASN:CA	1:A:6:ASN:C	1:A:7:MET:N	1	97.0
(1,7)	1:A:6:ASN:N	1:A:6:ASN:CA	1:A:6:ASN:C	1:A:7:MET:N	1	97.0
(1,29)	1:A:18:ASN:N	1:A:18:ASN:CA	1:A:18:ASN:C	1:A:19:LYS:N	4	96.8
(1,29)	1:A:18:ASN:N	1:A:18:ASN:CA	1:A:18:ASN:C	1:A:19:LYS:N	4	96.8
(1,29)	1:A:18:ASN:N	1:A:18:ASN:CA	1:A:18:ASN:C	1:A:19:LYS:N	4	96.8
(1,191)	1:A:103:HIS:N	1:A:103:HIS:CA	1:A:103:HIS:C	1:A:104:HIS:N	2	96.7
(1,191)	1:A:103:HIS:N	1:A:103:HIS:CA	1:A:103:HIS:C	1:A:104:HIS:N	2	96.7
(1,191)	1:A:103:HIS:N	1:A:103:HIS:CA	1:A:103:HIS:C	1:A:104:HIS:N	2	96.7
(1,175)	1:A:94:SER:N	1:A:94:SER:CA	1:A:94:SER:C	1:A:95:TRP:N	9	96.1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,175)	1:A:94:SER:N	1:A:94:SER:CA	1:A:94:SER:C	1:A:95:TRP:N	9	96.1
(1,175)	1:A:94:SER:N	1:A:94:SER:CA	1:A:94:SER:C	1:A:95:TRP:N	9	96.1
(1,61)	1:A:37:ALA:N	1:A:37:ALA:CA	1:A:37:ALA:C	1:A:38:ASN:N	5	95.7
(1,61)	1:A:37:ALA:N	1:A:37:ALA:CA	1:A:37:ALA:C	1:A:38:ASN:N	5	95.7
(1,61)	1:A:37:ALA:N	1:A:37:ALA:CA	1:A:37:ALA:C	1:A:38:ASN:N	5	95.7
(1,25)	1:A:16:SER:N	1:A:16:SER:CA	1:A:16:SER:C	1:A:17:GLN:N	2	95.2
(1,25)	1:A:16:SER:N	1:A:16:SER:CA	1:A:16:SER:C	1:A:17:GLN:N	2	95.2
(1,25)	1:A:16:SER:N	1:A:16:SER:CA	1:A:16:SER:C	1:A:17:GLN:N	2	95.2
(1,61)	1:A:37:ALA:N	1:A:37:ALA:CA	1:A:37:ALA:C	1:A:38:ASN:N	6	94.8
(1,61)	1:A:37:ALA:N	1:A:37:ALA:CA	1:A:37:ALA:C	1:A:38:ASN:N	6	94.8
(1,61)	1:A:37:ALA:N	1:A:37:ALA:CA	1:A:37:ALA:C	1:A:38:ASN:N	6	94.8
(1,165)	1:A:89:ALA:N	1:A:89:ALA:CA	1:A:89:ALA:C	1:A:90:HIS:N	9	94.2
(1,165)	1:A:89:ALA:N	1:A:89:ALA:CA	1:A:89:ALA:C	1:A:90:HIS:N	9	94.2
(1,165)	1:A:89:ALA:N	1:A:89:ALA:CA	1:A:89:ALA:C	1:A:90:HIS:N	9	94.2
(1,7)	1:A:6:ASN:N	1:A:6:ASN:CA	1:A:6:ASN:C	1:A:7:MET:N	3	94.0
(1,7)	1:A:6:ASN:N	1:A:6:ASN:CA	1:A:6:ASN:C	1:A:7:MET:N	3	94.0
(1,7)	1:A:6:ASN:N	1:A:6:ASN:CA	1:A:6:ASN:C	1:A:7:MET:N	3	94.0
(1,7)	1:A:6:ASN:N	1:A:6:ASN:CA	1:A:6:ASN:C	1:A:7:MET:N	2	92.3
(1,7)	1:A:6:ASN:N	1:A:6:ASN:CA	1:A:6:ASN:C	1:A:7:MET:N	2	92.3
(1,7)	1:A:6:ASN:N	1:A:6:ASN:CA	1:A:6:ASN:C	1:A:7:MET:N	2	92.3
(1,7)	1:A:6:ASN:N	1:A:6:ASN:CA	1:A:6:ASN:C	1:A:7:MET:N	7	91.6
(1,7)	1:A:6:ASN:N	1:A:6:ASN:CA	1:A:6:ASN:C	1:A:7:MET:N	7	91.6
(1,7)	1:A:6:ASN:N	1:A:6:ASN:CA	1:A:6:ASN:C	1:A:7:MET:N	7	91.6
(1,171)	1:A:92:LEU:N	1:A:92:LEU:CA	1:A:92:LEU:C	1:A:93:SER:N	6	91.1
(1,171)	1:A:92:LEU:N	1:A:92:LEU:CA	1:A:92:LEU:C	1:A:93:SER:N	6	91.1
(1,171)	1:A:92:LEU:N	1:A:92:LEU:CA	1:A:92:LEU:C	1:A:93:SER:N	6	91.1
(1,29)	1:A:18:ASN:N	1:A:18:ASN:CA	1:A:18:ASN:C	1:A:19:LYS:N	3	90.6
(1,29)	1:A:18:ASN:N	1:A:18:ASN:CA	1:A:18:ASN:C	1:A:19:LYS:N	3	90.6
(1,29)	1:A:18:ASN:N	1:A:18:ASN:CA	1:A:18:ASN:C	1:A:19:LYS:N	3	90.6
(1,7)	1:A:6:ASN:N	1:A:6:ASN:CA	1:A:6:ASN:C	1:A:7:MET:N	8	90.2
(1,7)	1:A:6:ASN:N	1:A:6:ASN:CA	1:A:6:ASN:C	1:A:7:MET:N	8	90.2
(1,7)	1:A:6:ASN:N	1:A:6:ASN:CA	1:A:6:ASN:C	1:A:7:MET:N	8	90.2
(1,185)	1:A:100:LYS:N	1:A:100:LYS:CA	1:A:100:LYS:C	1:A:101:HIS:N	5	87.7
(1,185)	1:A:100:LYS:N	1:A:100:LYS:CA	1:A:100:LYS:C	1:A:101:HIS:N	5	87.7
(1,185)	1:A:100:LYS:N	1:A:100:LYS:CA	1:A:100:LYS:C	1:A:101:HIS:N	5	87.7
(1,185)	1:A:100:LYS:N	1:A:100:LYS:CA	1:A:100:LYS:C	1:A:101:HIS:N	7	87.6
(1,185)	1:A:100:LYS:N	1:A:100:LYS:CA	1:A:100:LYS:C	1:A:101:HIS:N	7	87.6
(1,185)	1:A:100:LYS:N	1:A:100:LYS:CA	1:A:100:LYS:C	1:A:101:HIS:N	7	87.6
(1,7)	1:A:6:ASN:N	1:A:6:ASN:CA	1:A:6:ASN:C	1:A:7:MET:N	6	86.0
(1,7)	1:A:6:ASN:N	1:A:6:ASN:CA	1:A:6:ASN:C	1:A:7:MET:N	6	86.0
(1,7)	1:A:6:ASN:N	1:A:6:ASN:CA	1:A:6:ASN:C	1:A:7:MET:N	6	86.0
(1,179)	1:A:97:ALA:N	1:A:97:ALA:CA	1:A:97:ALA:C	1:A:98:GLU:N	9	86.0
(1,179)	1:A:97:ALA:N	1:A:97:ALA:CA	1:A:97:ALA:C	1:A:98:GLU:N	9	86.0
(1,179)	1:A:97:ALA:N	1:A:97:ALA:CA	1:A:97:ALA:C	1:A:98:GLU:N	9	86.0
(1,61)	1:A:37:ALA:N	1:A:37:ALA:CA	1:A:37:ALA:C	1:A:38:ASN:N	8	85.7
(1,61)	1:A:37:ALA:N	1:A:37:ALA:CA	1:A:37:ALA:C	1:A:38:ASN:N	8	85.7
(1,61)	1:A:37:ALA:N	1:A:37:ALA:CA	1:A:37:ALA:C	1:A:38:ASN:N	8	85.7
(1,7)	1:A:6:ASN:N	1:A:6:ASN:CA	1:A:6:ASN:C	1:A:7:MET:N	5	85.6
(1,7)	1:A:6:ASN:N	1:A:6:ASN:CA	1:A:6:ASN:C	1:A:7:MET:N	5	85.6
(1,7)	1:A:6:ASN:N	1:A:6:ASN:CA	1:A:6:ASN:C	1:A:7:MET:N	5	85.6
(1,175)	1:A:94:SER:N	1:A:94:SER:CA	1:A:94:SER:C	1:A:95:TRP:N	4	82.4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,175)	1:A:94:SER:N	1:A:94:SER:CA	1:A:94:SER:C	1:A:95:TRP:N	4	82.4
(1,175)	1:A:94:SER:N	1:A:94:SER:CA	1:A:94:SER:C	1:A:95:TRP:N	4	82.4
(1,7)	1:A:6:ASN:N	1:A:6:ASN:CA	1:A:6:ASN:C	1:A:7:MET:N	4	81.6
(1,7)	1:A:6:ASN:N	1:A:6:ASN:CA	1:A:6:ASN:C	1:A:7:MET:N	4	81.6
(1,7)	1:A:6:ASN:N	1:A:6:ASN:CA	1:A:6:ASN:C	1:A:7:MET:N	4	81.6
(1,195)	1:A:105:HIS:N	1:A:105:HIS:CA	1:A:105:HIS:C	1:A:106:HIS:N	5	81.4
(1,195)	1:A:105:HIS:N	1:A:105:HIS:CA	1:A:105:HIS:C	1:A:106:HIS:N	5	81.4
(1,195)	1:A:105:HIS:N	1:A:105:HIS:CA	1:A:105:HIS:C	1:A:106:HIS:N	5	81.4
(1,175)	1:A:94:SER:N	1:A:94:SER:CA	1:A:94:SER:C	1:A:95:TRP:N	7	80.9
(1,175)	1:A:94:SER:N	1:A:94:SER:CA	1:A:94:SER:C	1:A:95:TRP:N	7	80.9
(1,175)	1:A:94:SER:N	1:A:94:SER:CA	1:A:94:SER:C	1:A:95:TRP:N	7	80.9
(1,193)	1:A:104:HIS:N	1:A:104:HIS:CA	1:A:104:HIS:C	1:A:105:HIS:N	7	78.8
(1,193)	1:A:104:HIS:N	1:A:104:HIS:CA	1:A:104:HIS:C	1:A:105:HIS:N	7	78.8
(1,193)	1:A:104:HIS:N	1:A:104:HIS:CA	1:A:104:HIS:C	1:A:105:HIS:N	7	78.8
(1,179)	1:A:97:ALA:N	1:A:97:ALA:CA	1:A:97:ALA:C	1:A:98:GLU:N	6	77.7
(1,179)	1:A:97:ALA:N	1:A:97:ALA:CA	1:A:97:ALA:C	1:A:98:GLU:N	6	77.7
(1,179)	1:A:97:ALA:N	1:A:97:ALA:CA	1:A:97:ALA:C	1:A:98:GLU:N	6	77.7
(1,147)	1:A:80:ALA:N	1:A:80:ALA:CA	1:A:80:ALA:C	1:A:81:LYS:N	9	77.5
(1,147)	1:A:80:ALA:N	1:A:80:ALA:CA	1:A:80:ALA:C	1:A:81:LYS:N	9	77.5
(1,147)	1:A:80:ALA:N	1:A:80:ALA:CA	1:A:80:ALA:C	1:A:81:LYS:N	9	77.5
(1,175)	1:A:94:SER:N	1:A:94:SER:CA	1:A:94:SER:C	1:A:95:TRP:N	6	76.0
(1,175)	1:A:94:SER:N	1:A:94:SER:CA	1:A:94:SER:C	1:A:95:TRP:N	6	76.0
(1,175)	1:A:94:SER:N	1:A:94:SER:CA	1:A:94:SER:C	1:A:95:TRP:N	6	76.0
(1,179)	1:A:97:ALA:N	1:A:97:ALA:CA	1:A:97:ALA:C	1:A:98:GLU:N	7	74.1
(1,179)	1:A:97:ALA:N	1:A:97:ALA:CA	1:A:97:ALA:C	1:A:98:GLU:N	7	74.1
(1,179)	1:A:97:ALA:N	1:A:97:ALA:CA	1:A:97:ALA:C	1:A:98:GLU:N	7	74.1
(1,147)	1:A:80:ALA:N	1:A:80:ALA:CA	1:A:80:ALA:C	1:A:81:LYS:N	6	73.6
(1,147)	1:A:80:ALA:N	1:A:80:ALA:CA	1:A:80:ALA:C	1:A:81:LYS:N	6	73.6
(1,147)	1:A:80:ALA:N	1:A:80:ALA:CA	1:A:80:ALA:C	1:A:81:LYS:N	6	73.6
(1,6)	1:A:5:SER:C	1:A:6:ASN:N	1:A:6:ASN:CA	1:A:6:ASN:C	10	72.8
(1,6)	1:A:5:SER:C	1:A:6:ASN:N	1:A:6:ASN:CA	1:A:6:ASN:C	10	72.8
(1,6)	1:A:5:SER:C	1:A:6:ASN:N	1:A:6:ASN:CA	1:A:6:ASN:C	10	72.8
(1,175)	1:A:94:SER:N	1:A:94:SER:CA	1:A:94:SER:C	1:A:95:TRP:N	3	72.2
(1,175)	1:A:94:SER:N	1:A:94:SER:CA	1:A:94:SER:C	1:A:95:TRP:N	3	72.2
(1,175)	1:A:94:SER:N	1:A:94:SER:CA	1:A:94:SER:C	1:A:95:TRP:N	3	72.2
(1,147)	1:A:80:ALA:N	1:A:80:ALA:CA	1:A:80:ALA:C	1:A:81:LYS:N	10	70.9
(1,147)	1:A:80:ALA:N	1:A:80:ALA:CA	1:A:80:ALA:C	1:A:81:LYS:N	10	70.9
(1,147)	1:A:80:ALA:N	1:A:80:ALA:CA	1:A:80:ALA:C	1:A:81:LYS:N	10	70.9
(1,175)	1:A:94:SER:N	1:A:94:SER:CA	1:A:94:SER:C	1:A:95:TRP:N	2	68.3
(1,175)	1:A:94:SER:N	1:A:94:SER:CA	1:A:94:SER:C	1:A:95:TRP:N	2	68.3
(1,175)	1:A:94:SER:N	1:A:94:SER:CA	1:A:94:SER:C	1:A:95:TRP:N	2	68.3
(1,193)	1:A:104:HIS:N	1:A:104:HIS:CA	1:A:104:HIS:C	1:A:105:HIS:N	3	67.3
(1,193)	1:A:104:HIS:N	1:A:104:HIS:CA	1:A:104:HIS:C	1:A:105:HIS:N	3	67.3
(1,193)	1:A:104:HIS:N	1:A:104:HIS:CA	1:A:104:HIS:C	1:A:105:HIS:N	3	67.3
(1,175)	1:A:94:SER:N	1:A:94:SER:CA	1:A:94:SER:C	1:A:95:TRP:N	8	66.3
(1,175)	1:A:94:SER:N	1:A:94:SER:CA	1:A:94:SER:C	1:A:95:TRP:N	8	66.3
(1,175)	1:A:94:SER:N	1:A:94:SER:CA	1:A:94:SER:C	1:A:95:TRP:N	8	66.3
(1,191)	1:A:103:HIS:N	1:A:103:HIS:CA	1:A:103:HIS:C	1:A:104:HIS:N	6	63.2
(1,191)	1:A:103:HIS:N	1:A:103:HIS:CA	1:A:103:HIS:C	1:A:104:HIS:N	6	63.2
(1,191)	1:A:103:HIS:N	1:A:103:HIS:CA	1:A:103:HIS:C	1:A:104:HIS:N	6	63.2
(1,147)	1:A:80:ALA:N	1:A:80:ALA:CA	1:A:80:ALA:C	1:A:81:LYS:N	8	62.9

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,147)	1:A:80:ALA:N	1:A:80:ALA:CA	1:A:80:ALA:C	1:A:81:LYS:N	8	62.9
(1,147)	1:A:80:ALA:N	1:A:80:ALA:CA	1:A:80:ALA:C	1:A:81:LYS:N	8	62.9
(1,179)	1:A:97:ALA:N	1:A:97:ALA:CA	1:A:97:ALA:C	1:A:98:GLU:N	4	62.5
(1,179)	1:A:97:ALA:N	1:A:97:ALA:CA	1:A:97:ALA:C	1:A:98:GLU:N	4	62.5
(1,179)	1:A:97:ALA:N	1:A:97:ALA:CA	1:A:97:ALA:C	1:A:98:GLU:N	4	62.5
(1,147)	1:A:80:ALA:N	1:A:80:ALA:CA	1:A:80:ALA:C	1:A:81:LYS:N	2	62.5
(1,147)	1:A:80:ALA:N	1:A:80:ALA:CA	1:A:80:ALA:C	1:A:81:LYS:N	2	62.5
(1,147)	1:A:80:ALA:N	1:A:80:ALA:CA	1:A:80:ALA:C	1:A:81:LYS:N	2	62.5
(1,147)	1:A:80:ALA:N	1:A:80:ALA:CA	1:A:80:ALA:C	1:A:81:LYS:N	1	62.2
(1,147)	1:A:80:ALA:N	1:A:80:ALA:CA	1:A:80:ALA:C	1:A:81:LYS:N	1	62.2
(1,147)	1:A:80:ALA:N	1:A:80:ALA:CA	1:A:80:ALA:C	1:A:81:LYS:N	1	62.2
(1,1)	1:A:1:MET:N	1:A:1:MET:CA	1:A:1:MET:C	1:A:2:LYS:N	10	62.1
(1,1)	1:A:1:MET:N	1:A:1:MET:CA	1:A:1:MET:C	1:A:2:LYS:N	10	62.1
(1,1)	1:A:1:MET:N	1:A:1:MET:CA	1:A:1:MET:C	1:A:2:LYS:N	10	62.1
(1,1)	1:A:1:MET:N	1:A:1:MET:CA	1:A:1:MET:C	1:A:2:LYS:N	10	62.1
(1,93)	1:A:53:MET:N	1:A:53:MET:CA	1:A:53:MET:C	1:A:54:SER:N	5	60.2
(1,93)	1:A:53:MET:N	1:A:53:MET:CA	1:A:53:MET:C	1:A:54:SER:N	5	60.2
(1,93)	1:A:53:MET:N	1:A:53:MET:CA	1:A:53:MET:C	1:A:54:SER:N	5	60.2
(1,93)	1:A:53:MET:N	1:A:53:MET:CA	1:A:53:MET:C	1:A:54:SER:N	2	60.0
(1,93)	1:A:53:MET:N	1:A:53:MET:CA	1:A:53:MET:C	1:A:54:SER:N	2	60.0
(1,93)	1:A:53:MET:N	1:A:53:MET:CA	1:A:53:MET:C	1:A:54:SER:N	2	60.0
(1,179)	1:A:97:ALA:N	1:A:97:ALA:CA	1:A:97:ALA:C	1:A:98:GLU:N	3	59.8
(1,179)	1:A:97:ALA:N	1:A:97:ALA:CA	1:A:97:ALA:C	1:A:98:GLU:N	3	59.8
(1,179)	1:A:97:ALA:N	1:A:97:ALA:CA	1:A:97:ALA:C	1:A:98:GLU:N	3	59.8
(1,187)	1:A:101:HIS:N	1:A:101:HIS:CA	1:A:101:HIS:C	1:A:102:HIS:N	2	59.7
(1,187)	1:A:101:HIS:N	1:A:101:HIS:CA	1:A:101:HIS:C	1:A:102:HIS:N	2	59.7
(1,187)	1:A:101:HIS:N	1:A:101:HIS:CA	1:A:101:HIS:C	1:A:102:HIS:N	2	59.7
(1,187)	1:A:101:HIS:N	1:A:101:HIS:CA	1:A:101:HIS:C	1:A:102:HIS:N	3	59.1
(1,187)	1:A:101:HIS:N	1:A:101:HIS:CA	1:A:101:HIS:C	1:A:102:HIS:N	3	59.1
(1,187)	1:A:101:HIS:N	1:A:101:HIS:CA	1:A:101:HIS:C	1:A:102:HIS:N	3	59.1
(1,93)	1:A:53:MET:N	1:A:53:MET:CA	1:A:53:MET:C	1:A:54:SER:N	4	58.6
(1,93)	1:A:53:MET:N	1:A:53:MET:CA	1:A:53:MET:C	1:A:54:SER:N	4	58.6
(1,93)	1:A:53:MET:N	1:A:53:MET:CA	1:A:53:MET:C	1:A:54:SER:N	4	58.6
(1,93)	1:A:53:MET:N	1:A:53:MET:CA	1:A:53:MET:C	1:A:54:SER:N	3	58.1
(1,93)	1:A:53:MET:N	1:A:53:MET:CA	1:A:53:MET:C	1:A:54:SER:N	3	58.1
(1,93)	1:A:53:MET:N	1:A:53:MET:CA	1:A:53:MET:C	1:A:54:SER:N	3	58.1
(1,93)	1:A:53:MET:N	1:A:53:MET:CA	1:A:53:MET:C	1:A:54:SER:N	8	57.7
(1,93)	1:A:53:MET:N	1:A:53:MET:CA	1:A:53:MET:C	1:A:54:SER:N	8	57.7
(1,93)	1:A:53:MET:N	1:A:53:MET:CA	1:A:53:MET:C	1:A:54:SER:N	8	57.7
(1,93)	1:A:53:MET:N	1:A:53:MET:CA	1:A:53:MET:C	1:A:54:SER:N	9	57.0
(1,93)	1:A:53:MET:N	1:A:53:MET:CA	1:A:53:MET:C	1:A:54:SER:N	9	57.0
(1,93)	1:A:53:MET:N	1:A:53:MET:CA	1:A:53:MET:C	1:A:54:SER:N	9	57.0
(1,187)	1:A:101:HIS:N	1:A:101:HIS:CA	1:A:101:HIS:C	1:A:102:HIS:N	8	56.5
(1,187)	1:A:101:HIS:N	1:A:101:HIS:CA	1:A:101:HIS:C	1:A:102:HIS:N	8	56.5
(1,187)	1:A:101:HIS:N	1:A:101:HIS:CA	1:A:101:HIS:C	1:A:102:HIS:N	8	56.5
(1,1)	1:A:1:MET:N	1:A:1:MET:CA	1:A:1:MET:C	1:A:2:LYS:N	7	56.0
(1,1)	1:A:1:MET:N	1:A:1:MET:CA	1:A:1:MET:C	1:A:2:LYS:N	7	56.0
(1,1)	1:A:1:MET:N	1:A:1:MET:CA	1:A:1:MET:C	1:A:2:LYS:N	7	56.0
(1,1)	1:A:1:MET:N	1:A:1:MET:CA	1:A:1:MET:C	1:A:2:LYS:N	7	56.0
(1,188)	1:A:101:HIS:C	1:A:102:HIS:N	1:A:102:HIS:CA	1:A:102:HIS:C	10	54.7
(1,188)	1:A:101:HIS:C	1:A:102:HIS:N	1:A:102:HIS:CA	1:A:102:HIS:C	10	54.7

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,188)	1:A:101:HIS:C	1:A:102:HIS:N	1:A:102:HIS:CA	1:A:102:HIS:C	10	54.7
(1,93)	1:A:53:MET:N	1:A:53:MET:CA	1:A:53:MET:C	1:A:54:SER:N	6	54.5
(1,93)	1:A:53:MET:N	1:A:53:MET:CA	1:A:53:MET:C	1:A:54:SER:N	6	54.5
(1,93)	1:A:53:MET:N	1:A:53:MET:CA	1:A:53:MET:C	1:A:54:SER:N	6	54.5
(1,115)	1:A:64:ASN:N	1:A:64:ASN:CA	1:A:64:ASN:C	1:A:65:VAL:N	4	53.4
(1,115)	1:A:64:ASN:N	1:A:64:ASN:CA	1:A:64:ASN:C	1:A:65:VAL:N	4	53.4
(1,115)	1:A:64:ASN:N	1:A:64:ASN:CA	1:A:64:ASN:C	1:A:65:VAL:N	4	53.4
(1,183)	1:A:99:VAL:N	1:A:99:VAL:CA	1:A:99:VAL:C	1:A:100:LYS:N	4	52.5
(1,183)	1:A:99:VAL:N	1:A:99:VAL:CA	1:A:99:VAL:C	1:A:100:LYS:N	4	52.5
(1,183)	1:A:99:VAL:N	1:A:99:VAL:CA	1:A:99:VAL:C	1:A:100:LYS:N	4	52.5
(1,178)	1:A:96:GLY:C	1:A:97:ALA:N	1:A:97:ALA:CA	1:A:97:ALA:C	7	52.2
(1,178)	1:A:96:GLY:C	1:A:97:ALA:N	1:A:97:ALA:CA	1:A:97:ALA:C	7	52.2
(1,178)	1:A:96:GLY:C	1:A:97:ALA:N	1:A:97:ALA:CA	1:A:97:ALA:C	7	52.2
(1,56)	1:A:33:LEU:C	1:A:34:THR:N	1:A:34:THR:CA	1:A:34:THR:C	6	51.1
(1,56)	1:A:33:LEU:C	1:A:34:THR:N	1:A:34:THR:CA	1:A:34:THR:C	6	51.1
(1,56)	1:A:33:LEU:C	1:A:34:THR:N	1:A:34:THR:CA	1:A:34:THR:C	6	51.1
(1,115)	1:A:64:ASN:N	1:A:64:ASN:CA	1:A:64:ASN:C	1:A:65:VAL:N	2	51.1
(1,115)	1:A:64:ASN:N	1:A:64:ASN:CA	1:A:64:ASN:C	1:A:65:VAL:N	2	51.1
(1,115)	1:A:64:ASN:N	1:A:64:ASN:CA	1:A:64:ASN:C	1:A:65:VAL:N	2	51.1
(1,115)	1:A:64:ASN:N	1:A:64:ASN:CA	1:A:64:ASN:C	1:A:65:VAL:N	6	51.0
(1,115)	1:A:64:ASN:N	1:A:64:ASN:CA	1:A:64:ASN:C	1:A:65:VAL:N	6	51.0
(1,115)	1:A:64:ASN:N	1:A:64:ASN:CA	1:A:64:ASN:C	1:A:65:VAL:N	6	51.0
(1,115)	1:A:64:ASN:N	1:A:64:ASN:CA	1:A:64:ASN:C	1:A:65:VAL:N	6	51.0
(1,93)	1:A:53:MET:N	1:A:53:MET:CA	1:A:53:MET:C	1:A:54:SER:N	7	50.6
(1,93)	1:A:53:MET:N	1:A:53:MET:CA	1:A:53:MET:C	1:A:54:SER:N	7	50.6
(1,93)	1:A:53:MET:N	1:A:53:MET:CA	1:A:53:MET:C	1:A:54:SER:N	7	50.6
(1,115)	1:A:64:ASN:N	1:A:64:ASN:CA	1:A:64:ASN:C	1:A:65:VAL:N	1	50.3
(1,115)	1:A:64:ASN:N	1:A:64:ASN:CA	1:A:64:ASN:C	1:A:65:VAL:N	1	50.3
(1,115)	1:A:64:ASN:N	1:A:64:ASN:CA	1:A:64:ASN:C	1:A:65:VAL:N	1	50.3
(1,115)	1:A:64:ASN:N	1:A:64:ASN:CA	1:A:64:ASN:C	1:A:65:VAL:N	9	49.6
(1,115)	1:A:64:ASN:N	1:A:64:ASN:CA	1:A:64:ASN:C	1:A:65:VAL:N	9	49.6
(1,115)	1:A:64:ASN:N	1:A:64:ASN:CA	1:A:64:ASN:C	1:A:65:VAL:N	9	49.6
(1,56)	1:A:33:LEU:C	1:A:34:THR:N	1:A:34:THR:CA	1:A:34:THR:C	5	49.4
(1,56)	1:A:33:LEU:C	1:A:34:THR:N	1:A:34:THR:CA	1:A:34:THR:C	5	49.4
(1,56)	1:A:33:LEU:C	1:A:34:THR:N	1:A:34:THR:CA	1:A:34:THR:C	5	49.4
(1,115)	1:A:64:ASN:N	1:A:64:ASN:CA	1:A:64:ASN:C	1:A:65:VAL:N	5	49.4
(1,115)	1:A:64:ASN:N	1:A:64:ASN:CA	1:A:64:ASN:C	1:A:65:VAL:N	5	49.4
(1,115)	1:A:64:ASN:N	1:A:64:ASN:CA	1:A:64:ASN:C	1:A:65:VAL:N	5	49.4
(1,115)	1:A:64:ASN:N	1:A:64:ASN:CA	1:A:64:ASN:C	1:A:65:VAL:N	3	48.9
(1,115)	1:A:64:ASN:N	1:A:64:ASN:CA	1:A:64:ASN:C	1:A:65:VAL:N	3	48.9
(1,115)	1:A:64:ASN:N	1:A:64:ASN:CA	1:A:64:ASN:C	1:A:65:VAL:N	3	48.9
(1,115)	1:A:64:ASN:N	1:A:64:ASN:CA	1:A:64:ASN:C	1:A:65:VAL:N	7	48.8
(1,115)	1:A:64:ASN:N	1:A:64:ASN:CA	1:A:64:ASN:C	1:A:65:VAL:N	7	48.8
(1,115)	1:A:64:ASN:N	1:A:64:ASN:CA	1:A:64:ASN:C	1:A:65:VAL:N	7	48.8
(1,59)	1:A:36:SER:N	1:A:36:SER:CA	1:A:36:SER:C	1:A:37:ALA:N	3	48.3
(1,59)	1:A:36:SER:N	1:A:36:SER:CA	1:A:36:SER:C	1:A:37:ALA:N	3	48.3
(1,59)	1:A:36:SER:N	1:A:36:SER:CA	1:A:36:SER:C	1:A:37:ALA:N	3	48.3
(1,179)	1:A:97:ALA:N	1:A:97:ALA:CA	1:A:97:ALA:C	1:A:98:GLU:N	10	48.1
(1,179)	1:A:97:ALA:N	1:A:97:ALA:CA	1:A:97:ALA:C	1:A:98:GLU:N	10	48.1
(1,179)	1:A:97:ALA:N	1:A:97:ALA:CA	1:A:97:ALA:C	1:A:98:GLU:N	10	48.1
(1,115)	1:A:64:ASN:N	1:A:64:ASN:CA	1:A:64:ASN:C	1:A:65:VAL:N	8	48.0
(1,115)	1:A:64:ASN:N	1:A:64:ASN:CA	1:A:64:ASN:C	1:A:65:VAL:N	8	48.0

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,115)	1:A:64:ASN:N	1:A:64:ASN:CA	1:A:64:ASN:C	1:A:65:VAL:N	8	48.0
(1,93)	1:A:53:MET:N	1:A:53:MET:CA	1:A:53:MET:C	1:A:54:SER:N	1	47.1
(1,93)	1:A:53:MET:N	1:A:53:MET:CA	1:A:53:MET:C	1:A:54:SER:N	1	47.1
(1,93)	1:A:53:MET:N	1:A:53:MET:CA	1:A:53:MET:C	1:A:54:SER:N	1	47.1
(1,93)	1:A:53:MET:N	1:A:53:MET:CA	1:A:53:MET:C	1:A:54:SER:N	10	45.8
(1,93)	1:A:53:MET:N	1:A:53:MET:CA	1:A:53:MET:C	1:A:54:SER:N	10	45.8
(1,93)	1:A:53:MET:N	1:A:53:MET:CA	1:A:53:MET:C	1:A:54:SER:N	10	45.8
(1,115)	1:A:64:ASN:N	1:A:64:ASN:CA	1:A:64:ASN:C	1:A:65:VAL:N	10	45.2
(1,115)	1:A:64:ASN:N	1:A:64:ASN:CA	1:A:64:ASN:C	1:A:65:VAL:N	10	45.2
(1,115)	1:A:64:ASN:N	1:A:64:ASN:CA	1:A:64:ASN:C	1:A:65:VAL:N	10	45.2
(1,179)	1:A:97:ALA:N	1:A:97:ALA:CA	1:A:97:ALA:C	1:A:98:GLU:N	5	45.1
(1,179)	1:A:97:ALA:N	1:A:97:ALA:CA	1:A:97:ALA:C	1:A:98:GLU:N	5	45.1
(1,179)	1:A:97:ALA:N	1:A:97:ALA:CA	1:A:97:ALA:C	1:A:98:GLU:N	5	45.1
(1,30)	1:A:18:ASN:C	1:A:19:LYS:N	1:A:19:LYS:CA	1:A:19:LYS:C	4	44.1
(1,30)	1:A:18:ASN:C	1:A:19:LYS:N	1:A:19:LYS:CA	1:A:19:LYS:C	4	44.1
(1,30)	1:A:18:ASN:C	1:A:19:LYS:N	1:A:19:LYS:CA	1:A:19:LYS:C	4	44.1
(1,179)	1:A:97:ALA:N	1:A:97:ALA:CA	1:A:97:ALA:C	1:A:98:GLU:N	1	42.5
(1,179)	1:A:97:ALA:N	1:A:97:ALA:CA	1:A:97:ALA:C	1:A:98:GLU:N	1	42.5
(1,179)	1:A:97:ALA:N	1:A:97:ALA:CA	1:A:97:ALA:C	1:A:98:GLU:N	1	42.5
(1,30)	1:A:18:ASN:C	1:A:19:LYS:N	1:A:19:LYS:CA	1:A:19:LYS:C	7	41.9
(1,30)	1:A:18:ASN:C	1:A:19:LYS:N	1:A:19:LYS:CA	1:A:19:LYS:C	7	41.9
(1,30)	1:A:18:ASN:C	1:A:19:LYS:N	1:A:19:LYS:CA	1:A:19:LYS:C	7	41.9
(1,187)	1:A:101:HIS:N	1:A:101:HIS:CA	1:A:101:HIS:C	1:A:102:HIS:N	1	40.4
(1,187)	1:A:101:HIS:N	1:A:101:HIS:CA	1:A:101:HIS:C	1:A:102:HIS:N	1	40.4
(1,187)	1:A:101:HIS:N	1:A:101:HIS:CA	1:A:101:HIS:C	1:A:102:HIS:N	1	40.4
(1,56)	1:A:33:LEU:C	1:A:34:THR:N	1:A:34:THR:CA	1:A:34:THR:C	2	39.8
(1,56)	1:A:33:LEU:C	1:A:34:THR:N	1:A:34:THR:CA	1:A:34:THR:C	2	39.8
(1,56)	1:A:33:LEU:C	1:A:34:THR:N	1:A:34:THR:CA	1:A:34:THR:C	2	39.8
(1,179)	1:A:97:ALA:N	1:A:97:ALA:CA	1:A:97:ALA:C	1:A:98:GLU:N	2	38.3
(1,179)	1:A:97:ALA:N	1:A:97:ALA:CA	1:A:97:ALA:C	1:A:98:GLU:N	2	38.3
(1,179)	1:A:97:ALA:N	1:A:97:ALA:CA	1:A:97:ALA:C	1:A:98:GLU:N	2	38.3
(1,147)	1:A:80:ALA:N	1:A:80:ALA:CA	1:A:80:ALA:C	1:A:81:LYS:N	5	38.2
(1,147)	1:A:80:ALA:N	1:A:80:ALA:CA	1:A:80:ALA:C	1:A:81:LYS:N	5	38.2
(1,147)	1:A:80:ALA:N	1:A:80:ALA:CA	1:A:80:ALA:C	1:A:81:LYS:N	5	38.2
(1,59)	1:A:36:SER:N	1:A:36:SER:CA	1:A:36:SER:C	1:A:37:ALA:N	1	37.1
(1,59)	1:A:36:SER:N	1:A:36:SER:CA	1:A:36:SER:C	1:A:37:ALA:N	1	37.1
(1,59)	1:A:36:SER:N	1:A:36:SER:CA	1:A:36:SER:C	1:A:37:ALA:N	1	37.1
(1,147)	1:A:80:ALA:N	1:A:80:ALA:CA	1:A:80:ALA:C	1:A:81:LYS:N	3	36.9
(1,147)	1:A:80:ALA:N	1:A:80:ALA:CA	1:A:80:ALA:C	1:A:81:LYS:N	3	36.9
(1,147)	1:A:80:ALA:N	1:A:80:ALA:CA	1:A:80:ALA:C	1:A:81:LYS:N	3	36.9
(1,60)	1:A:36:SER:C	1:A:37:ALA:N	1:A:37:ALA:CA	1:A:37:ALA:C	6	36.8
(1,60)	1:A:36:SER:C	1:A:37:ALA:N	1:A:37:ALA:CA	1:A:37:ALA:C	6	36.8
(1,60)	1:A:36:SER:C	1:A:37:ALA:N	1:A:37:ALA:CA	1:A:37:ALA:C	6	36.8
(1,179)	1:A:97:ALA:N	1:A:97:ALA:CA	1:A:97:ALA:C	1:A:98:GLU:N	8	36.8
(1,179)	1:A:97:ALA:N	1:A:97:ALA:CA	1:A:97:ALA:C	1:A:98:GLU:N	8	36.8
(1,179)	1:A:97:ALA:N	1:A:97:ALA:CA	1:A:97:ALA:C	1:A:98:GLU:N	8	36.8
(1,30)	1:A:18:ASN:C	1:A:19:LYS:N	1:A:19:LYS:CA	1:A:19:LYS:C	3	36.3
(1,30)	1:A:18:ASN:C	1:A:19:LYS:N	1:A:19:LYS:CA	1:A:19:LYS:C	3	36.3
(1,30)	1:A:18:ASN:C	1:A:19:LYS:N	1:A:19:LYS:CA	1:A:19:LYS:C	3	36.3
(1,196)	1:A:105:HIS:C	1:A:106:HIS:N	1:A:106:HIS:CA	1:A:106:HIS:C	8	35.8
(1,196)	1:A:105:HIS:C	1:A:106:HIS:N	1:A:106:HIS:CA	1:A:106:HIS:C	8	35.8

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,196)	1:A:105:HIS:C	1:A:106:HIS:N	1:A:106:HIS:CA	1:A:106:HIS:C	8	35.8
(1,147)	1:A:80:ALA:N	1:A:80:ALA:CA	1:A:80:ALA:C	1:A:81:LYS:N	7	35.8
(1,147)	1:A:80:ALA:N	1:A:80:ALA:CA	1:A:80:ALA:C	1:A:81:LYS:N	7	35.8
(1,147)	1:A:80:ALA:N	1:A:80:ALA:CA	1:A:80:ALA:C	1:A:81:LYS:N	7	35.8
(1,60)	1:A:36:SER:C	1:A:37:ALA:N	1:A:37:ALA:CA	1:A:37:ALA:C	5	35.5
(1,60)	1:A:36:SER:C	1:A:37:ALA:N	1:A:37:ALA:CA	1:A:37:ALA:C	5	35.5
(1,60)	1:A:36:SER:C	1:A:37:ALA:N	1:A:37:ALA:CA	1:A:37:ALA:C	5	35.5
(1,56)	1:A:33:LEU:C	1:A:34:THR:N	1:A:34:THR:CA	1:A:34:THR:C	8	35.3
(1,56)	1:A:33:LEU:C	1:A:34:THR:N	1:A:34:THR:CA	1:A:34:THR:C	8	35.3
(1,56)	1:A:33:LEU:C	1:A:34:THR:N	1:A:34:THR:CA	1:A:34:THR:C	8	35.3
(1,60)	1:A:36:SER:C	1:A:37:ALA:N	1:A:37:ALA:CA	1:A:37:ALA:C	2	34.8
(1,60)	1:A:36:SER:C	1:A:37:ALA:N	1:A:37:ALA:CA	1:A:37:ALA:C	2	34.8
(1,60)	1:A:36:SER:C	1:A:37:ALA:N	1:A:37:ALA:CA	1:A:37:ALA:C	2	34.8
(1,1)	1:A:1:MET:N	1:A:1:MET:CA	1:A:1:MET:C	1:A:2:LYS:N	1	32.8
(1,1)	1:A:1:MET:N	1:A:1:MET:CA	1:A:1:MET:C	1:A:2:LYS:N	1	32.8
(1,1)	1:A:1:MET:N	1:A:1:MET:CA	1:A:1:MET:C	1:A:2:LYS:N	1	32.8
(1,1)	1:A:1:MET:N	1:A:1:MET:CA	1:A:1:MET:C	1:A:2:LYS:N	1	32.8
(1,22)	1:A:14:LYS:C	1:A:15:LEU:N	1:A:15:LEU:CA	1:A:15:LEU:C	9	32.5
(1,22)	1:A:14:LYS:C	1:A:15:LEU:N	1:A:15:LEU:CA	1:A:15:LEU:C	9	32.5
(1,22)	1:A:14:LYS:C	1:A:15:LEU:N	1:A:15:LEU:CA	1:A:15:LEU:C	9	32.5
(1,174)	1:A:93:SER:C	1:A:94:SER:N	1:A:94:SER:CA	1:A:94:SER:C	5	31.7
(1,174)	1:A:93:SER:C	1:A:94:SER:N	1:A:94:SER:CA	1:A:94:SER:C	5	31.7
(1,174)	1:A:93:SER:C	1:A:94:SER:N	1:A:94:SER:CA	1:A:94:SER:C	5	31.7
(1,76)	1:A:44:ILE:C	1:A:45:SER:N	1:A:45:SER:CA	1:A:45:SER:C	2	30.9
(1,76)	1:A:44:ILE:C	1:A:45:SER:N	1:A:45:SER:CA	1:A:45:SER:C	2	30.9
(1,76)	1:A:44:ILE:C	1:A:45:SER:N	1:A:45:SER:CA	1:A:45:SER:C	2	30.9
(1,190)	1:A:102:HIS:C	1:A:103:HIS:N	1:A:103:HIS:CA	1:A:103:HIS:C	2	30.3
(1,190)	1:A:102:HIS:C	1:A:103:HIS:N	1:A:103:HIS:CA	1:A:103:HIS:C	2	30.3
(1,190)	1:A:102:HIS:C	1:A:103:HIS:N	1:A:103:HIS:CA	1:A:103:HIS:C	2	30.3
(1,180)	1:A:97:ALA:C	1:A:98:GLU:N	1:A:98:GLU:CA	1:A:98:GLU:C	4	30.3
(1,180)	1:A:97:ALA:C	1:A:98:GLU:N	1:A:98:GLU:CA	1:A:98:GLU:C	4	30.3
(1,180)	1:A:97:ALA:C	1:A:98:GLU:N	1:A:98:GLU:CA	1:A:98:GLU:C	4	30.3
(1,76)	1:A:44:ILE:C	1:A:45:SER:N	1:A:45:SER:CA	1:A:45:SER:C	9	29.6
(1,76)	1:A:44:ILE:C	1:A:45:SER:N	1:A:45:SER:CA	1:A:45:SER:C	9	29.6
(1,76)	1:A:44:ILE:C	1:A:45:SER:N	1:A:45:SER:CA	1:A:45:SER:C	9	29.6
(1,216)	1:A:10:LEU:CA	1:A:10:LEU:CB	1:A:10:LEU:CG	1:A:10:LEU:CD1	9	29.3
(1,216)	1:A:10:LEU:CA	1:A:10:LEU:CB	1:A:10:LEU:CG	1:A:10:LEU:CD1	9	29.3
(1,216)	1:A:10:LEU:CA	1:A:10:LEU:CB	1:A:10:LEU:CG	1:A:10:LEU:CD1	9	29.3
(1,241)	1:A:25:MET:N	1:A:25:MET:CA	1:A:25:MET:CB	1:A:25:MET:CG	4	29.0
(1,241)	1:A:25:MET:N	1:A:25:MET:CA	1:A:25:MET:CB	1:A:25:MET:CG	4	29.0
(1,241)	1:A:25:MET:N	1:A:25:MET:CA	1:A:25:MET:CB	1:A:25:MET:CG	4	29.0
(1,192)	1:A:103:HIS:C	1:A:104:HIS:N	1:A:104:HIS:CA	1:A:104:HIS:C	10	28.6
(1,192)	1:A:103:HIS:C	1:A:104:HIS:N	1:A:104:HIS:CA	1:A:104:HIS:C	10	28.6
(1,192)	1:A:103:HIS:C	1:A:104:HIS:N	1:A:104:HIS:CA	1:A:104:HIS:C	10	28.6
(1,1)	1:A:1:MET:N	1:A:1:MET:CA	1:A:1:MET:C	1:A:2:LYS:N	8	28.6
(1,1)	1:A:1:MET:N	1:A:1:MET:CA	1:A:1:MET:C	1:A:2:LYS:N	8	28.6
(1,1)	1:A:1:MET:N	1:A:1:MET:CA	1:A:1:MET:C	1:A:2:LYS:N	8	28.6
(1,1)	1:A:1:MET:N	1:A:1:MET:CA	1:A:1:MET:C	1:A:2:LYS:N	8	28.6
(1,59)	1:A:36:SER:N	1:A:36:SER:CA	1:A:36:SER:C	1:A:37:ALA:N	9	28.2
(1,59)	1:A:36:SER:N	1:A:36:SER:CA	1:A:36:SER:C	1:A:37:ALA:N	9	28.2
(1,59)	1:A:36:SER:N	1:A:36:SER:CA	1:A:36:SER:C	1:A:37:ALA:N	9	28.2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,186)	1:A:100:LYS:C	1:A:101:HIS:N	1:A:101:HIS:CA	1:A:101:HIS:C	9	28.1
(1,186)	1:A:100:LYS:C	1:A:101:HIS:N	1:A:101:HIS:CA	1:A:101:HIS:C	9	28.1
(1,186)	1:A:100:LYS:C	1:A:101:HIS:N	1:A:101:HIS:CA	1:A:101:HIS:C	9	28.1
(1,29)	1:A:18:ASN:N	1:A:18:ASN:CA	1:A:18:ASN:C	1:A:19:LYS:N	6	27.5
(1,29)	1:A:18:ASN:N	1:A:18:ASN:CA	1:A:18:ASN:C	1:A:19:LYS:N	6	27.5
(1,29)	1:A:18:ASN:N	1:A:18:ASN:CA	1:A:18:ASN:C	1:A:19:LYS:N	6	27.5
(1,241)	1:A:25:MET:N	1:A:25:MET:CA	1:A:25:MET:CB	1:A:25:MET:CG	3	27.4
(1,241)	1:A:25:MET:N	1:A:25:MET:CA	1:A:25:MET:CB	1:A:25:MET:CG	3	27.4
(1,241)	1:A:25:MET:N	1:A:25:MET:CA	1:A:25:MET:CB	1:A:25:MET:CG	3	27.4
(1,178)	1:A:96:GLY:C	1:A:97:ALA:N	1:A:97:ALA:CA	1:A:97:ALA:C	3	27.4
(1,178)	1:A:96:GLY:C	1:A:97:ALA:N	1:A:97:ALA:CA	1:A:97:ALA:C	3	27.4
(1,178)	1:A:96:GLY:C	1:A:97:ALA:N	1:A:97:ALA:CA	1:A:97:ALA:C	3	27.4
(1,8)	1:A:6:ASN:C	1:A:7:MET:N	1:A:7:MET:CA	1:A:7:MET:C	5	27.1
(1,8)	1:A:6:ASN:C	1:A:7:MET:N	1:A:7:MET:CA	1:A:7:MET:C	5	27.1
(1,8)	1:A:6:ASN:C	1:A:7:MET:N	1:A:7:MET:CA	1:A:7:MET:C	5	27.1
(1,76)	1:A:44:ILE:C	1:A:45:SER:N	1:A:45:SER:CA	1:A:45:SER:C	10	26.9
(1,76)	1:A:44:ILE:C	1:A:45:SER:N	1:A:45:SER:CA	1:A:45:SER:C	10	26.9
(1,76)	1:A:44:ILE:C	1:A:45:SER:N	1:A:45:SER:CA	1:A:45:SER:C	10	26.9
(1,276)	1:A:47:LYS:CB	1:A:47:LYS:CG	1:A:47:LYS:CD	1:A:47:LYS:CE	9	26.8
(1,276)	1:A:47:LYS:CB	1:A:47:LYS:CG	1:A:47:LYS:CD	1:A:47:LYS:CE	9	26.8
(1,276)	1:A:47:LYS:CB	1:A:47:LYS:CG	1:A:47:LYS:CD	1:A:47:LYS:CE	9	26.8
(1,149)	1:A:81:LYS:N	1:A:81:LYS:CA	1:A:81:LYS:C	1:A:82:SER:N	3	26.7
(1,149)	1:A:81:LYS:N	1:A:81:LYS:CA	1:A:81:LYS:C	1:A:82:SER:N	3	26.7
(1,149)	1:A:81:LYS:N	1:A:81:LYS:CA	1:A:81:LYS:C	1:A:82:SER:N	3	26.7
(1,60)	1:A:36:SER:C	1:A:37:ALA:N	1:A:37:ALA:CA	1:A:37:ALA:C	8	26.4
(1,60)	1:A:36:SER:C	1:A:37:ALA:N	1:A:37:ALA:CA	1:A:37:ALA:C	8	26.4
(1,60)	1:A:36:SER:C	1:A:37:ALA:N	1:A:37:ALA:CA	1:A:37:ALA:C	8	26.4
(1,241)	1:A:25:MET:N	1:A:25:MET:CA	1:A:25:MET:CB	1:A:25:MET:CG	6	26.2
(1,241)	1:A:25:MET:N	1:A:25:MET:CA	1:A:25:MET:CB	1:A:25:MET:CG	6	26.2
(1,241)	1:A:25:MET:N	1:A:25:MET:CA	1:A:25:MET:CB	1:A:25:MET:CG	6	26.2
(1,60)	1:A:36:SER:C	1:A:37:ALA:N	1:A:37:ALA:CA	1:A:37:ALA:C	3	25.7
(1,60)	1:A:36:SER:C	1:A:37:ALA:N	1:A:37:ALA:CA	1:A:37:ALA:C	3	25.7
(1,60)	1:A:36:SER:C	1:A:37:ALA:N	1:A:37:ALA:CA	1:A:37:ALA:C	3	25.7
(1,304)	1:A:58:GLU:N	1:A:58:GLU:CA	1:A:58:GLU:CB	1:A:58:GLU:CG	7	25.3
(1,304)	1:A:58:GLU:N	1:A:58:GLU:CA	1:A:58:GLU:CB	1:A:58:GLU:CG	7	25.3
(1,304)	1:A:58:GLU:N	1:A:58:GLU:CA	1:A:58:GLU:CB	1:A:58:GLU:CG	7	25.3
(1,8)	1:A:6:ASN:C	1:A:7:MET:N	1:A:7:MET:CA	1:A:7:MET:C	4	24.7
(1,8)	1:A:6:ASN:C	1:A:7:MET:N	1:A:7:MET:CA	1:A:7:MET:C	4	24.7
(1,8)	1:A:6:ASN:C	1:A:7:MET:N	1:A:7:MET:CA	1:A:7:MET:C	4	24.7
(1,260)	1:A:36:SER:N	1:A:36:SER:CA	1:A:36:SER:CB	1:A:36:SER:OG	6	24.6
(1,260)	1:A:36:SER:N	1:A:36:SER:CA	1:A:36:SER:CB	1:A:36:SER:OG	6	24.6
(1,260)	1:A:36:SER:N	1:A:36:SER:CA	1:A:36:SER:CB	1:A:36:SER:OG	6	24.6
(1,76)	1:A:44:ILE:C	1:A:45:SER:N	1:A:45:SER:CA	1:A:45:SER:C	6	24.4
(1,76)	1:A:44:ILE:C	1:A:45:SER:N	1:A:45:SER:CA	1:A:45:SER:C	6	24.4
(1,76)	1:A:44:ILE:C	1:A:45:SER:N	1:A:45:SER:CA	1:A:45:SER:C	6	24.4
(1,360)	1:A:100:LYS:CA	1:A:100:LYS:CB	1:A:100:LYS:CG	1:A:100:LYS:CD	8	24.2
(1,360)	1:A:100:LYS:CA	1:A:100:LYS:CB	1:A:100:LYS:CG	1:A:100:LYS:CD	8	24.2
(1,360)	1:A:100:LYS:CA	1:A:100:LYS:CB	1:A:100:LYS:CG	1:A:100:LYS:CD	8	24.2
(1,76)	1:A:44:ILE:C	1:A:45:SER:N	1:A:45:SER:CA	1:A:45:SER:C	4	24.0
(1,76)	1:A:44:ILE:C	1:A:45:SER:N	1:A:45:SER:CA	1:A:45:SER:C	4	24.0
(1,76)	1:A:44:ILE:C	1:A:45:SER:N	1:A:45:SER:CA	1:A:45:SER:C	4	24.0

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,76)	1:A:44:ILE:C	1:A:45:SER:N	1:A:45:SER:CA	1:A:45:SER:C	7	23.7
(1,76)	1:A:44:ILE:C	1:A:45:SER:N	1:A:45:SER:CA	1:A:45:SER:C	7	23.7
(1,76)	1:A:44:ILE:C	1:A:45:SER:N	1:A:45:SER:CA	1:A:45:SER:C	7	23.7
(1,304)	1:A:58:GLU:N	1:A:58:GLU:CA	1:A:58:GLU:CB	1:A:58:GLU:CG	6	23.6
(1,304)	1:A:58:GLU:N	1:A:58:GLU:CA	1:A:58:GLU:CB	1:A:58:GLU:CG	6	23.6
(1,304)	1:A:58:GLU:N	1:A:58:GLU:CA	1:A:58:GLU:CB	1:A:58:GLU:CG	6	23.6
(1,188)	1:A:101:HIS:C	1:A:102:HIS:N	1:A:102:HIS:CA	1:A:102:HIS:C	9	23.4
(1,188)	1:A:101:HIS:C	1:A:102:HIS:N	1:A:102:HIS:CA	1:A:102:HIS:C	9	23.4
(1,188)	1:A:101:HIS:C	1:A:102:HIS:N	1:A:102:HIS:CA	1:A:102:HIS:C	9	23.4
(1,76)	1:A:44:ILE:C	1:A:45:SER:N	1:A:45:SER:CA	1:A:45:SER:C	1	23.0
(1,76)	1:A:44:ILE:C	1:A:45:SER:N	1:A:45:SER:CA	1:A:45:SER:C	1	23.0
(1,76)	1:A:44:ILE:C	1:A:45:SER:N	1:A:45:SER:CA	1:A:45:SER:C	1	23.0
(1,328)	1:A:74:GLN:CA	1:A:74:GLN:CB	1:A:74:GLN:CG	1:A:74:GLN:CD	6	22.9
(1,328)	1:A:74:GLN:CA	1:A:74:GLN:CB	1:A:74:GLN:CG	1:A:74:GLN:CD	6	22.9
(1,328)	1:A:74:GLN:CA	1:A:74:GLN:CB	1:A:74:GLN:CG	1:A:74:GLN:CD	6	22.9
(1,328)	1:A:74:GLN:CA	1:A:74:GLN:CB	1:A:74:GLN:CG	1:A:74:GLN:CD	9	22.6
(1,328)	1:A:74:GLN:CA	1:A:74:GLN:CB	1:A:74:GLN:CG	1:A:74:GLN:CD	9	22.6
(1,328)	1:A:74:GLN:CA	1:A:74:GLN:CB	1:A:74:GLN:CG	1:A:74:GLN:CD	9	22.6
(1,76)	1:A:44:ILE:C	1:A:45:SER:N	1:A:45:SER:CA	1:A:45:SER:C	3	22.2
(1,76)	1:A:44:ILE:C	1:A:45:SER:N	1:A:45:SER:CA	1:A:45:SER:C	3	22.2
(1,76)	1:A:44:ILE:C	1:A:45:SER:N	1:A:45:SER:CA	1:A:45:SER:C	3	22.2
(1,304)	1:A:58:GLU:N	1:A:58:GLU:CA	1:A:58:GLU:CB	1:A:58:GLU:CG	9	22.0
(1,304)	1:A:58:GLU:N	1:A:58:GLU:CA	1:A:58:GLU:CB	1:A:58:GLU:CG	9	22.0
(1,304)	1:A:58:GLU:N	1:A:58:GLU:CA	1:A:58:GLU:CB	1:A:58:GLU:CG	9	22.0
(1,149)	1:A:81:LYS:N	1:A:81:LYS:CA	1:A:81:LYS:C	1:A:82:SER:N	7	21.7
(1,149)	1:A:81:LYS:N	1:A:81:LYS:CA	1:A:81:LYS:C	1:A:82:SER:N	7	21.7
(1,149)	1:A:81:LYS:N	1:A:81:LYS:CA	1:A:81:LYS:C	1:A:82:SER:N	7	21.7
(1,192)	1:A:103:HIS:C	1:A:104:HIS:N	1:A:104:HIS:CA	1:A:104:HIS:C	9	21.3
(1,192)	1:A:103:HIS:C	1:A:104:HIS:N	1:A:104:HIS:CA	1:A:104:HIS:C	9	21.3
(1,192)	1:A:103:HIS:C	1:A:104:HIS:N	1:A:104:HIS:CA	1:A:104:HIS:C	9	21.3
(1,6)	1:A:5:SER:C	1:A:6:ASN:N	1:A:6:ASN:CA	1:A:6:ASN:C	6	20.2
(1,6)	1:A:5:SER:C	1:A:6:ASN:N	1:A:6:ASN:CA	1:A:6:ASN:C	6	20.2
(1,6)	1:A:5:SER:C	1:A:6:ASN:N	1:A:6:ASN:CA	1:A:6:ASN:C	6	20.2
(1,172)	1:A:92:LEU:C	1:A:93:SER:N	1:A:93:SER:CA	1:A:93:SER:C	9	20.1
(1,172)	1:A:92:LEU:C	1:A:93:SER:N	1:A:93:SER:CA	1:A:93:SER:C	9	20.1
(1,172)	1:A:92:LEU:C	1:A:93:SER:N	1:A:93:SER:CA	1:A:93:SER:C	9	20.1
(1,276)	1:A:47:LYS:CB	1:A:47:LYS:CG	1:A:47:LYS:CD	1:A:47:LYS:CE	3	20.0
(1,276)	1:A:47:LYS:CB	1:A:47:LYS:CG	1:A:47:LYS:CD	1:A:47:LYS:CE	3	20.0
(1,276)	1:A:47:LYS:CB	1:A:47:LYS:CG	1:A:47:LYS:CD	1:A:47:LYS:CE	3	20.0
(1,172)	1:A:92:LEU:C	1:A:93:SER:N	1:A:93:SER:CA	1:A:93:SER:C	6	19.4
(1,172)	1:A:92:LEU:C	1:A:93:SER:N	1:A:93:SER:CA	1:A:93:SER:C	6	19.4
(1,172)	1:A:92:LEU:C	1:A:93:SER:N	1:A:93:SER:CA	1:A:93:SER:C	6	19.4
(1,76)	1:A:44:ILE:C	1:A:45:SER:N	1:A:45:SER:CA	1:A:45:SER:C	8	19.0
(1,76)	1:A:44:ILE:C	1:A:45:SER:N	1:A:45:SER:CA	1:A:45:SER:C	8	19.0
(1,76)	1:A:44:ILE:C	1:A:45:SER:N	1:A:45:SER:CA	1:A:45:SER:C	8	19.0
(1,27)	1:A:17:GLN:N	1:A:17:GLN:CA	1:A:17:GLN:C	1:A:18:ASN:N	4	19.0
(1,27)	1:A:17:GLN:N	1:A:17:GLN:CA	1:A:17:GLN:C	1:A:18:ASN:N	4	19.0
(1,27)	1:A:17:GLN:N	1:A:17:GLN:CA	1:A:17:GLN:C	1:A:18:ASN:N	4	19.0
(1,180)	1:A:97:ALA:C	1:A:98:GLU:N	1:A:98:GLU:CA	1:A:98:GLU:C	2	19.0
(1,180)	1:A:97:ALA:C	1:A:98:GLU:N	1:A:98:GLU:CA	1:A:98:GLU:C	2	19.0
(1,180)	1:A:97:ALA:C	1:A:98:GLU:N	1:A:98:GLU:CA	1:A:98:GLU:C	2	19.0

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,190)	1:A:102:HIS:C	1:A:103:HIS:N	1:A:103:HIS:CA	1:A:103:HIS:C	3	18.7
(1,190)	1:A:102:HIS:C	1:A:103:HIS:N	1:A:103:HIS:CA	1:A:103:HIS:C	3	18.7
(1,190)	1:A:102:HIS:C	1:A:103:HIS:N	1:A:103:HIS:CA	1:A:103:HIS:C	3	18.7
(1,8)	1:A:6:ASN:C	1:A:7:MET:N	1:A:7:MET:CA	1:A:7:MET:C	8	18.0
(1,8)	1:A:6:ASN:C	1:A:7:MET:N	1:A:7:MET:CA	1:A:7:MET:C	8	18.0
(1,8)	1:A:6:ASN:C	1:A:7:MET:N	1:A:7:MET:CA	1:A:7:MET:C	8	18.0
(1,8)	1:A:6:ASN:C	1:A:7:MET:N	1:A:7:MET:CA	1:A:7:MET:C	2	17.0
(1,8)	1:A:6:ASN:C	1:A:7:MET:N	1:A:7:MET:CA	1:A:7:MET:C	2	17.0
(1,8)	1:A:6:ASN:C	1:A:7:MET:N	1:A:7:MET:CA	1:A:7:MET:C	2	17.0
(1,183)	1:A:99:VAL:N	1:A:99:VAL:CA	1:A:99:VAL:C	1:A:100:LYS:N	10	16.8
(1,183)	1:A:99:VAL:N	1:A:99:VAL:CA	1:A:99:VAL:C	1:A:100:LYS:N	10	16.8
(1,183)	1:A:99:VAL:N	1:A:99:VAL:CA	1:A:99:VAL:C	1:A:100:LYS:N	10	16.8
(1,176)	1:A:94:SER:C	1:A:95:TRP:N	1:A:95:TRP:CA	1:A:95:TRP:C	5	16.8
(1,176)	1:A:94:SER:C	1:A:95:TRP:N	1:A:95:TRP:CA	1:A:95:TRP:C	5	16.8
(1,176)	1:A:94:SER:C	1:A:95:TRP:N	1:A:95:TRP:CA	1:A:95:TRP:C	5	16.8
(1,76)	1:A:44:ILE:C	1:A:45:SER:N	1:A:45:SER:CA	1:A:45:SER:C	5	16.7
(1,76)	1:A:44:ILE:C	1:A:45:SER:N	1:A:45:SER:CA	1:A:45:SER:C	5	16.7
(1,76)	1:A:44:ILE:C	1:A:45:SER:N	1:A:45:SER:CA	1:A:45:SER:C	5	16.7
(1,149)	1:A:81:LYS:N	1:A:81:LYS:CA	1:A:81:LYS:C	1:A:82:SER:N	5	16.5
(1,149)	1:A:81:LYS:N	1:A:81:LYS:CA	1:A:81:LYS:C	1:A:82:SER:N	5	16.5
(1,149)	1:A:81:LYS:N	1:A:81:LYS:CA	1:A:81:LYS:C	1:A:82:SER:N	5	16.5
(1,58)	1:A:35:GLY:C	1:A:36:SER:N	1:A:36:SER:CA	1:A:36:SER:C	10	16.4
(1,58)	1:A:35:GLY:C	1:A:36:SER:N	1:A:36:SER:CA	1:A:36:SER:C	10	16.4
(1,58)	1:A:35:GLY:C	1:A:36:SER:N	1:A:36:SER:CA	1:A:36:SER:C	10	16.4
(1,8)	1:A:6:ASN:C	1:A:7:MET:N	1:A:7:MET:CA	1:A:7:MET:C	6	15.8
(1,8)	1:A:6:ASN:C	1:A:7:MET:N	1:A:7:MET:CA	1:A:7:MET:C	6	15.8
(1,8)	1:A:6:ASN:C	1:A:7:MET:N	1:A:7:MET:CA	1:A:7:MET:C	6	15.8
(1,194)	1:A:104:HIS:C	1:A:105:HIS:N	1:A:105:HIS:CA	1:A:105:HIS:C	7	15.7
(1,194)	1:A:104:HIS:C	1:A:105:HIS:N	1:A:105:HIS:CA	1:A:105:HIS:C	7	15.7
(1,194)	1:A:104:HIS:C	1:A:105:HIS:N	1:A:105:HIS:CA	1:A:105:HIS:C	7	15.7
(1,8)	1:A:6:ASN:C	1:A:7:MET:N	1:A:7:MET:CA	1:A:7:MET:C	3	15.4
(1,8)	1:A:6:ASN:C	1:A:7:MET:N	1:A:7:MET:CA	1:A:7:MET:C	3	15.4
(1,8)	1:A:6:ASN:C	1:A:7:MET:N	1:A:7:MET:CA	1:A:7:MET:C	3	15.4
(1,190)	1:A:102:HIS:C	1:A:103:HIS:N	1:A:103:HIS:CA	1:A:103:HIS:C	8	15.3
(1,190)	1:A:102:HIS:C	1:A:103:HIS:N	1:A:103:HIS:CA	1:A:103:HIS:C	8	15.3
(1,190)	1:A:102:HIS:C	1:A:103:HIS:N	1:A:103:HIS:CA	1:A:103:HIS:C	8	15.3
(1,8)	1:A:6:ASN:C	1:A:7:MET:N	1:A:7:MET:CA	1:A:7:MET:C	1	15.2
(1,8)	1:A:6:ASN:C	1:A:7:MET:N	1:A:7:MET:CA	1:A:7:MET:C	1	15.2
(1,8)	1:A:6:ASN:C	1:A:7:MET:N	1:A:7:MET:CA	1:A:7:MET:C	1	15.2
(1,360)	1:A:100:LYS:CA	1:A:100:LYS:CB	1:A:100:LYS:CG	1:A:100:LYS:CD	5	15.2
(1,360)	1:A:100:LYS:CA	1:A:100:LYS:CB	1:A:100:LYS:CG	1:A:100:LYS:CD	5	15.2
(1,360)	1:A:100:LYS:CA	1:A:100:LYS:CB	1:A:100:LYS:CG	1:A:100:LYS:CD	5	15.2
(1,225)	1:A:15:LEU:CA	1:A:15:LEU:CB	1:A:15:LEU:CG	1:A:15:LEU:CD1	8	15.2
(1,225)	1:A:15:LEU:CA	1:A:15:LEU:CB	1:A:15:LEU:CG	1:A:15:LEU:CD1	8	15.2
(1,225)	1:A:15:LEU:CA	1:A:15:LEU:CB	1:A:15:LEU:CG	1:A:15:LEU:CD1	8	15.2
(1,194)	1:A:104:HIS:C	1:A:105:HIS:N	1:A:105:HIS:CA	1:A:105:HIS:C	3	15.1
(1,194)	1:A:104:HIS:C	1:A:105:HIS:N	1:A:105:HIS:CA	1:A:105:HIS:C	3	15.1
(1,194)	1:A:104:HIS:C	1:A:105:HIS:N	1:A:105:HIS:CA	1:A:105:HIS:C	3	15.1
(1,5)	1:A:5:SER:N	1:A:5:SER:CA	1:A:5:SER:C	1:A:6:ASN:N	10	14.5
(1,5)	1:A:5:SER:N	1:A:5:SER:CA	1:A:5:SER:C	1:A:6:ASN:N	10	14.5
(1,5)	1:A:5:SER:N	1:A:5:SER:CA	1:A:5:SER:C	1:A:6:ASN:N	10	14.5

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,276)	1:A:47:LYS:CB	1:A:47:LYS:CG	1:A:47:LYS:CD	1:A:47:LYS:CE	4	14.4
(1,276)	1:A:47:LYS:CB	1:A:47:LYS:CG	1:A:47:LYS:CD	1:A:47:LYS:CE	4	14.4
(1,276)	1:A:47:LYS:CB	1:A:47:LYS:CG	1:A:47:LYS:CD	1:A:47:LYS:CE	4	14.4
(1,191)	1:A:103:HIS:N	1:A:103:HIS:CA	1:A:103:HIS:C	1:A:104:HIS:N	5	14.4
(1,191)	1:A:103:HIS:N	1:A:103:HIS:CA	1:A:103:HIS:C	1:A:104:HIS:N	5	14.4
(1,191)	1:A:103:HIS:N	1:A:103:HIS:CA	1:A:103:HIS:C	1:A:104:HIS:N	5	14.4
(1,191)	1:A:103:HIS:N	1:A:103:HIS:CA	1:A:103:HIS:C	1:A:104:HIS:N	7	14.3
(1,191)	1:A:103:HIS:N	1:A:103:HIS:CA	1:A:103:HIS:C	1:A:104:HIS:N	7	14.3
(1,191)	1:A:103:HIS:N	1:A:103:HIS:CA	1:A:103:HIS:C	1:A:104:HIS:N	7	14.3
(1,149)	1:A:81:LYS:N	1:A:81:LYS:CA	1:A:81:LYS:C	1:A:82:SER:N	2	14.2
(1,149)	1:A:81:LYS:N	1:A:81:LYS:CA	1:A:81:LYS:C	1:A:82:SER:N	2	14.2
(1,149)	1:A:81:LYS:N	1:A:81:LYS:CA	1:A:81:LYS:C	1:A:82:SER:N	2	14.2
(1,277)	1:A:47:LYS:CG	1:A:47:LYS:CD	1:A:47:LYS:CE	1:A:47:LYS:NZ	4	14.0
(1,277)	1:A:47:LYS:CG	1:A:47:LYS:CD	1:A:47:LYS:CE	1:A:47:LYS:NZ	4	14.0
(1,277)	1:A:47:LYS:CG	1:A:47:LYS:CD	1:A:47:LYS:CE	1:A:47:LYS:NZ	4	14.0
(1,276)	1:A:47:LYS:CB	1:A:47:LYS:CG	1:A:47:LYS:CD	1:A:47:LYS:CE	1	14.0
(1,276)	1:A:47:LYS:CB	1:A:47:LYS:CG	1:A:47:LYS:CD	1:A:47:LYS:CE	1	14.0
(1,276)	1:A:47:LYS:CB	1:A:47:LYS:CG	1:A:47:LYS:CD	1:A:47:LYS:CE	1	14.0
(1,238)	1:A:23:LYS:CA	1:A:23:LYS:CB	1:A:23:LYS:CG	1:A:23:LYS:CD	4	13.8
(1,238)	1:A:23:LYS:CA	1:A:23:LYS:CB	1:A:23:LYS:CG	1:A:23:LYS:CD	4	13.8
(1,238)	1:A:23:LYS:CA	1:A:23:LYS:CB	1:A:23:LYS:CG	1:A:23:LYS:CD	4	13.8
(1,190)	1:A:102:HIS:C	1:A:103:HIS:N	1:A:103:HIS:CA	1:A:103:HIS:C	7	13.8
(1,190)	1:A:102:HIS:C	1:A:103:HIS:N	1:A:103:HIS:CA	1:A:103:HIS:C	7	13.8
(1,190)	1:A:102:HIS:C	1:A:103:HIS:N	1:A:103:HIS:CA	1:A:103:HIS:C	7	13.8
(1,172)	1:A:92:LEU:C	1:A:93:SER:N	1:A:93:SER:CA	1:A:93:SER:C	8	13.8
(1,172)	1:A:92:LEU:C	1:A:93:SER:N	1:A:93:SER:CA	1:A:93:SER:C	8	13.8
(1,172)	1:A:92:LEU:C	1:A:93:SER:N	1:A:93:SER:CA	1:A:93:SER:C	8	13.8
(1,172)	1:A:92:LEU:C	1:A:93:SER:N	1:A:93:SER:CA	1:A:93:SER:C	10	13.7
(1,172)	1:A:92:LEU:C	1:A:93:SER:N	1:A:93:SER:CA	1:A:93:SER:C	10	13.7
(1,172)	1:A:92:LEU:C	1:A:93:SER:N	1:A:93:SER:CA	1:A:93:SER:C	10	13.7
(1,29)	1:A:18:ASN:N	1:A:18:ASN:CA	1:A:18:ASN:C	1:A:19:LYS:N	10	13.6
(1,29)	1:A:18:ASN:N	1:A:18:ASN:CA	1:A:18:ASN:C	1:A:19:LYS:N	10	13.6
(1,29)	1:A:18:ASN:N	1:A:18:ASN:CA	1:A:18:ASN:C	1:A:19:LYS:N	10	13.6
(1,8)	1:A:6:ASN:C	1:A:7:MET:N	1:A:7:MET:CA	1:A:7:MET:C	7	13.5
(1,8)	1:A:6:ASN:C	1:A:7:MET:N	1:A:7:MET:CA	1:A:7:MET:C	7	13.5
(1,8)	1:A:6:ASN:C	1:A:7:MET:N	1:A:7:MET:CA	1:A:7:MET:C	7	13.5
(1,8)	1:A:6:ASN:C	1:A:7:MET:N	1:A:7:MET:CA	1:A:7:MET:C	9	12.7
(1,8)	1:A:6:ASN:C	1:A:7:MET:N	1:A:7:MET:CA	1:A:7:MET:C	9	12.7
(1,8)	1:A:6:ASN:C	1:A:7:MET:N	1:A:7:MET:CA	1:A:7:MET:C	9	12.7
(1,183)	1:A:99:VAL:N	1:A:99:VAL:CA	1:A:99:VAL:C	1:A:100:LYS:N	6	12.2
(1,183)	1:A:99:VAL:N	1:A:99:VAL:CA	1:A:99:VAL:C	1:A:100:LYS:N	6	12.2
(1,183)	1:A:99:VAL:N	1:A:99:VAL:CA	1:A:99:VAL:C	1:A:100:LYS:N	6	12.2
(1,216)	1:A:10:LEU:CA	1:A:10:LEU:CB	1:A:10:LEU:CG	1:A:10:LEU:CD1	4	12.1
(1,216)	1:A:10:LEU:CA	1:A:10:LEU:CB	1:A:10:LEU:CG	1:A:10:LEU:CD1	4	12.1
(1,216)	1:A:10:LEU:CA	1:A:10:LEU:CB	1:A:10:LEU:CG	1:A:10:LEU:CD1	4	12.1
(1,216)	1:A:10:LEU:CA	1:A:10:LEU:CB	1:A:10:LEU:CG	1:A:10:LEU:CD1	2	11.7
(1,216)	1:A:10:LEU:CA	1:A:10:LEU:CB	1:A:10:LEU:CG	1:A:10:LEU:CD1	2	11.7
(1,216)	1:A:10:LEU:CA	1:A:10:LEU:CB	1:A:10:LEU:CG	1:A:10:LEU:CD1	2	11.7
(1,241)	1:A:25:MET:N	1:A:25:MET:CA	1:A:25:MET:CB	1:A:25:MET:CG	1	11.5
(1,241)	1:A:25:MET:N	1:A:25:MET:CA	1:A:25:MET:CB	1:A:25:MET:CG	1	11.5
(1,241)	1:A:25:MET:N	1:A:25:MET:CA	1:A:25:MET:CB	1:A:25:MET:CG	1	11.5

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,277)	1:A:47:LYS:CG	1:A:47:LYS:CD	1:A:47:LYS:CE	1:A:47:LYS:NZ	3	11.4
(1,277)	1:A:47:LYS:CG	1:A:47:LYS:CD	1:A:47:LYS:CE	1:A:47:LYS:NZ	3	11.4
(1,277)	1:A:47:LYS:CG	1:A:47:LYS:CD	1:A:47:LYS:CE	1:A:47:LYS:NZ	3	11.4
(1,178)	1:A:96:GLY:C	1:A:97:ALA:N	1:A:97:ALA:CA	1:A:97:ALA:C	9	11.2
(1,178)	1:A:96:GLY:C	1:A:97:ALA:N	1:A:97:ALA:CA	1:A:97:ALA:C	9	11.2
(1,178)	1:A:96:GLY:C	1:A:97:ALA:N	1:A:97:ALA:CA	1:A:97:ALA:C	9	11.2
(1,59)	1:A:36:SER:N	1:A:36:SER:CA	1:A:36:SER:C	1:A:37:ALA:N	4	11.0
(1,59)	1:A:36:SER:N	1:A:36:SER:CA	1:A:36:SER:C	1:A:37:ALA:N	4	11.0
(1,59)	1:A:36:SER:N	1:A:36:SER:CA	1:A:36:SER:C	1:A:37:ALA:N	4	11.0
(1,149)	1:A:81:LYS:N	1:A:81:LYS:CA	1:A:81:LYS:C	1:A:82:SER:N	9	11.0
(1,149)	1:A:81:LYS:N	1:A:81:LYS:CA	1:A:81:LYS:C	1:A:82:SER:N	9	11.0
(1,149)	1:A:81:LYS:N	1:A:81:LYS:CA	1:A:81:LYS:C	1:A:82:SER:N	9	11.0
(1,186)	1:A:100:LYS:C	1:A:101:HIS:N	1:A:101:HIS:CA	1:A:101:HIS:C	1	10.9
(1,186)	1:A:100:LYS:C	1:A:101:HIS:N	1:A:101:HIS:CA	1:A:101:HIS:C	1	10.9
(1,186)	1:A:100:LYS:C	1:A:101:HIS:N	1:A:101:HIS:CA	1:A:101:HIS:C	1	10.9
(1,169)	1:A:91:SER:N	1:A:91:SER:CA	1:A:91:SER:C	1:A:92:LEU:N	7	10.8
(1,169)	1:A:91:SER:N	1:A:91:SER:CA	1:A:91:SER:C	1:A:92:LEU:N	7	10.8
(1,169)	1:A:91:SER:N	1:A:91:SER:CA	1:A:91:SER:C	1:A:92:LEU:N	7	10.8
(1,188)	1:A:101:HIS:C	1:A:102:HIS:N	1:A:102:HIS:CA	1:A:102:HIS:C	6	10.4
(1,188)	1:A:101:HIS:C	1:A:102:HIS:N	1:A:102:HIS:CA	1:A:102:HIS:C	6	10.4
(1,188)	1:A:101:HIS:C	1:A:102:HIS:N	1:A:102:HIS:CA	1:A:102:HIS:C	6	10.4
(1,339)	1:A:83:LEU:CA	1:A:83:LEU:CB	1:A:83:LEU:CG	1:A:83:LEU:CD1	6	10.3
(1,339)	1:A:83:LEU:CA	1:A:83:LEU:CB	1:A:83:LEU:CG	1:A:83:LEU:CD1	6	10.3
(1,339)	1:A:83:LEU:CA	1:A:83:LEU:CB	1:A:83:LEU:CG	1:A:83:LEU:CD1	6	10.3
(1,228)	1:A:17:GLN:CA	1:A:17:GLN:CB	1:A:17:GLN:CG	1:A:17:GLN:CD	7	10.2
(1,228)	1:A:17:GLN:CA	1:A:17:GLN:CB	1:A:17:GLN:CG	1:A:17:GLN:CD	7	10.2
(1,228)	1:A:17:GLN:CA	1:A:17:GLN:CB	1:A:17:GLN:CG	1:A:17:GLN:CD	7	10.2
(1,177)	1:A:95:TRP:N	1:A:95:TRP:CA	1:A:95:TRP:C	1:A:96:GLY:N	5	10.1
(1,177)	1:A:95:TRP:N	1:A:95:TRP:CA	1:A:95:TRP:C	1:A:96:GLY:N	5	10.1
(1,177)	1:A:95:TRP:N	1:A:95:TRP:CA	1:A:95:TRP:C	1:A:96:GLY:N	5	10.1
(1,216)	1:A:10:LEU:CA	1:A:10:LEU:CB	1:A:10:LEU:CG	1:A:10:LEU:CD1	10	9.8
(1,216)	1:A:10:LEU:CA	1:A:10:LEU:CB	1:A:10:LEU:CG	1:A:10:LEU:CD1	10	9.8
(1,216)	1:A:10:LEU:CA	1:A:10:LEU:CB	1:A:10:LEU:CG	1:A:10:LEU:CD1	10	9.8
(1,178)	1:A:96:GLY:C	1:A:97:ALA:N	1:A:97:ALA:CA	1:A:97:ALA:C	4	9.1
(1,178)	1:A:96:GLY:C	1:A:97:ALA:N	1:A:97:ALA:CA	1:A:97:ALA:C	4	9.1
(1,178)	1:A:96:GLY:C	1:A:97:ALA:N	1:A:97:ALA:CA	1:A:97:ALA:C	4	9.1
(1,60)	1:A:36:SER:C	1:A:37:ALA:N	1:A:37:ALA:CA	1:A:37:ALA:C	9	8.0
(1,60)	1:A:36:SER:C	1:A:37:ALA:N	1:A:37:ALA:CA	1:A:37:ALA:C	9	8.0
(1,60)	1:A:36:SER:C	1:A:37:ALA:N	1:A:37:ALA:CA	1:A:37:ALA:C	9	8.0
(1,238)	1:A:23:LYS:CA	1:A:23:LYS:CB	1:A:23:LYS:CG	1:A:23:LYS:CD	10	7.9
(1,238)	1:A:23:LYS:CA	1:A:23:LYS:CB	1:A:23:LYS:CG	1:A:23:LYS:CD	10	7.9
(1,238)	1:A:23:LYS:CA	1:A:23:LYS:CB	1:A:23:LYS:CG	1:A:23:LYS:CD	10	7.9
(1,216)	1:A:10:LEU:CA	1:A:10:LEU:CB	1:A:10:LEU:CG	1:A:10:LEU:CD1	7	7.6
(1,216)	1:A:10:LEU:CA	1:A:10:LEU:CB	1:A:10:LEU:CG	1:A:10:LEU:CD1	7	7.6
(1,216)	1:A:10:LEU:CA	1:A:10:LEU:CB	1:A:10:LEU:CG	1:A:10:LEU:CD1	7	7.6
(1,181)	1:A:98:GLU:N	1:A:98:GLU:CA	1:A:98:GLU:C	1:A:99:VAL:N	3	7.4
(1,181)	1:A:98:GLU:N	1:A:98:GLU:CA	1:A:98:GLU:C	1:A:99:VAL:N	3	7.4
(1,181)	1:A:98:GLU:N	1:A:98:GLU:CA	1:A:98:GLU:C	1:A:99:VAL:N	3	7.4
(1,149)	1:A:81:LYS:N	1:A:81:LYS:CA	1:A:81:LYS:C	1:A:82:SER:N	1	7.4
(1,149)	1:A:81:LYS:N	1:A:81:LYS:CA	1:A:81:LYS:C	1:A:82:SER:N	1	7.4
(1,149)	1:A:81:LYS:N	1:A:81:LYS:CA	1:A:81:LYS:C	1:A:82:SER:N	1	7.4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,328)	1:A:74:GLN:CA	1:A:74:GLN:CB	1:A:74:GLN:CG	1:A:74:GLN:CD	5	7.1
(1,328)	1:A:74:GLN:CA	1:A:74:GLN:CB	1:A:74:GLN:CG	1:A:74:GLN:CD	5	7.1
(1,328)	1:A:74:GLN:CA	1:A:74:GLN:CB	1:A:74:GLN:CG	1:A:74:GLN:CD	5	7.1
(1,176)	1:A:94:SER:C	1:A:95:TRP:N	1:A:95:TRP:CA	1:A:95:TRP:C	8	7.1
(1,176)	1:A:94:SER:C	1:A:95:TRP:N	1:A:95:TRP:CA	1:A:95:TRP:C	8	7.1
(1,176)	1:A:94:SER:C	1:A:95:TRP:N	1:A:95:TRP:CA	1:A:95:TRP:C	8	7.1
(1,190)	1:A:102:HIS:C	1:A:103:HIS:N	1:A:103:HIS:CA	1:A:103:HIS:C	4	6.8
(1,190)	1:A:102:HIS:C	1:A:103:HIS:N	1:A:103:HIS:CA	1:A:103:HIS:C	4	6.8
(1,190)	1:A:102:HIS:C	1:A:103:HIS:N	1:A:103:HIS:CA	1:A:103:HIS:C	4	6.8
(1,149)	1:A:81:LYS:N	1:A:81:LYS:CA	1:A:81:LYS:C	1:A:82:SER:N	8	6.7
(1,149)	1:A:81:LYS:N	1:A:81:LYS:CA	1:A:81:LYS:C	1:A:82:SER:N	8	6.7
(1,149)	1:A:81:LYS:N	1:A:81:LYS:CA	1:A:81:LYS:C	1:A:82:SER:N	8	6.7
(1,339)	1:A:83:LEU:CA	1:A:83:LEU:CB	1:A:83:LEU:CG	1:A:83:LEU:CD1	10	6.5
(1,339)	1:A:83:LEU:CA	1:A:83:LEU:CB	1:A:83:LEU:CG	1:A:83:LEU:CD1	10	6.5
(1,339)	1:A:83:LEU:CA	1:A:83:LEU:CB	1:A:83:LEU:CG	1:A:83:LEU:CD1	10	6.5
(1,176)	1:A:94:SER:C	1:A:95:TRP:N	1:A:95:TRP:CA	1:A:95:TRP:C	6	6.4
(1,176)	1:A:94:SER:C	1:A:95:TRP:N	1:A:95:TRP:CA	1:A:95:TRP:C	6	6.4
(1,176)	1:A:94:SER:C	1:A:95:TRP:N	1:A:95:TRP:CA	1:A:95:TRP:C	6	6.4
(1,52)	1:A:31:GLY:C	1:A:32:LYS:N	1:A:32:LYS:CA	1:A:32:LYS:C	9	6.2
(1,52)	1:A:31:GLY:C	1:A:32:LYS:N	1:A:32:LYS:CA	1:A:32:LYS:C	9	6.2
(1,52)	1:A:31:GLY:C	1:A:32:LYS:N	1:A:32:LYS:CA	1:A:32:LYS:C	9	6.2
(1,149)	1:A:81:LYS:N	1:A:81:LYS:CA	1:A:81:LYS:C	1:A:82:SER:N	10	6.2
(1,149)	1:A:81:LYS:N	1:A:81:LYS:CA	1:A:81:LYS:C	1:A:82:SER:N	10	6.2
(1,149)	1:A:81:LYS:N	1:A:81:LYS:CA	1:A:81:LYS:C	1:A:82:SER:N	10	6.2
(1,241)	1:A:25:MET:N	1:A:25:MET:CA	1:A:25:MET:CB	1:A:25:MET:CG	9	5.8
(1,241)	1:A:25:MET:N	1:A:25:MET:CA	1:A:25:MET:CB	1:A:25:MET:CG	9	5.8
(1,241)	1:A:25:MET:N	1:A:25:MET:CA	1:A:25:MET:CB	1:A:25:MET:CG	9	5.8
(1,12)	1:A:8:LYS:C	1:A:9:ILE:N	1:A:9:ILE:CA	1:A:9:ILE:C	9	5.8
(1,12)	1:A:8:LYS:C	1:A:9:ILE:N	1:A:9:ILE:CA	1:A:9:ILE:C	9	5.8
(1,12)	1:A:8:LYS:C	1:A:9:ILE:N	1:A:9:ILE:CA	1:A:9:ILE:C	9	5.8
(1,347)	1:A:87:LEU:CA	1:A:87:LEU:CB	1:A:87:LEU:CG	1:A:87:LEU:CD1	3	5.7
(1,347)	1:A:87:LEU:CA	1:A:87:LEU:CB	1:A:87:LEU:CG	1:A:87:LEU:CD1	3	5.7
(1,347)	1:A:87:LEU:CA	1:A:87:LEU:CB	1:A:87:LEU:CG	1:A:87:LEU:CD1	3	5.7
(1,169)	1:A:91:SER:N	1:A:91:SER:CA	1:A:91:SER:C	1:A:92:LEU:N	10	5.6
(1,169)	1:A:91:SER:N	1:A:91:SER:CA	1:A:91:SER:C	1:A:92:LEU:N	10	5.6
(1,169)	1:A:91:SER:N	1:A:91:SER:CA	1:A:91:SER:C	1:A:92:LEU:N	10	5.6
(1,184)	1:A:99:VAL:C	1:A:100:LYS:N	1:A:100:LYS:CA	1:A:100:LYS:C	7	5.5
(1,184)	1:A:99:VAL:C	1:A:100:LYS:N	1:A:100:LYS:CA	1:A:100:LYS:C	7	5.5
(1,184)	1:A:99:VAL:C	1:A:100:LYS:N	1:A:100:LYS:CA	1:A:100:LYS:C	7	5.5
(1,216)	1:A:10:LEU:CA	1:A:10:LEU:CB	1:A:10:LEU:CG	1:A:10:LEU:CD1	8	5.3
(1,216)	1:A:10:LEU:CA	1:A:10:LEU:CB	1:A:10:LEU:CG	1:A:10:LEU:CD1	8	5.3
(1,216)	1:A:10:LEU:CA	1:A:10:LEU:CB	1:A:10:LEU:CG	1:A:10:LEU:CD1	8	5.3
(1,339)	1:A:83:LEU:CA	1:A:83:LEU:CB	1:A:83:LEU:CG	1:A:83:LEU:CD1	9	5.2
(1,339)	1:A:83:LEU:CA	1:A:83:LEU:CB	1:A:83:LEU:CG	1:A:83:LEU:CD1	9	5.2
(1,339)	1:A:83:LEU:CA	1:A:83:LEU:CB	1:A:83:LEU:CG	1:A:83:LEU:CD1	9	5.2
(1,23)	1:A:15:LEU:N	1:A:15:LEU:CA	1:A:15:LEU:C	1:A:16:SER:N	5	5.2
(1,23)	1:A:15:LEU:N	1:A:15:LEU:CA	1:A:15:LEU:C	1:A:16:SER:N	5	5.2
(1,23)	1:A:15:LEU:N	1:A:15:LEU:CA	1:A:15:LEU:C	1:A:16:SER:N	5	5.2
(1,146)	1:A:79:SER:C	1:A:80:ALA:N	1:A:80:ALA:CA	1:A:80:ALA:C	1	5.1
(1,146)	1:A:79:SER:C	1:A:80:ALA:N	1:A:80:ALA:CA	1:A:80:ALA:C	1	5.1
(1,146)	1:A:79:SER:C	1:A:80:ALA:N	1:A:80:ALA:CA	1:A:80:ALA:C	1	5.1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,22)	1:A:14:LYS:C	1:A:15:LEU:N	1:A:15:LEU:CA	1:A:15:LEU:C	4	4.9
(1,22)	1:A:14:LYS:C	1:A:15:LEU:N	1:A:15:LEU:CA	1:A:15:LEU:C	4	4.9
(1,22)	1:A:14:LYS:C	1:A:15:LEU:N	1:A:15:LEU:CA	1:A:15:LEU:C	4	4.9
(1,216)	1:A:10:LEU:CA	1:A:10:LEU:CB	1:A:10:LEU:CG	1:A:10:LEU:CD1	6	4.9
(1,216)	1:A:10:LEU:CA	1:A:10:LEU:CB	1:A:10:LEU:CG	1:A:10:LEU:CD1	6	4.9
(1,216)	1:A:10:LEU:CA	1:A:10:LEU:CB	1:A:10:LEU:CG	1:A:10:LEU:CD1	6	4.9
(1,172)	1:A:92:LEU:C	1:A:93:SER:N	1:A:93:SER:CA	1:A:93:SER:C	2	4.8
(1,172)	1:A:92:LEU:C	1:A:93:SER:N	1:A:93:SER:CA	1:A:93:SER:C	2	4.8
(1,172)	1:A:92:LEU:C	1:A:93:SER:N	1:A:93:SER:CA	1:A:93:SER:C	2	4.8
(1,60)	1:A:36:SER:C	1:A:37:ALA:N	1:A:37:ALA:CA	1:A:37:ALA:C	1	4.7
(1,60)	1:A:36:SER:C	1:A:37:ALA:N	1:A:37:ALA:CA	1:A:37:ALA:C	1	4.7
(1,60)	1:A:36:SER:C	1:A:37:ALA:N	1:A:37:ALA:CA	1:A:37:ALA:C	1	4.7
(1,320)	1:A:69:CYS:N	1:A:69:CYS:CA	1:A:69:CYS:CB	1:A:69:CYS:SG	6	4.7
(1,320)	1:A:69:CYS:N	1:A:69:CYS:CA	1:A:69:CYS:CB	1:A:69:CYS:SG	6	4.7
(1,320)	1:A:69:CYS:N	1:A:69:CYS:CA	1:A:69:CYS:CB	1:A:69:CYS:SG	6	4.7
(1,216)	1:A:10:LEU:CA	1:A:10:LEU:CB	1:A:10:LEU:CG	1:A:10:LEU:CD1	1	4.7
(1,216)	1:A:10:LEU:CA	1:A:10:LEU:CB	1:A:10:LEU:CG	1:A:10:LEU:CD1	1	4.7
(1,216)	1:A:10:LEU:CA	1:A:10:LEU:CB	1:A:10:LEU:CG	1:A:10:LEU:CD1	1	4.7
(1,22)	1:A:14:LYS:C	1:A:15:LEU:N	1:A:15:LEU:CA	1:A:15:LEU:C	5	4.6
(1,22)	1:A:14:LYS:C	1:A:15:LEU:N	1:A:15:LEU:CA	1:A:15:LEU:C	5	4.6
(1,22)	1:A:14:LYS:C	1:A:15:LEU:N	1:A:15:LEU:CA	1:A:15:LEU:C	5	4.6
(1,182)	1:A:98:GLU:C	1:A:99:VAL:N	1:A:99:VAL:CA	1:A:99:VAL:C	4	4.6
(1,182)	1:A:98:GLU:C	1:A:99:VAL:N	1:A:99:VAL:CA	1:A:99:VAL:C	4	4.6
(1,182)	1:A:98:GLU:C	1:A:99:VAL:N	1:A:99:VAL:CA	1:A:99:VAL:C	4	4.6
(1,188)	1:A:101:HIS:C	1:A:102:HIS:N	1:A:102:HIS:CA	1:A:102:HIS:C	1	4.5
(1,188)	1:A:101:HIS:C	1:A:102:HIS:N	1:A:102:HIS:CA	1:A:102:HIS:C	1	4.5
(1,188)	1:A:101:HIS:C	1:A:102:HIS:N	1:A:102:HIS:CA	1:A:102:HIS:C	1	4.5
(1,176)	1:A:94:SER:C	1:A:95:TRP:N	1:A:95:TRP:CA	1:A:95:TRP:C	2	4.5
(1,176)	1:A:94:SER:C	1:A:95:TRP:N	1:A:95:TRP:CA	1:A:95:TRP:C	2	4.5
(1,176)	1:A:94:SER:C	1:A:95:TRP:N	1:A:95:TRP:CA	1:A:95:TRP:C	2	4.5
(1,241)	1:A:25:MET:N	1:A:25:MET:CA	1:A:25:MET:CB	1:A:25:MET:CG	8	4.4
(1,241)	1:A:25:MET:N	1:A:25:MET:CA	1:A:25:MET:CB	1:A:25:MET:CG	8	4.4
(1,241)	1:A:25:MET:N	1:A:25:MET:CA	1:A:25:MET:CB	1:A:25:MET:CG	8	4.4
(1,181)	1:A:98:GLU:N	1:A:98:GLU:CA	1:A:98:GLU:C	1:A:99:VAL:N	6	4.4
(1,181)	1:A:98:GLU:N	1:A:98:GLU:CA	1:A:98:GLU:C	1:A:99:VAL:N	6	4.4
(1,181)	1:A:98:GLU:N	1:A:98:GLU:CA	1:A:98:GLU:C	1:A:99:VAL:N	6	4.4
(1,14)	1:A:9:ILE:C	1:A:10:LEU:N	1:A:10:LEU:CA	1:A:10:LEU:C	1	4.3
(1,14)	1:A:9:ILE:C	1:A:10:LEU:N	1:A:10:LEU:CA	1:A:10:LEU:C	1	4.3
(1,14)	1:A:9:ILE:C	1:A:10:LEU:N	1:A:10:LEU:CA	1:A:10:LEU:C	1	4.3
(1,216)	1:A:10:LEU:CA	1:A:10:LEU:CB	1:A:10:LEU:CG	1:A:10:LEU:CD1	3	4.2
(1,216)	1:A:10:LEU:CA	1:A:10:LEU:CB	1:A:10:LEU:CG	1:A:10:LEU:CD1	3	4.2
(1,216)	1:A:10:LEU:CA	1:A:10:LEU:CB	1:A:10:LEU:CG	1:A:10:LEU:CD1	3	4.2
(1,169)	1:A:91:SER:N	1:A:91:SER:CA	1:A:91:SER:C	1:A:92:LEU:N	3	4.1
(1,169)	1:A:91:SER:N	1:A:91:SER:CA	1:A:91:SER:C	1:A:92:LEU:N	3	4.1
(1,169)	1:A:91:SER:N	1:A:91:SER:CA	1:A:91:SER:C	1:A:92:LEU:N	3	4.1
(1,52)	1:A:31:GLY:C	1:A:32:LYS:N	1:A:32:LYS:CA	1:A:32:LYS:C	7	4.0
(1,52)	1:A:31:GLY:C	1:A:32:LYS:N	1:A:32:LYS:CA	1:A:32:LYS:C	7	4.0
(1,52)	1:A:31:GLY:C	1:A:32:LYS:N	1:A:32:LYS:CA	1:A:32:LYS:C	7	4.0
(1,176)	1:A:94:SER:C	1:A:95:TRP:N	1:A:95:TRP:CA	1:A:95:TRP:C	3	4.0
(1,176)	1:A:94:SER:C	1:A:95:TRP:N	1:A:95:TRP:CA	1:A:95:TRP:C	3	4.0
(1,176)	1:A:94:SER:C	1:A:95:TRP:N	1:A:95:TRP:CA	1:A:95:TRP:C	3	4.0

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,95)	1:A:54:SER:N	1:A:54:SER:CA	1:A:54:SER:C	1:A:55:LYS:N	4	3.9
(1,95)	1:A:54:SER:N	1:A:54:SER:CA	1:A:54:SER:C	1:A:55:LYS:N	4	3.9
(1,95)	1:A:54:SER:N	1:A:54:SER:CA	1:A:54:SER:C	1:A:55:LYS:N	4	3.9
(1,320)	1:A:69:CYS:N	1:A:69:CYS:CA	1:A:69:CYS:CB	1:A:69:CYS:SG	10	3.7
(1,320)	1:A:69:CYS:N	1:A:69:CYS:CA	1:A:69:CYS:CB	1:A:69:CYS:SG	10	3.7
(1,320)	1:A:69:CYS:N	1:A:69:CYS:CA	1:A:69:CYS:CB	1:A:69:CYS:SG	10	3.7
(1,178)	1:A:96:GLY:C	1:A:97:ALA:N	1:A:97:ALA:CA	1:A:97:ALA:C	8	3.4
(1,178)	1:A:96:GLY:C	1:A:97:ALA:N	1:A:97:ALA:CA	1:A:97:ALA:C	8	3.4
(1,178)	1:A:96:GLY:C	1:A:97:ALA:N	1:A:97:ALA:CA	1:A:97:ALA:C	8	3.4
(1,347)	1:A:87:LEU:CA	1:A:87:LEU:CB	1:A:87:LEU:CG	1:A:87:LEU:CD1	7	3.0
(1,347)	1:A:87:LEU:CA	1:A:87:LEU:CB	1:A:87:LEU:CG	1:A:87:LEU:CD1	7	3.0
(1,347)	1:A:87:LEU:CA	1:A:87:LEU:CB	1:A:87:LEU:CG	1:A:87:LEU:CD1	7	3.0
(1,228)	1:A:17:GLN:CA	1:A:17:GLN:CB	1:A:17:GLN:CG	1:A:17:GLN:CD	6	3.0
(1,228)	1:A:17:GLN:CA	1:A:17:GLN:CB	1:A:17:GLN:CG	1:A:17:GLN:CD	6	3.0
(1,228)	1:A:17:GLN:CA	1:A:17:GLN:CB	1:A:17:GLN:CG	1:A:17:GLN:CD	6	3.0
(1,216)	1:A:10:LEU:CA	1:A:10:LEU:CB	1:A:10:LEU:CG	1:A:10:LEU:CD1	5	3.0
(1,216)	1:A:10:LEU:CA	1:A:10:LEU:CB	1:A:10:LEU:CG	1:A:10:LEU:CD1	5	3.0
(1,216)	1:A:10:LEU:CA	1:A:10:LEU:CB	1:A:10:LEU:CG	1:A:10:LEU:CD1	5	3.0
(1,347)	1:A:87:LEU:CA	1:A:87:LEU:CB	1:A:87:LEU:CG	1:A:87:LEU:CD1	8	2.8
(1,347)	1:A:87:LEU:CA	1:A:87:LEU:CB	1:A:87:LEU:CG	1:A:87:LEU:CD1	8	2.8
(1,347)	1:A:87:LEU:CA	1:A:87:LEU:CB	1:A:87:LEU:CG	1:A:87:LEU:CD1	8	2.8
(1,12)	1:A:8:LYS:C	1:A:9:ILE:N	1:A:9:ILE:CA	1:A:9:ILE:C	3	2.3
(1,12)	1:A:8:LYS:C	1:A:9:ILE:N	1:A:9:ILE:CA	1:A:9:ILE:C	3	2.3
(1,12)	1:A:8:LYS:C	1:A:9:ILE:N	1:A:9:ILE:CA	1:A:9:ILE:C	3	2.3
(1,181)	1:A:98:GLU:N	1:A:98:GLU:CA	1:A:98:GLU:C	1:A:99:VAL:N	5	2.2
(1,181)	1:A:98:GLU:N	1:A:98:GLU:CA	1:A:98:GLU:C	1:A:99:VAL:N	5	2.2
(1,181)	1:A:98:GLU:N	1:A:98:GLU:CA	1:A:98:GLU:C	1:A:99:VAL:N	5	2.2
(1,176)	1:A:94:SER:C	1:A:95:TRP:N	1:A:95:TRP:CA	1:A:95:TRP:C	4	2.0
(1,176)	1:A:94:SER:C	1:A:95:TRP:N	1:A:95:TRP:CA	1:A:95:TRP:C	4	2.0
(1,176)	1:A:94:SER:C	1:A:95:TRP:N	1:A:95:TRP:CA	1:A:95:TRP:C	4	2.0
(1,347)	1:A:87:LEU:CA	1:A:87:LEU:CB	1:A:87:LEU:CG	1:A:87:LEU:CD1	4	1.9
(1,347)	1:A:87:LEU:CA	1:A:87:LEU:CB	1:A:87:LEU:CG	1:A:87:LEU:CD1	4	1.9
(1,347)	1:A:87:LEU:CA	1:A:87:LEU:CB	1:A:87:LEU:CG	1:A:87:LEU:CD1	4	1.9
(1,241)	1:A:25:MET:N	1:A:25:MET:CA	1:A:25:MET:CB	1:A:25:MET:CG	2	1.9
(1,241)	1:A:25:MET:N	1:A:25:MET:CA	1:A:25:MET:CB	1:A:25:MET:CG	2	1.9
(1,241)	1:A:25:MET:N	1:A:25:MET:CA	1:A:25:MET:CB	1:A:25:MET:CG	2	1.9
(1,301)	1:A:56:LYS:CG	1:A:56:LYS:CD	1:A:56:LYS:CE	1:A:56:LYS:NZ	1	1.8
(1,301)	1:A:56:LYS:CG	1:A:56:LYS:CD	1:A:56:LYS:CE	1:A:56:LYS:NZ	1	1.8
(1,301)	1:A:56:LYS:CG	1:A:56:LYS:CD	1:A:56:LYS:CE	1:A:56:LYS:NZ	1	1.8
(1,241)	1:A:25:MET:N	1:A:25:MET:CA	1:A:25:MET:CB	1:A:25:MET:CG	5	1.8
(1,241)	1:A:25:MET:N	1:A:25:MET:CA	1:A:25:MET:CB	1:A:25:MET:CG	5	1.8
(1,241)	1:A:25:MET:N	1:A:25:MET:CA	1:A:25:MET:CB	1:A:25:MET:CG	5	1.8
(1,14)	1:A:9:ILE:C	1:A:10:LEU:N	1:A:10:LEU:CA	1:A:10:LEU:C	3	1.6
(1,14)	1:A:9:ILE:C	1:A:10:LEU:N	1:A:10:LEU:CA	1:A:10:LEU:C	3	1.6
(1,14)	1:A:9:ILE:C	1:A:10:LEU:N	1:A:10:LEU:CA	1:A:10:LEU:C	3	1.6
(1,146)	1:A:79:SER:C	1:A:80:ALA:N	1:A:80:ALA:CA	1:A:80:ALA:C	3	1.4
(1,146)	1:A:79:SER:C	1:A:80:ALA:N	1:A:80:ALA:CA	1:A:80:ALA:C	3	1.4
(1,146)	1:A:79:SER:C	1:A:80:ALA:N	1:A:80:ALA:CA	1:A:80:ALA:C	3	1.4
(1,67)	1:A:40:ALA:N	1:A:40:ALA:CA	1:A:40:ALA:C	1:A:41:SER:N	10	1.3
(1,67)	1:A:40:ALA:N	1:A:40:ALA:CA	1:A:40:ALA:C	1:A:41:SER:N	10	1.3
(1,67)	1:A:40:ALA:N	1:A:40:ALA:CA	1:A:40:ALA:C	1:A:41:SER:N	10	1.3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,289)	1:A:52:LYS:CB	1:A:52:LYS:CG	1:A:52:LYS:CD	1:A:52:LYS:CE	1	1.2
(1,289)	1:A:52:LYS:CB	1:A:52:LYS:CG	1:A:52:LYS:CD	1:A:52:LYS:CE	1	1.2
(1,289)	1:A:52:LYS:CB	1:A:52:LYS:CG	1:A:52:LYS:CD	1:A:52:LYS:CE	1	1.2
(1,14)	1:A:9:ILE:C	1:A:10:LEU:N	1:A:10:LEU:CA	1:A:10:LEU:C	6	1.2
(1,14)	1:A:9:ILE:C	1:A:10:LEU:N	1:A:10:LEU:CA	1:A:10:LEU:C	6	1.2
(1,14)	1:A:9:ILE:C	1:A:10:LEU:N	1:A:10:LEU:CA	1:A:10:LEU:C	6	1.2
(1,22)	1:A:14:LYS:C	1:A:15:LEU:N	1:A:15:LEU:CA	1:A:15:LEU:C	3	1.1
(1,22)	1:A:14:LYS:C	1:A:15:LEU:N	1:A:15:LEU:CA	1:A:15:LEU:C	3	1.1
(1,22)	1:A:14:LYS:C	1:A:15:LEU:N	1:A:15:LEU:CA	1:A:15:LEU:C	3	1.1