



Full wwPDB NMR Structure Validation Report ⓘ

Jul 21, 2026 – 07:15 pm BST

PDB ID : 9QSB / pdb_00009qsb
BMRB ID : 34989
Title : The solution structure of the cyanobacterial calcium binding protein CSE at 293 K
Authors : Kleusberg, F.; Scholl, J.; Selim, K.A.; Coles, M.
Deposited on : 2025-04-04

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

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

A user guide is available at

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

with specific help available everywhere you see the ⓘ symbol.

The types of validation reports are described at

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

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

MolProbity : 4-5-2 with Phenix2.0
Percentile statistics : 20250101.v01 (using entries in the PDB archive January 1st 2025)
wwPDB-RCI : v_1n_11_5_13_A (Berjanski et al., 2005)
PANAV : Wang et al. (2010)
wwPDB-ShiftChecker : v1.2
BMRB Restraints Analysis : v1.2
Ideal geometry (proteins) : Engh & Huber (2001)
Ideal geometry (DNA, RNA) : Parkinson et al. (1996)
Validation Pipeline (wwPDB-VP) : 2.50

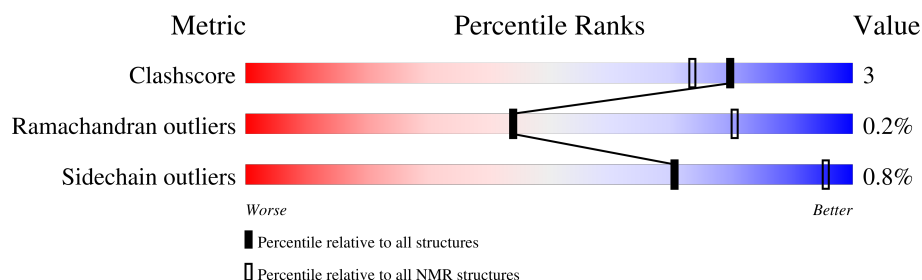
1 Overall quality at a glance

The following experimental techniques were used to determine the structure:

SOLUTION NMR

The overall completeness of chemical shifts assignment is 95%.

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



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

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

Mol	Chain	Length	Quality of chain
1	A	96	35% 39% 26%

2 Ensemble composition and analysis

This entry contains 12 models. Model 1 is the overall representative, medoid model (most similar to other models).

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

Well-defined (core) protein residues			
Well-defined core	Residue range (total)	Backbone RMSD (Å)	Medoid model
1	A:3-A:73 (71)	0.93	1

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

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

The models can be grouped into 2 clusters and 1 single-model cluster was found.

Cluster number	Models
1	1, 2, 3, 4, 6, 11, 12
2	5, 7, 8, 9
Single-model clusters	10

3 Entry composition

There are 2 unique types of molecules in this entry. The entry contains 1451 atoms, of which 708 are hydrogens and 0 are deuteriums.

- Molecule 1 is a protein called Asr1131 protein.

Mol	Chain	Residues	Atoms						Trace
1	A	96	Total	C	H	N	O	S	0
			1449	452	708	132	156	1	

There are 19 discrepancies between the modelled and reference sequences:

Chain	Residue	Modelled	Actual	Comment	Reference
A	-18	GLY	-	expression tag	UNP Q8YXT0
A	-17	SER	-	expression tag	UNP Q8YXT0
A	-16	SER	-	expression tag	UNP Q8YXT0
A	-15	HIS	-	expression tag	UNP Q8YXT0
A	-14	HIS	-	expression tag	UNP Q8YXT0
A	-13	HIS	-	expression tag	UNP Q8YXT0
A	-12	HIS	-	expression tag	UNP Q8YXT0
A	-11	HIS	-	expression tag	UNP Q8YXT0
A	-10	HIS	-	expression tag	UNP Q8YXT0
A	-9	SER	-	expression tag	UNP Q8YXT0
A	-8	SER	-	expression tag	UNP Q8YXT0
A	-7	GLY	-	expression tag	UNP Q8YXT0
A	-6	LEU	-	expression tag	UNP Q8YXT0
A	-5	VAL	-	expression tag	UNP Q8YXT0
A	-4	PRO	-	expression tag	UNP Q8YXT0
A	-3	ARG	-	expression tag	UNP Q8YXT0
A	-2	GLY	-	expression tag	UNP Q8YXT0
A	-1	SER	-	expression tag	UNP Q8YXT0
A	0	HIS	-	expression tag	UNP Q8YXT0

- Molecule 2 is CALCIUM ION (CCD ID: CA) (formula: Ca) (labeled as "Ligand of Interest" by depositor).

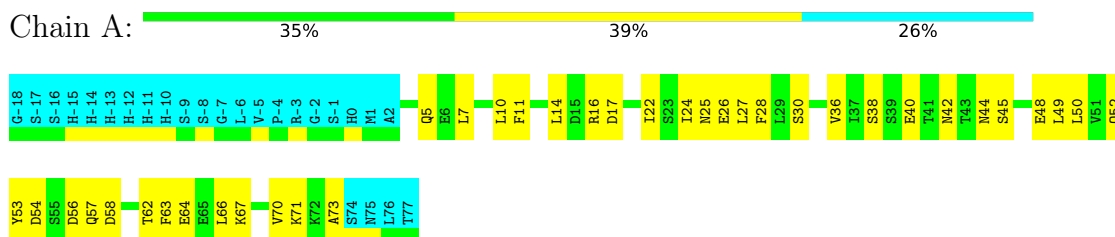
Mol	Chain	Residues	Atoms	
2	A	2	Total	Ca
			2	2

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: Asr1131 protein

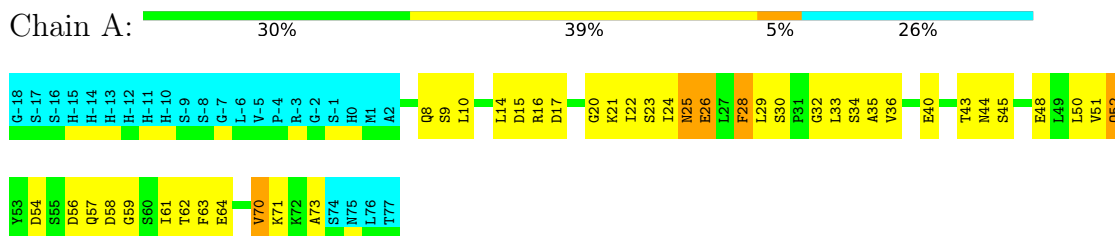


4.2 Scores per residue for each member of the ensemble

Colouring as in section 4.1 above.

4.2.1 Score per residue for model 1 (medoid)

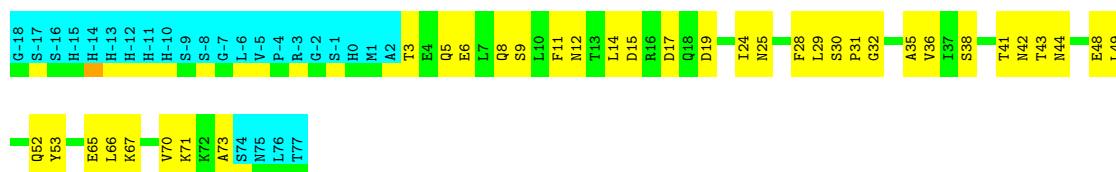
- Molecule 1: Asr1131 protein



4.2.2 Score per residue for model 2

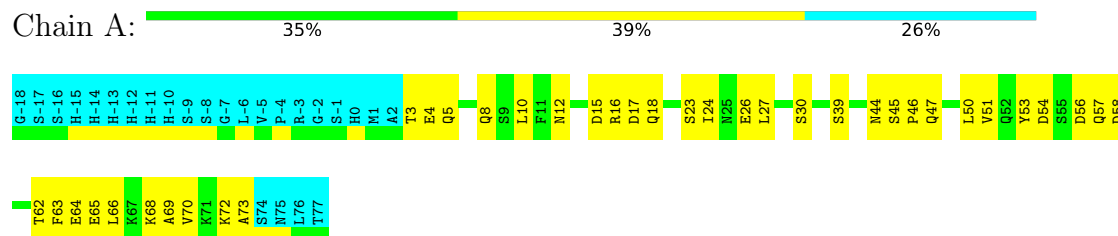
- Molecule 1: Asr1131 protein





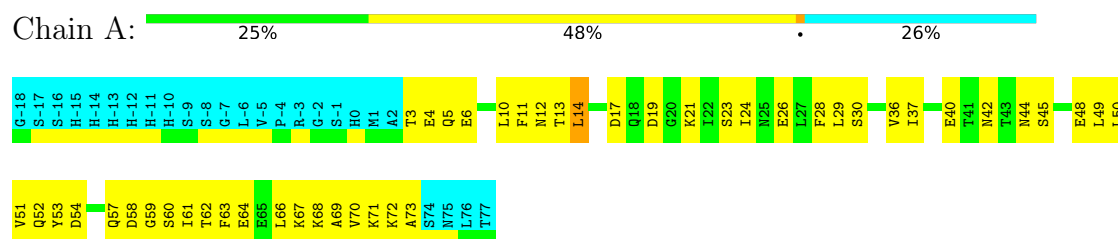
4.2.3 Score per residue for model 3

- Molecule 1: Asr1131 protein



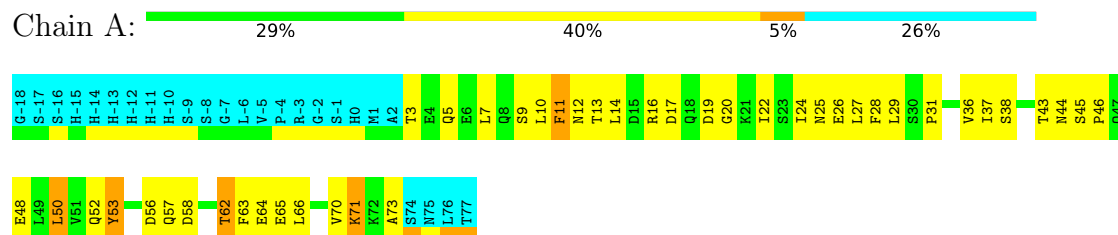
4.2.4 Score per residue for model 4

- Molecule 1: Asr1131 protein



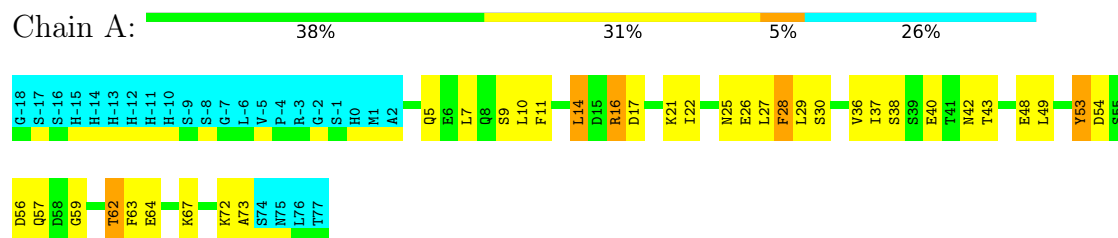
4.2.5 Score per residue for model 5

- Molecule 1: Asr1131 protein



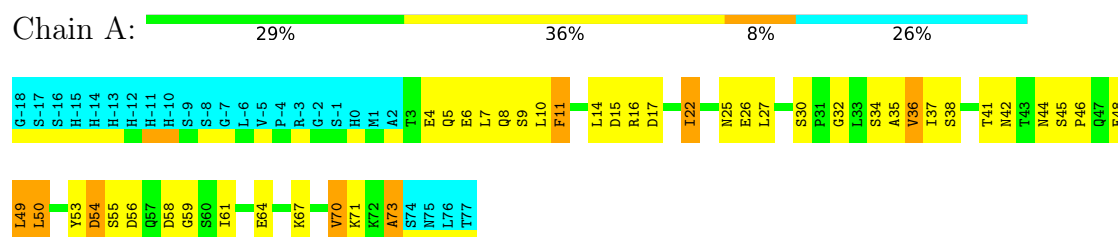
4.2.6 Score per residue for model 6

- Molecule 1: Asr1131 protein



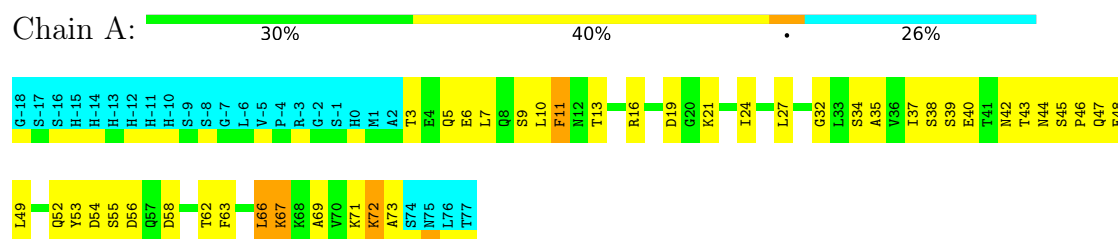
4.2.7 Score per residue for model 7

- Molecule 1: Asr1131 protein



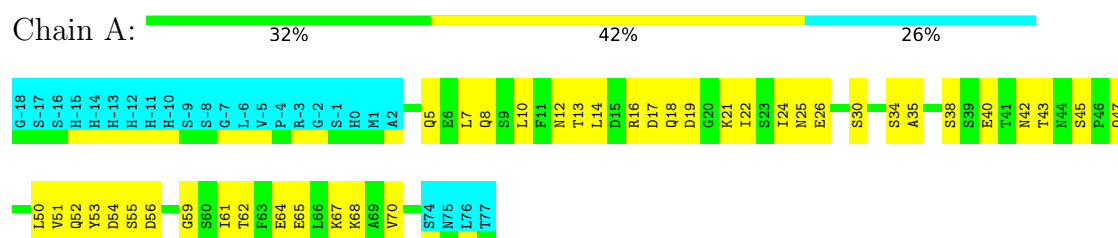
4.2.8 Score per residue for model 8

- Molecule 1: Asr1131 protein



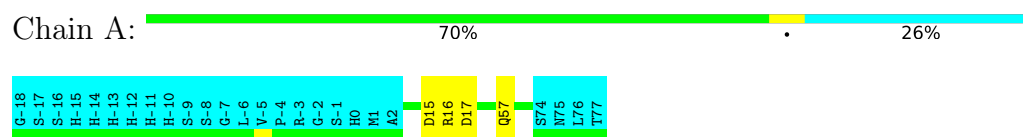
4.2.9 Score per residue for model 9

- Molecule 1: Asr1131 protein



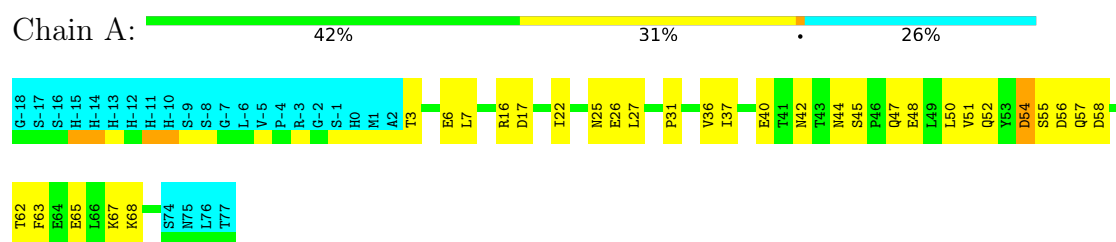
4.2.10 Score per residue for model 10

- Molecule 1: Asr1131 protein



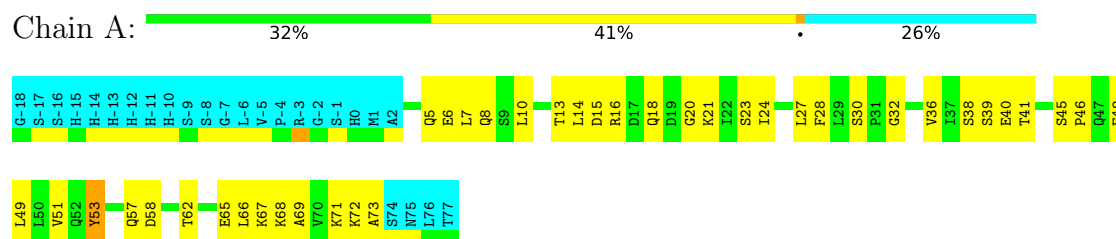
4.2.11 Score per residue for model 11

- Molecule 1: Asr1131 protein



4.2.12 Score per residue for model 12

- Molecule 1: Asr1131 protein



5 Refinement protocol and experimental data overview

The models were refined using the following method: *matrix relaxation*.

Of the 12200 calculated structures, 12 were deposited, based on the following criterion: *back calculated data agree with experimental NOESY spectrum*.

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

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

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

Chemical shift file(s)	working_cs.cif
Number of chemical shift lists	1
Total number of shifts	1117
Number of shifts mapped to atoms	1117
Number of unparsed shifts	0
Number of shifts with mapping errors	0
Number of shifts with mapping warnings	0
Assignment completeness (well-defined parts)	95%

6 Model quality

6.1 Standard geometry

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

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

Mol	Chain	Bond lengths		Bond angles	
		RMSZ	#Z>5	RMSZ	#Z>5
1	A	1.97±0.34	13±6/559 (2.4± 1.1%)	2.47±0.29	41±14/756 (5.4± 1.9%)
All	All	2.00	158/6708 (2.4%)	2.49	487/9072 (5.4%)

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

Mol	Chain	Chirality	Planarity
1	A	0.0±0.0	0.9±0.8
All	All	0	11

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

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)	Models	
								Worst	Total
1	A	30	SER	CA-CB	10.05	1.67	1.52	1	3
1	A	25	ASN	CA-C	9.54	1.65	1.52	5	1
1	A	22	ILE	CA-C	8.48	1.62	1.52	6	2
1	A	52	GLN	N-CA	-8.39	1.35	1.46	9	1
1	A	36	VAL	CA-C	-8.02	1.43	1.52	5	1
1	A	61	ILE	CA-C	-7.53	1.43	1.52	7	1
1	A	38	SER	N-CA	7.27	1.55	1.46	8	2
1	A	35	ALA	C-N	7.26	1.43	1.33	7	2
1	A	34	SER	C-N	7.20	1.43	1.33	1	1
1	A	57	GLN	CA-CB	7.13	1.64	1.53	3	3
1	A	11	PHE	N-CA	-6.99	1.38	1.46	8	1
1	A	16	ARG	CZ-NH2	-6.95	1.24	1.33	12	1
1	A	63	PHE	CA-CB	6.90	1.64	1.53	11	2
1	A	9	SER	CA-C	-6.88	1.44	1.52	7	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)	Models	
								Worst	Total
1	A	44	ASN	CA-C	6.83	1.62	1.52	2	2
1	A	28	PHE	N-CA	-6.81	1.37	1.46	12	1
1	A	48	GLU	CA-C	6.78	1.61	1.52	12	1
1	A	45	SER	N-CA	6.78	1.52	1.45	8	1
1	A	65	GLU	CA-CB	6.78	1.64	1.53	5	1
1	A	48	GLU	N-CA	-6.68	1.38	1.46	7	1
1	A	15	ASP	CA-C	6.65	1.62	1.53	2	2
1	A	48	GLU	C-N	6.63	1.42	1.33	12	2
1	A	12	ASN	CA-C	6.63	1.61	1.52	9	1
1	A	3	THR	CA-C	-6.53	1.44	1.53	3	1
1	A	72	LYS	CA-CB	6.42	1.63	1.53	6	2
1	A	28	PHE	C-N	6.41	1.42	1.33	6	1
1	A	68	LYS	C-N	6.39	1.42	1.33	3	1
1	A	46	PRO	N-CA	-6.36	1.39	1.47	8	2
1	A	40	GLU	CA-C	6.36	1.61	1.52	11	3
1	A	46	PRO	CA-C	6.36	1.61	1.52	8	2
1	A	58	ASP	N-CA	-6.34	1.36	1.45	8	1
1	A	47	GLN	CA-C	6.32	1.60	1.52	9	1
1	A	40	GLU	N-CA	6.30	1.53	1.46	8	1
1	A	35	ALA	N-CA	-6.24	1.38	1.46	2	3
1	A	13	THR	CA-C	-6.23	1.44	1.52	12	1
1	A	35	ALA	CA-C	6.23	1.60	1.52	7	1
1	A	54	ASP	CA-CB	6.19	1.60	1.52	3	1
1	A	29	LEU	CA-C	-6.15	1.44	1.52	6	1
1	A	73	ALA	CA-C	6.14	1.60	1.52	6	1
1	A	42	ASN	CA-C	6.12	1.61	1.53	8	1
1	A	39	SER	CA-C	-6.11	1.45	1.52	12	1
1	A	16	ARG	CA-C	-6.11	1.45	1.52	7	1
1	A	64	GLU	CA-CB	6.07	1.62	1.53	9	1
1	A	43	THR	CA-C	-6.05	1.45	1.52	2	2
1	A	30	SER	CA-C	6.03	1.60	1.52	3	1
1	A	22	ILE	CA-CB	-5.98	1.47	1.54	5	1
1	A	15	ASP	C-N	5.94	1.42	1.33	12	1
1	A	25	ASN	CA-CB	5.90	1.63	1.53	6	1
1	A	29	LEU	C-N	5.90	1.41	1.33	6	1
1	A	10	LEU	C-O	-5.89	1.17	1.24	4	1
1	A	26	GLU	CA-C	5.88	1.60	1.52	5	1
1	A	19	ASP	CA-C	-5.86	1.45	1.52	4	3
1	A	50	LEU	CA-C	5.84	1.60	1.52	9	1
1	A	34	SER	N-CA	5.82	1.53	1.46	8	1
1	A	69	ALA	CA-C	-5.82	1.44	1.52	12	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)	Models	
								Worst	Total
1	A	49	LEU	N-CA	-5.81	1.39	1.46	4	1
1	A	36	VAL	N-CA	-5.80	1.39	1.46	5	1
1	A	20	GLY	N-CA	5.79	1.54	1.45	12	1
1	A	10	LEU	CA-C	5.79	1.60	1.52	7	1
1	A	61	ILE	CA-CB	5.78	1.60	1.54	9	1
1	A	55	SER	N-CA	-5.76	1.39	1.46	11	1
1	A	60	SER	N-CA	5.74	1.53	1.45	4	1
1	A	8	GLN	CA-C	5.72	1.60	1.52	12	2
1	A	6	GLU	CA-C	5.72	1.60	1.52	12	1
1	A	39	SER	N-CA	5.71	1.53	1.46	3	1
1	A	26	GLU	C-N	5.71	1.41	1.33	5	1
1	A	54	ASP	N-CA	-5.69	1.39	1.46	7	1
1	A	70	VAL	CA-CB	-5.68	1.47	1.54	4	3
1	A	63	PHE	C-N	5.66	1.41	1.33	11	1
1	A	44	ASN	N-CA	5.64	1.53	1.46	7	1
1	A	36	VAL	CA-CB	5.64	1.60	1.54	4	1
1	A	6	GLU	C-N	5.63	1.41	1.34	7	1
1	A	26	GLU	CA-CB	5.62	1.62	1.53	3	2
1	A	42	ASN	CA-CB	5.61	1.62	1.53	2	1
1	A	68	LYS	CA-C	5.60	1.60	1.52	12	1
1	A	47	GLN	CA-CB	5.60	1.62	1.53	8	1
1	A	49	LEU	C-O	-5.57	1.17	1.24	4	1
1	A	51	VAL	N-CA	-5.55	1.39	1.46	4	1
1	A	59	GLY	CA-C	-5.50	1.44	1.51	9	2
1	A	66	LEU	CA-CB	5.48	1.62	1.53	4	1
1	A	57	GLN	C-N	5.46	1.41	1.33	3	1
1	A	11	PHE	CA-C	5.43	1.59	1.52	2	1
1	A	10	LEU	CA-CB	5.42	1.61	1.53	12	3
1	A	56	ASP	C-N	5.39	1.41	1.33	9	1
1	A	5	GLN	C-O	-5.38	1.17	1.24	4	1
1	A	9	SER	CA-CB	5.37	1.61	1.53	2	1
1	A	56	ASP	CA-C	-5.37	1.45	1.52	9	1
1	A	14	LEU	N-CA	5.37	1.53	1.46	4	1
1	A	15	ASP	CA-CB	5.36	1.59	1.53	3	1
1	A	22	ILE	C-N	5.36	1.41	1.33	9	1
1	A	5	GLN	C-N	5.36	1.40	1.33	3	1
1	A	31	PRO	CA-C	-5.34	1.44	1.52	2	1
1	A	11	PHE	CA-CB	5.34	1.61	1.53	5	1
1	A	27	LEU	C-O	5.33	1.30	1.24	11	1
1	A	27	LEU	CA-CB	5.30	1.61	1.53	5	1
1	A	9	SER	N-CA	5.29	1.52	1.46	5	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)	Models	
								Worst	Total
1	A	44	ASN	CA-CB	5.28	1.61	1.53	8	1
1	A	21	LYS	CA-C	-5.25	1.46	1.52	9	2
1	A	7	LEU	C-N	5.25	1.41	1.33	12	2
1	A	37	ILE	CA-C	5.24	1.59	1.52	7	1
1	A	58	ASP	CA-CB	5.23	1.63	1.53	11	1
1	A	8	GLN	N-CA	-5.21	1.39	1.46	3	1
1	A	32	GLY	CA-C	5.21	1.59	1.51	12	1
1	A	67	LYS	CA-CB	5.20	1.61	1.53	11	1
1	A	45	SER	C-N	5.19	1.40	1.34	3	1
1	A	53	TYR	N-CA	-5.18	1.39	1.46	2	1
1	A	23	SER	CA-CB	5.15	1.61	1.53	3	1
1	A	14	LEU	CA-CB	5.12	1.61	1.53	9	1
1	A	71	LYS	CA-C	5.12	1.59	1.52	1	1
1	A	23	SER	CA-C	5.12	1.60	1.53	3	2
1	A	62	THR	C-N	5.12	1.40	1.33	8	1
1	A	50	LEU	N-CA	5.11	1.52	1.46	5	1
1	A	8	GLN	C-N	5.10	1.40	1.33	2	1
1	A	17	ASP	CA-CB	5.09	1.61	1.53	2	1
1	A	18	GLN	CA-CB	5.09	1.60	1.53	9	1
1	A	62	THR	CA-C	-5.05	1.46	1.53	3	1
1	A	16	ARG	CD-NE	5.05	1.53	1.46	8	1
1	A	21	LYS	C-O	-5.05	1.17	1.23	8	1
1	A	27	LEU	N-CA	5.05	1.52	1.46	12	1
1	A	49	LEU	C-N	5.04	1.40	1.33	2	1
1	A	50	LEU	CB-CG	5.04	1.63	1.53	1	1
1	A	4	GLU	C-N	5.04	1.40	1.33	4	1
1	A	36	VAL	C-N	5.03	1.40	1.33	12	1
1	A	52	GLN	CA-CB	5.02	1.61	1.53	1	1
1	A	67	LYS	CA-C	5.00	1.59	1.52	9	1
1	A	10	LEU	CB-CG	5.00	1.63	1.53	7	1

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

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)	Models	
								Worst	Total
1	A	73	ALA	CA-C-N	13.90	138.90	120.28	8	5
1	A	73	ALA	C-N-CA	13.90	138.90	120.28	8	5
1	A	58	ASP	CA-CB-CG	10.32	122.92	112.60	5	7
1	A	8	GLN	N-CA-C	10.31	122.52	111.28	7	3
1	A	56	ASP	CA-CB-CG	9.90	122.50	112.60	8	5
1	A	36	VAL	N-CA-C	9.89	120.71	110.62	2	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)	Models	
								Worst	Total
1	A	45	SER	O-C-N	-9.77	114.21	121.83	5	5
1	A	12	ASN	OD1-CG-ND2	-9.50	113.10	122.60	2	2
1	A	53	TYR	N-CA-C	9.22	124.79	113.17	8	1
1	A	53	TYR	O-C-N	-9.19	111.36	122.20	5	1
1	A	52	GLN	N-CA-C	9.18	121.29	111.28	5	4
1	A	49	LEU	CA-C-N	9.16	132.56	120.28	8	2
1	A	49	LEU	C-N-CA	9.16	132.56	120.28	8	2
1	A	5	GLN	OE1-CD-NE2	-9.02	113.58	122.60	9	4
1	A	37	ILE	N-CA-C	8.82	119.61	110.62	11	1
1	A	62	THR	CA-CB-OG1	8.80	122.80	109.60	4	2
1	A	28	PHE	CA-CB-CG	-8.75	105.05	113.80	2	2
1	A	39	SER	N-CA-C	8.73	120.41	111.07	8	1
1	A	13	THR	N-CA-C	-8.64	104.77	114.62	8	1
1	A	67	LYS	N-CA-C	8.54	120.58	111.28	2	4
1	A	33	LEU	CA-C-O	8.47	129.40	120.42	1	1
1	A	25	ASN	CA-C-N	8.46	131.96	120.54	9	4
1	A	25	ASN	C-N-CA	8.46	131.96	120.54	9	4
1	A	18	GLN	OE1-CD-NE2	-8.46	114.14	122.60	3	2
1	A	29	LEU	N-CA-C	8.45	121.25	111.11	4	4
1	A	45	SER	CA-C-O	-8.44	112.24	120.26	11	1
1	A	9	SER	CA-C-N	8.43	131.40	120.44	2	3
1	A	9	SER	C-N-CA	8.43	131.40	120.44	2	3
1	A	14	LEU	N-CA-C	8.39	123.52	113.28	5	4
1	A	6	GLU	CA-C-N	8.28	131.37	120.28	11	4
1	A	6	GLU	C-N-CA	8.28	131.37	120.28	11	4
1	A	45	SER	CB-CA-C	-8.21	100.74	110.76	4	1
1	A	66	LEU	N-CA-C	8.18	119.82	111.07	12	1
1	A	69	ALA	N-CA-C	8.16	119.95	111.14	8	1
1	A	44	ASN	CA-CB-CG	8.15	120.75	112.60	5	3
1	A	17	ASP	CA-C-N	8.12	133.63	122.34	4	3
1	A	17	ASP	C-N-CA	8.12	133.63	122.34	4	3
1	A	8	GLN	OE1-CD-NE2	-8.11	114.49	122.60	2	2
1	A	45	SER	CA-C-N	8.11	129.97	119.84	12	3
1	A	45	SER	C-N-CA	8.11	129.97	119.84	12	3
1	A	31	PRO	CA-C-N	8.10	128.94	119.94	11	2
1	A	31	PRO	C-N-CA	8.10	128.94	119.94	11	2
1	A	45	SER	N-CA-CB	-8.09	102.60	111.10	11	1
1	A	16	ARG	NE-CZ-NH2	-8.09	111.92	119.20	9	3
1	A	54	ASP	CA-C-N	7.97	130.96	120.28	7	3
1	A	54	ASP	C-N-CA	7.97	130.96	120.28	7	3
1	A	27	LEU	O-C-N	-7.94	113.71	122.12	3	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)	Models	
								Worst	Total
1	A	48	GLU	O-C-N	-7.93	113.72	122.12	4	3
1	A	44	ASN	CA-C-O	7.84	129.14	119.11	4	1
1	A	37	ILE	CA-C-N	7.78	131.04	120.54	8	2
1	A	37	ILE	C-N-CA	7.78	131.04	120.54	8	2
1	A	17	ASP	CA-CB-CG	7.67	120.27	112.60	4	4
1	A	10	LEU	N-CA-C	7.60	120.23	111.11	6	3
1	A	25	ASN	CA-CB-CG	7.56	120.16	112.60	1	1
1	A	64	GLU	N-CA-C	7.47	119.07	111.07	1	3
1	A	24	ILE	N-CA-C	7.46	119.12	110.62	2	4
1	A	24	ILE	O-C-N	-7.41	114.63	121.89	12	1
1	A	12	ASN	CA-C-N	7.40	130.20	120.28	9	1
1	A	12	ASN	C-N-CA	7.40	130.20	120.28	9	1
1	A	30	SER	O-C-N	-7.38	114.71	121.42	9	3
1	A	4	GLU	N-CA-C	7.36	119.30	111.28	4	3
1	A	57	GLN	OE1-CD-NE2	-7.28	115.32	122.60	3	2
1	A	70	VAL	O-C-N	-7.19	114.86	121.91	2	3
1	A	49	LEU	N-CA-C	7.19	119.73	111.11	12	2
1	A	15	ASP	O-C-N	-7.17	114.55	123.01	7	2
1	A	27	LEU	CA-C-N	7.15	129.86	120.28	7	1
1	A	27	LEU	C-N-CA	7.15	129.86	120.28	7	1
1	A	38	SER	N-CA-C	7.15	119.07	111.28	9	1
1	A	30	SER	CA-C-O	-7.13	113.94	119.71	4	2
1	A	16	ARG	NE-CZ-NH1	7.12	128.62	121.50	1	3
1	A	70	VAL	N-CA-C	7.11	117.87	110.62	7	2
1	A	63	PHE	CA-C-N	7.11	129.80	120.28	4	1
1	A	63	PHE	C-N-CA	7.11	129.80	120.28	4	1
1	A	48	GLU	CA-C-N	7.02	130.02	120.54	8	3
1	A	48	GLU	C-N-CA	7.02	130.02	120.54	8	3
1	A	36	VAL	O-C-N	-7.00	114.94	121.94	1	1
1	A	11	PHE	N-CA-C	6.92	118.48	111.07	7	1
1	A	17	ASP	CB-CA-C	6.90	121.66	109.65	3	2
1	A	65	GLU	N-CA-C	6.85	118.75	111.28	11	4
1	A	63	PHE	CB-CA-C	6.81	122.09	110.79	8	3
1	A	68	LYS	CA-C-N	6.80	129.69	120.44	9	3
1	A	68	LYS	C-N-CA	6.80	129.69	120.44	9	3
1	A	47	GLN	O-C-N	-6.79	114.92	122.12	11	1
1	A	55	SER	N-CA-C	-6.79	103.88	111.28	7	3
1	A	5	GLN	N-CA-C	6.79	118.68	111.28	6	3
1	A	62	THR	CA-C-N	6.78	129.37	120.28	12	3
1	A	62	THR	C-N-CA	6.78	129.37	120.28	12	3
1	A	44	ASN	N-CA-C	6.77	120.02	111.69	11	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)	Models	
								Worst	Total
1	A	21	LYS	CA-C-O	6.76	128.91	121.06	12	2
1	A	15	ASP	CA-CB-CG	6.75	119.36	112.60	7	2
1	A	23	SER	CA-C-N	6.71	130.00	120.53	12	2
1	A	23	SER	C-N-CA	6.71	130.00	120.53	12	2
1	A	67	LYS	CA-C-N	6.70	129.25	120.28	8	1
1	A	67	LYS	C-N-CA	6.70	129.25	120.28	8	1
1	A	54	ASP	CA-CB-CG	6.68	119.28	112.60	9	1
1	A	3	THR	N-CA-CB	6.67	119.84	110.04	5	2
1	A	44	ASN	O-C-N	-6.66	112.71	122.43	4	1
1	A	63	PHE	CA-C-O	6.63	127.59	120.10	6	1
1	A	30	SER	CA-C-N	6.62	126.56	119.28	6	3
1	A	30	SER	C-N-CA	6.62	126.56	119.28	6	3
1	A	26	GLU	CA-C-N	6.60	129.13	120.28	1	4
1	A	26	GLU	C-N-CA	6.60	129.13	120.28	1	4
1	A	16	ARG	N-CA-C	-6.58	105.14	113.43	6	1
1	A	19	ASP	CA-C-N	6.56	131.48	121.51	8	1
1	A	19	ASP	C-N-CA	6.56	131.48	121.51	8	1
1	A	73	ALA	N-CA-CB	-6.54	100.50	110.12	2	1
1	A	56	ASP	CA-C-O	6.54	127.21	119.56	6	1
1	A	11	PHE	CB-CA-C	6.53	121.13	110.88	6	1
1	A	45	SER	N-CA-C	6.52	114.09	108.22	11	2
1	A	71	LYS	N-CA-C	6.50	118.36	111.28	12	4
1	A	40	GLU	CA-C-O	6.49	127.43	120.10	12	2
1	A	42	ASN	CB-CA-C	6.46	120.51	111.86	7	2
1	A	9	SER	O-C-N	-6.45	115.42	122.07	8	1
1	A	38	SER	CA-C-N	6.44	129.43	120.29	2	2
1	A	38	SER	C-N-CA	6.44	129.43	120.29	2	2
1	A	71	LYS	CA-C-N	6.42	128.88	120.28	7	1
1	A	71	LYS	C-N-CA	6.42	128.88	120.28	7	1
1	A	63	PHE	O-C-N	-6.42	115.32	122.12	5	1
1	A	54	ASP	CB-CA-C	6.41	121.89	111.05	7	1
1	A	56	ASP	CA-C-N	6.40	131.22	122.19	1	1
1	A	56	ASP	C-N-CA	6.40	131.22	122.19	1	1
1	A	10	LEU	CA-C-N	6.40	128.77	120.44	7	5
1	A	10	LEU	C-N-CA	6.40	128.77	120.44	7	5
1	A	31	PRO	N-CA-CB	6.40	110.30	103.39	11	1
1	A	63	PHE	CA-CB-CG	-6.40	107.40	113.80	1	2
1	A	22	ILE	N-CA-CB	6.38	118.68	111.21	5	3
1	A	36	VAL	CA-C-N	6.34	129.14	120.46	5	2
1	A	36	VAL	C-N-CA	6.34	129.14	120.46	5	2
1	A	10	LEU	CA-C-O	-6.33	114.12	120.90	8	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)	Models	
								Worst	Total
1	A	55	SER	CA-C-N	6.30	131.39	120.68	11	1
1	A	55	SER	C-N-CA	6.30	131.39	120.68	11	1
1	A	53	TYR	CA-CB-CG	-6.29	102.57	113.90	12	2
1	A	38	SER	O-C-N	-6.29	115.55	122.09	2	2
1	A	51	VAL	N-CA-C	6.29	116.46	110.74	1	2
1	A	69	ALA	CA-C-N	6.28	128.47	120.56	4	2
1	A	69	ALA	C-N-CA	6.28	128.47	120.56	4	2
1	A	25	ASN	N-CA-C	6.28	118.93	111.71	7	2
1	A	41	THR	CA-C-N	6.26	131.71	122.82	2	1
1	A	41	THR	C-N-CA	6.26	131.71	122.82	2	1
1	A	19	ASP	N-CA-CB	-6.25	101.48	110.80	9	1
1	A	35	ALA	CA-C-N	6.25	128.44	120.56	7	2
1	A	35	ALA	C-N-CA	6.25	128.44	120.56	7	2
1	A	36	VAL	CA-C-O	6.23	127.78	121.17	11	1
1	A	32	GLY	O-C-N	6.22	128.29	122.13	1	1
1	A	62	THR	N-CA-CB	6.21	119.15	110.26	6	1
1	A	6	GLU	CA-C-O	6.20	127.08	120.70	7	1
1	A	58	ASP	CA-C-O	6.19	126.09	119.34	5	3
1	A	57	GLN	O-C-N	-6.19	114.36	122.59	6	1
1	A	12	ASN	CB-CG-OD1	6.18	133.17	120.80	2	1
1	A	66	LEU	O-C-N	-6.17	114.68	122.27	4	2
1	A	32	GLY	CA-C-O	-6.17	113.52	120.30	8	1
1	A	58	ASP	CA-C-N	6.15	130.88	120.91	1	1
1	A	58	ASP	C-N-CA	6.15	130.88	120.91	1	1
1	A	49	LEU	CA-C-O	6.11	127.44	120.90	12	1
1	A	42	ASN	CA-CB-CG	-6.08	106.52	112.60	4	1
1	A	64	GLU	O-C-N	-6.08	115.68	122.12	7	1
1	A	66	LEU	CA-C-N	6.07	128.69	120.38	5	2
1	A	66	LEU	C-N-CA	6.07	128.69	120.38	5	2
1	A	47	GLN	CA-C-O	6.06	126.97	120.55	9	1
1	A	8	GLN	CA-C-N	6.05	128.67	120.44	1	1
1	A	8	GLN	C-N-CA	6.05	128.67	120.44	1	1
1	A	61	ILE	N-CA-CB	6.04	118.96	111.41	1	1
1	A	64	GLU	CA-C-O	6.04	126.95	120.55	5	1
1	A	48	GLU	N-CA-C	6.03	117.85	111.28	7	1
1	A	13	THR	CA-C-N	6.00	128.93	120.28	9	1
1	A	13	THR	C-N-CA	6.00	128.93	120.28	9	1
1	A	42	ASN	N-CA-C	5.99	119.82	111.74	9	1
1	A	46	PRO	N-CA-C	5.97	124.78	112.47	5	1
1	A	20	GLY	CA-C-O	-5.96	112.20	119.06	1	1
1	A	28	PHE	O-C-N	-5.96	115.24	122.22	5	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)	Models	
								Worst	Total
1	A	7	LEU	CA-C-O	5.95	126.73	120.42	5	1
1	A	59	GLY	N-CA-C	-5.94	107.46	115.36	9	2
1	A	54	ASP	CA-C-O	-5.93	114.52	121.16	1	1
1	A	34	SER	CB-CA-C	-5.92	101.34	110.81	7	1
1	A	22	ILE	CB-CA-C	-5.91	103.74	111.25	1	1
1	A	37	ILE	N-CA-CB	5.90	117.45	110.55	7	2
1	A	5	GLN	CG-CD-OE1	5.88	132.56	120.80	7	1
1	A	10	LEU	N-CA-CB	5.86	118.51	110.01	1	2
1	A	3	THR	O-C-N	-5.85	116.18	122.85	8	2
1	A	72	LYS	N-CA-C	5.85	117.33	111.07	6	2
1	A	73	ALA	N-CA-C	5.84	117.64	111.28	2	2
1	A	34	SER	N-CA-C	5.84	118.11	111.11	7	2
1	A	3	THR	OG1-CB-CG2	-5.80	97.70	109.30	4	1
1	A	24	ILE	CA-C-O	-5.79	114.93	120.95	9	1
1	A	39	SER	N-CA-CB	5.78	118.39	110.01	8	1
1	A	50	LEU	CA-C-O	5.77	126.54	120.42	11	1
1	A	27	LEU	N-CA-C	5.77	117.56	111.28	8	2
1	A	66	LEU	CB-CA-C	5.76	120.65	110.85	8	1
1	A	40	GLU	N-CA-C	5.75	118.32	111.71	12	1
1	A	57	GLN	CG-CD-NE2	5.74	125.01	116.40	5	1
1	A	14	LEU	O-C-N	-5.72	115.23	122.27	7	1
1	A	7	LEU	CA-C-N	5.72	127.88	120.44	11	1
1	A	7	LEU	C-N-CA	5.72	127.88	120.44	11	1
1	A	42	ASN	N-CA-CB	-5.71	102.72	111.74	11	1
1	A	7	LEU	CB-CA-C	5.69	120.52	110.85	6	1
1	A	62	THR	O-C-N	-5.68	116.61	123.03	1	2
1	A	43	THR	CA-C-N	5.68	131.66	121.66	1	1
1	A	43	THR	C-N-CA	5.68	131.66	121.66	1	1
1	A	72	LYS	O-C-N	-5.68	116.22	122.07	4	1
1	A	61	ILE	CA-C-N	5.68	133.07	122.74	4	1
1	A	61	ILE	C-N-CA	5.68	133.07	122.74	4	1
1	A	32	GLY	N-CA-C	5.67	119.50	112.64	2	2
1	A	28	PHE	N-CA-CB	-5.65	101.59	110.46	4	1
1	A	20	GLY	N-CA-C	-5.63	107.22	115.72	5	1
1	A	50	LEU	N-CA-C	5.59	117.82	111.11	4	1
1	A	53	TYR	CA-C-O	5.59	125.78	119.18	5	2
1	A	7	LEU	N-CA-CB	-5.58	101.92	110.12	11	1
1	A	6	GLU	N-CA-CB	-5.57	101.92	110.16	4	1
1	A	15	ASP	CA-C-O	5.57	127.40	121.05	7	2
1	A	3	THR	CA-C-N	5.55	128.28	120.28	2	1
1	A	3	THR	C-N-CA	5.55	128.28	120.28	2	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)	Models	
								Worst	Total
1	A	28	PHE	CA-C-N	5.54	128.26	120.28	1	2
1	A	28	PHE	C-N-CA	5.54	128.26	120.28	1	2
1	A	57	GLN	CA-C-O	5.51	128.39	120.51	6	1
1	A	52	GLN	OE1-CD-NE2	-5.51	117.09	122.60	11	1
1	A	72	LYS	CA-C-N	5.49	127.64	120.28	3	1
1	A	72	LYS	C-N-CA	5.49	127.64	120.28	3	1
1	A	34	SER	CA-C-N	5.48	128.07	120.29	9	1
1	A	34	SER	C-N-CA	5.48	128.07	120.29	9	1
1	A	13	THR	CB-CA-C	-5.47	100.51	110.63	4	1
1	A	55	SER	N-CA-CB	5.47	118.81	110.44	9	2
1	A	12	ASN	CB-CA-C	5.47	119.87	110.79	4	1
1	A	73	ALA	O-C-N	-5.45	116.34	122.12	6	4
1	A	70	VAL	N-CA-CB	-5.45	103.13	110.54	3	1
1	A	59	GLY	O-C-N	-5.45	115.60	122.41	6	1
1	A	42	ASN	OD1-CG-ND2	-5.44	117.16	122.60	6	1
1	A	51	VAL	O-C-N	-5.44	116.24	121.90	9	1
1	A	68	LYS	N-CA-C	5.44	117.21	111.28	11	2
1	A	26	GLU	N-CA-CB	-5.42	101.87	110.22	11	1
1	A	64	GLU	N-CA-CB	5.42	118.18	110.16	6	1
1	A	5	GLN	CA-C-N	5.42	127.54	120.28	9	1
1	A	5	GLN	C-N-CA	5.42	127.54	120.28	9	1
1	A	50	LEU	O-C-N	-5.42	116.03	122.20	7	1
1	A	52	GLN	CB-CG-CD	5.38	121.75	112.60	9	1
1	A	11	PHE	CA-C-N	5.35	127.45	120.28	4	1
1	A	11	PHE	C-N-CA	5.35	127.45	120.28	4	1
1	A	26	GLU	N-CA-C	5.35	117.81	111.33	4	2
1	A	67	LYS	N-CA-CB	5.35	117.99	110.12	4	1
1	A	8	GLN	CA-C-O	-5.35	115.21	120.82	9	1
1	A	4	GLU	CA-C-N	5.34	127.44	120.28	7	1
1	A	4	GLU	C-N-CA	5.34	127.44	120.28	7	1
1	A	51	VAL	CA-C-O	-5.34	115.51	121.17	12	1
1	A	17	ASP	N-CA-C	-5.33	105.07	113.02	1	2
1	A	48	GLU	N-CA-CB	5.32	117.87	109.94	2	1
1	A	51	VAL	N-CA-CB	5.30	116.75	110.55	11	1
1	A	23	SER	O-C-N	-5.28	116.57	122.75	4	3
1	A	71	LYS	O-C-N	-5.25	116.56	122.12	8	1
1	A	70	VAL	CA-C-N	5.24	127.30	120.28	5	1
1	A	70	VAL	C-N-CA	5.24	127.30	120.28	5	1
1	A	37	ILE	O-C-N	-5.24	116.79	121.87	11	1
1	A	14	LEU	CA-C-O	5.22	125.98	119.97	6	2
1	A	16	ARG	O-C-N	-5.22	115.10	122.10	8	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)	Models	
								Worst	Total
1	A	16	ARG	N-CA-CB	-5.22	101.67	110.49	9	1
1	A	9	SER	CA-C-O	5.20	126.28	120.82	8	2
1	A	13	THR	CA-C-O	5.20	126.06	120.55	5	1
1	A	5	GLN	CG-CD-NE2	5.19	124.19	116.40	8	1
1	A	47	GLN	CA-C-N	5.18	127.74	120.28	3	1
1	A	47	GLN	C-N-CA	5.18	127.74	120.28	3	1
1	A	41	THR	N-CA-CB	5.18	118.12	110.56	7	1
1	A	12	ASN	CB-CG-ND2	5.16	124.14	116.40	3	1
1	A	21	LYS	N-CA-C	5.15	116.36	108.42	4	1
1	A	38	SER	CA-CB-OG	5.15	121.40	111.10	12	1
1	A	52	GLN	O-C-N	-5.13	116.78	122.07	1	1
1	A	67	LYS	CA-C-O	5.13	125.99	120.55	2	1
1	A	28	PHE	N-CA-C	5.12	119.38	113.18	2	1
1	A	19	ASP	CB-CA-C	5.12	118.91	109.99	9	1
1	A	15	ASP	CA-C-N	5.12	127.14	120.28	10	1
1	A	15	ASP	C-N-CA	5.12	127.14	120.28	10	1
1	A	44	ASN	N-CA-CB	5.11	118.41	110.44	1	1
1	A	17	ASP	N-CA-CB	-5.10	102.63	110.44	6	1
1	A	35	ALA	CA-C-O	5.10	125.83	120.42	9	1
1	A	46	PRO	N-CD-CG	5.10	110.84	103.20	3	1
1	A	4	GLU	CA-C-O	-5.08	115.17	120.55	4	1
1	A	15	ASP	N-CA-CB	-5.07	103.11	110.36	2	1
1	A	19	ASP	CA-CB-CG	5.06	117.66	112.60	2	1
1	A	65	GLU	N-CA-CB	5.02	117.50	110.12	9	1
1	A	61	ILE	O-C-N	-5.01	117.23	122.95	4	1
1	A	59	GLY	CA-C-N	-5.00	114.74	122.59	4	1
1	A	59	GLY	C-N-CA	-5.00	114.74	122.59	4	1
1	A	70	VAL	CA-C-O	5.00	126.15	120.95	7	1

There are no chirality outliers.

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

Mol	Chain	Res	Type	Group	Models (Total)
1	A	53	TYR	Sidechain,Peptide	6
1	A	28	PHE	Sidechain	2
1	A	16	ARG	Sidechain	2
1	A	11	PHE	Sidechain	1

6.2 Too-close contacts

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

Mol	Chain	Non-H	H(model)	H(added)	Clashes
1	A	553	540	540	3±2
2	A	2	0	0	0±0
All	All	6660	6480	6480	36

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 3.

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

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:25:ASN:O	1:A:29:LEU:HG	1.07	1.45	1	1
1:A:24:ILE:HG13	1:A:50:LEU:HD22	1.03	1.30	3	1
1:A:7:LEU:HD21	1:A:67:LYS:HA	0.99	1.28	8	1
1:A:7:LEU:CD2	1:A:67:LYS:HA	0.91	1.95	8	2
1:A:54:ASP:OD1	2:A:202:CA:CA	0.88	1.50	6	4
1:A:7:LEU:HD21	1:A:67:LYS:CA	0.78	2.08	8	1
1:A:25:ASN:O	1:A:29:LEU:CG	0.71	2.32	1	1
1:A:26:GLU:HA	1:A:29:LEU:HD12	0.69	1.65	1	1
1:A:24:ILE:HD11	1:A:50:LEU:HB2	0.68	1.64	3	1
1:A:43:THR:HG21	1:A:53:TYR:CE2	0.67	2.24	9	1
1:A:7:LEU:HD23	1:A:67:LYS:HA	0.63	1.71	7	1
1:A:43:THR:CG2	1:A:53:TYR:CE2	0.60	2.84	9	1
1:A:14:LEU:HD22	1:A:37:ILE:HD12	0.60	1.73	4	1
1:A:38:SER:OG	1:A:43:THR:OG1	0.57	2.21	6	1
1:A:24:ILE:CG1	1:A:50:LEU:HD22	0.56	2.20	3	1
1:A:72:LYS:HG2	1:A:72:LYS:O	0.52	2.03	12	1
1:A:50:LEU:C	1:A:50:LEU:HD23	0.52	2.29	7	1
1:A:43:THR:CG2	1:A:53:TYR:HE2	0.52	2.17	9	1
1:A:48:GLU:HG3	1:A:52:GLN:NE2	0.51	2.21	1	1
1:A:7:LEU:CD2	1:A:67:LYS:CA	0.49	2.82	8	1
1:A:24:ILE:HD12	1:A:50:LEU:HD22	0.49	1.83	5	1
1:A:21:LYS:HG2	1:A:62:THR:HG22	0.47	1.87	6	1
1:A:26:GLU:HA	1:A:29:LEU:CD1	0.46	2.39	1	1
1:A:24:ILE:HG13	1:A:50:LEU:CD2	0.44	2.21	3	1
1:A:14:LEU:HD22	1:A:37:ILE:CD1	0.44	2.40	4	1
1:A:40:GLU:HG3	1:A:70:VAL:HG22	0.44	1.87	1	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:41:THR:HA	1:A:73:ALA:CB	0.43	2.44	12	1
1:A:14:LEU:O	1:A:14:LEU:HD23	0.42	2.13	12	1
1:A:32:GLY:O	1:A:36:VAL:HG23	0.42	2.14	7	1
1:A:7:LEU:HD22	1:A:70:VAL:HB	0.41	1.92	7	1
1:A:7:LEU:HD11	1:A:66:LEU:HG	0.41	1.93	8	1
1:A:11:PHE:CD2	1:A:22:ILE:HD11	0.40	2.52	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	71/96 (74%)	69±2 (97±3%)	2±2 (3±3%)	0±0 (0±1%)	44	80
All	All	852/1152 (74%)	825 (97%)	25 (3%)	2 (0%)	44	80

All 1 unique Ramachandran outliers are listed below.

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	57	GLN	2

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	65/86 (76%)	64±1 (99±1%)	0±1 (1±1%)	70	95
All	All	780/1032 (76%)	774 (99%)	6 (1%)	70	95

All 6 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	24	ILE	1
1	A	11	PHE	1
1	A	43	THR	1
1	A	62	THR	1
1	A	14	LEU	1
1	A	49	LEU	1

6.3.3 RNA [i](#)

There are no RNA molecules in this entry.

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

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

6.5 Carbohydrates [i](#)

There are no oligosaccharides in this entry.

6.6 Ligand geometry [i](#)

Of 2 ligands modelled in this entry, 2 are monoatomic - leaving 0 for Mogul analysis.

6.7 Other polymers [i](#)

There are no such molecules in this entry.

6.8 Polymer linkage issues [i](#)

There are no chain breaks in this entry.

7 Chemical shift validation

The completeness of assignment taking into account all chemical shift lists is 95% for the well-defined parts and 90% for the entire structure.

7.1 Chemical shift list 1

File name: working_cs.cif

Chemical shift list name: *assigned_chemical_shifts_1*

7.1.1 Bookkeeping

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

Total number of shifts	1117
Number of shifts mapped to atoms	1117
Number of unparsed shifts	0
Number of shifts with mapping errors	0
Number of shifts with mapping warnings	0
Number of shift outliers (ShiftChecker)	0

7.1.2 Chemical shift referencing

The following table shows the suggested chemical shift referencing corrections.

Nucleus	# values	Correction $\pm$ precision, ppm	Suggested action
$^{13}\text{C}_\alpha$	93	0.12 ± 0.13	None needed (< 0.5 ppm)
$^{13}\text{C}_\beta$	88	0.54 ± 0.14	Should be checked
$^{13}\text{C}'$	85	-0.16 ± 0.14	None needed (< 0.5 ppm)
^{15}N	90	0.51 ± 0.28	None needed (imprecise)

7.1.3 Completeness of resonance assignments

The following table shows the completeness of the chemical shift assignments for the well-defined regions of the structure. The overall completeness is 95%, i.e. 889 atoms were assigned a chemical shift out of a possible 935. 12 out of 12 assigned methyl groups (LEU and VAL) were assigned stereospecifically.

	Total	^1H	^{13}C	^{15}N
Backbone	348/354 (98%)	143/143 (100%)	136/142 (96%)	69/69 (100%)
Sidechain	503/542 (93%)	340/348 (98%)	152/176 (86%)	11/18 (61%)

Continued on next page...

Continued from previous page...

	Total	¹ H	¹³ C	¹⁵ N
Aromatic	38/39 (97%)	19/19 (100%)	19/20 (95%)	0/0 (—%)
Overall	889/935 (95%)	502/510 (98%)	307/338 (91%)	80/87 (92%)

The following table shows the completeness of the chemical shift assignments for the full structure. The overall completeness is 90%, i.e. 1117 atoms were assigned a chemical shift out of a possible 1239. 15 out of 15 assigned methyl groups (LEU and VAL) were assigned stereospecifically.

	Total	¹ H	¹³ C	¹⁵ N
Backbone	460/480 (96%)	192/195 (98%)	178/192 (93%)	90/93 (97%)
Sidechain	617/671 (92%)	418/434 (96%)	186/215 (87%)	13/22 (59%)
Aromatic	40/88 (45%)	19/47 (40%)	21/34 (62%)	0/7 (0%)
Overall	1117/1239 (90%)	629/676 (93%)	385/441 (87%)	103/122 (84%)

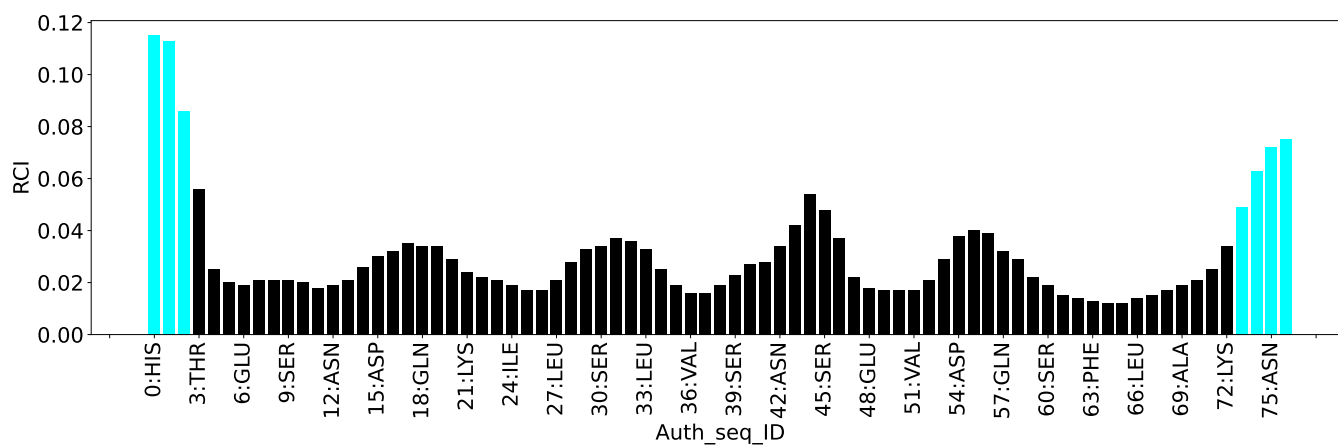
7.1.4 Statistically unusual chemical shifts [i](#)

There are no statistically unusual chemical shifts.

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	927
Intra-residue ($ i-j =0$)	246
Sequential ($ i-j =1$)	300
Medium range ($ i-j >1$ and $ i-j <5$)	212
Long range ($ i-j \geq 5$)	61
Inter-chain	0
Hydrogen bond restraints	108
Disulfide bond restraints	0
Total dihedral-angle restraints	336
Number of unmapped restraints	0
Number of restraints per residue	12.9
Number of long range restraints per residue ¹	0.8

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)	98.3	0.2
0.2-0.5 (Medium)	118.8	0.5
>0.5 (Large)	64.4	5.39

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)	103.8	9.99
10.0-20.0 (Medium)	42.6	19.94
>20.0 (Large)	31.8	170.55

9 Distance violation analysis ⓘ

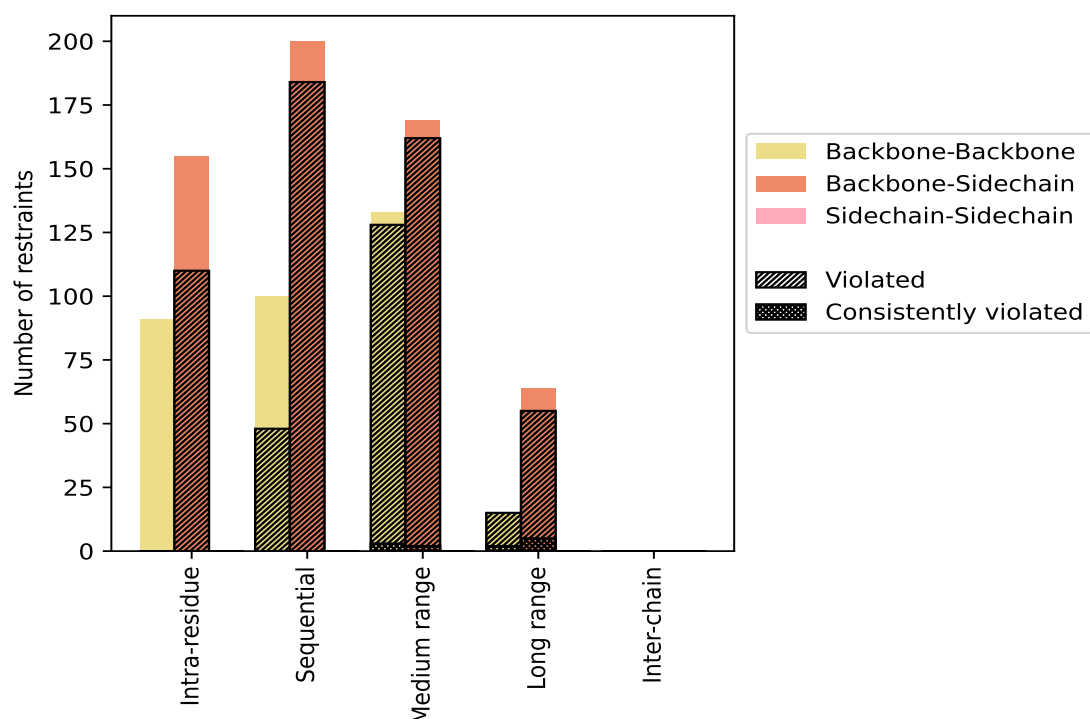
9.1 Summary of distance violations ⓘ

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 ($i-j =0$)	246	26.5	110	44.7	11.9	0	0.0	0.0
Backbone-Backbone	91	9.8	0	0.0	0.0	0	0.0	0.0
Backbone-Sidechain	155	16.7	110	71.0	11.9	0	0.0	0.0
Sidechain-Sidechain	0	0.0	0	0.0	0.0	0	0.0	0.0
Sequential ($i-j =1$)	300	32.4	232	77.3	25.0	0	0.0	0.0
Backbone-Backbone	100	10.8	48	48.0	5.2	0	0.0	0.0
Backbone-Sidechain	200	21.6	184	92.0	19.8	0	0.0	0.0
Sidechain-Sidechain	0	0.0	0	0.0	0.0	0	0.0	0.0
Medium range ($i-j >1$ & $i-j <5$)	212	22.9	203	95.8	21.9	3	1.4	0.3
Backbone-Backbone	133	14.3	128	96.2	13.8	3	2.3	0.3
Backbone-Sidechain	79	8.5	75	94.9	8.1	0	0.0	0.0
Sidechain-Sidechain	0	0.0	0	0.0	0.0	0	0.0	0.0
Long range ($i-j \geq 5$)	61	6.6	52	85.2	5.6	5	8.2	0.5
Backbone-Backbone	15	1.6	15	100.0	1.6	2	13.3	0.2
Backbone-Sidechain	46	5.0	37	80.4	4.0	3	6.5	0.3
Sidechain-Sidechain	0	0.0	0	0.0	0.0	0	0.0	0.0
Inter-chain	0	0.0	0	0.0	0.0	0	0.0	0.0
Backbone-Backbone	0	0.0	0	0.0	0.0	0	0.0	0.0
Backbone-Sidechain	0	0.0	0	0.0	0.0	0	0.0	0.0
Sidechain-Sidechain	0	0.0	0	0.0	0.0	0	0.0	0.0
Hydrogen bond	108	11.7	105	97.2	11.3	4	3.7	0.4
Disulfide bond	0	0.0	0	0.0	0.0	0	0.0	0.0
Total	927	100.0	702	75.7	75.7	12	1.3	1.3
Backbone-Backbone	339	36.6	191	56.3	20.6	5	1.5	0.5
Backbone-Sidechain	588	63.4	511	86.9	55.1	7	1.2	0.8
Sidechain-Sidechain	0	0.0	0	0.0	0.0	0	0.0	0.0

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

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



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

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

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

Model ID	Number of violations						Mean (Å)	Max (Å)	SD ⁶ (Å)	Median (Å)
	IR ¹	SQ ²	MR ³	LR ⁴	IC ⁵	Total				
1	32	88	142	36	0	298	0.45	4.3	0.55	0.25
2	33	88	146	39	0	306	0.39	4.84	0.46	0.23
3	26	81	135	40	0	282	0.47	5.39	0.55	0.29
4	28	79	137	45	0	289	0.44	4.64	0.49	0.27
5	30	91	144	30	0	295	0.37	3.15	0.33	0.26
6	30	87	124	43	0	284	0.42	4.69	0.52	0.25
7	33	75	132	34	0	274	0.39	2.49	0.39	0.26
8	39	91	137	43	0	310	0.42	2.87	0.45	0.24
9	36	70	140	45	0	291	0.47	2.62	0.47	0.28
10	29	58	108	41	0	236	0.49	3.03	0.51	0.3

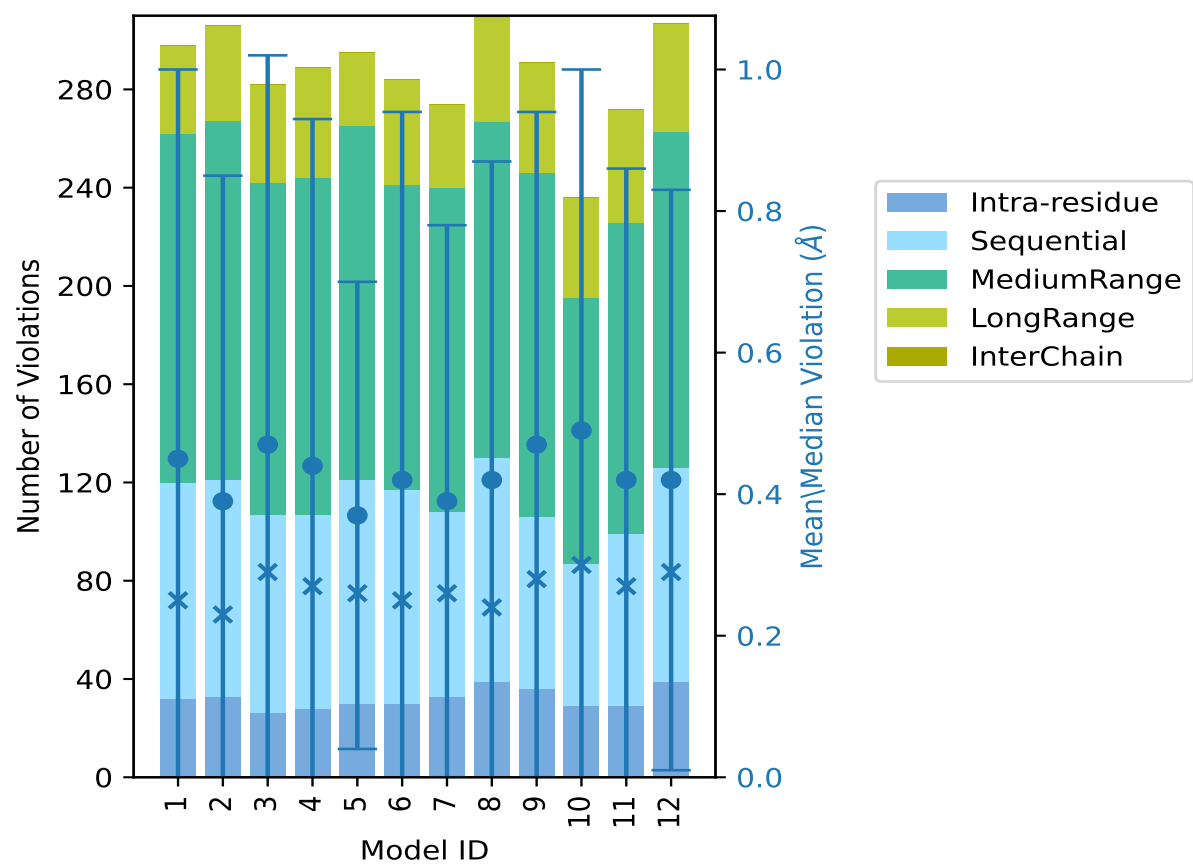
Continued on next page...

Continued from previous page...

Model ID	Number of violations						Mean (Å)	Max (Å)	SD ⁶ (Å)	Median (Å)
	IR ¹	SQ ²	MR ³	LR ⁴	IC ⁵	Total				
11	29	70	127	46	0	272	0.42	2.75	0.44	0.27
12	39	87	137	44	0	307	0.42	2.54	0.41	0.29

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

9.2.1 Bar graph : Distance Violation statistics for each model ⓘ



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

9.3 Distance violation statistics for the ensemble ⓘ

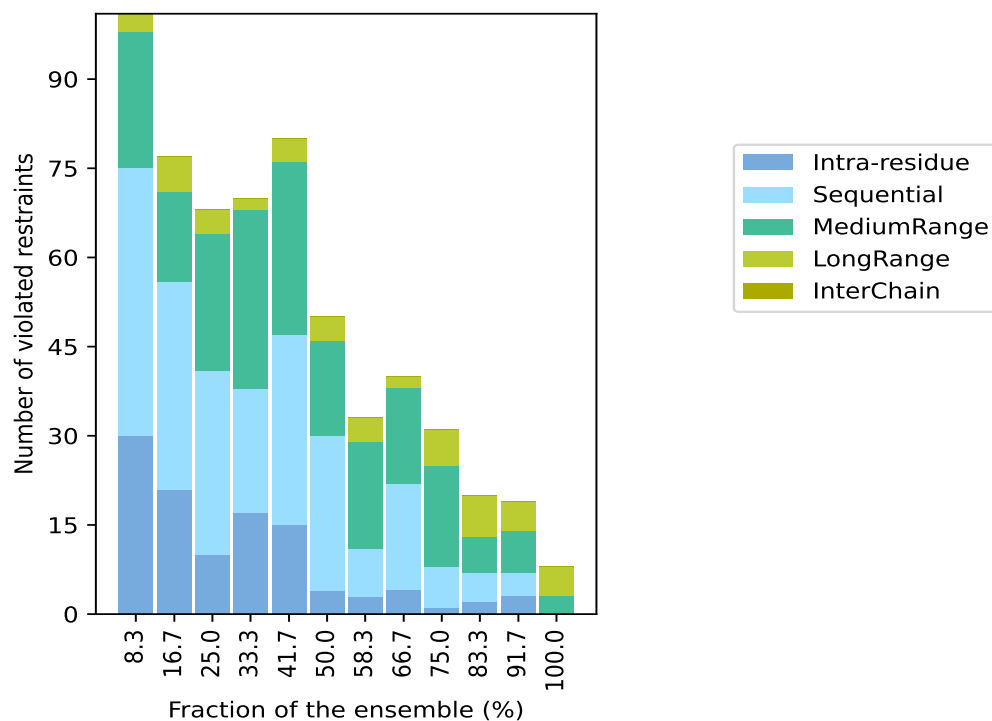
Violation analysis may find that some restraints are violated in few models and some are violated in most of models. The following table provides this information as number of violated restraints for a given fraction of the ensemble. In total, 222(IR:136, SQ:68, MR:9, LR:9, IC:0) restraints are not violated in the ensemble.

Number of violated restraints						Fraction of the ensemble	
IR ¹	SQ ²	MR ³	LR ⁴	IC ⁵	Total	Count ⁶	%
30	45	23	3	0	101	1	8.3
21	35	15	6	0	77	2	16.7
10	31	23	4	0	68	3	25.0
17	21	30	2	0	70	4	33.3
15	32	29	4	0	80	5	41.7
4	26	16	4	0	50	6	50.0
3	8	18	4	0	33	7	58.3
4	18	16	2	0	40	8	66.7
1	7	17	6	0	31	9	75.0
2	5	6	7	0	20	10	83.3
3	4	7	5	0	19	11	91.7
0	0	3	5	0	8	12	100.0

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

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

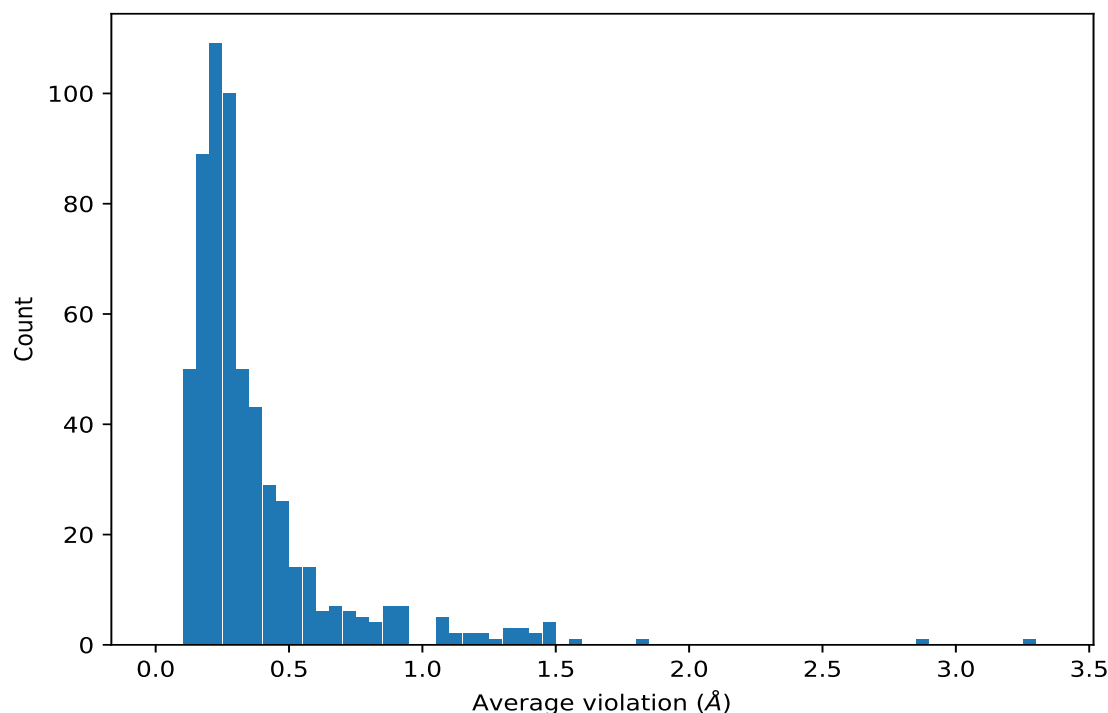
9.3.1 Bar graph : Distance violation statistics for the ensemble ⓘ



9.4 Most violated distance restraints in the ensemble [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)
(4,1)	1:37:A:ILE:H	1:49:A:LEU:CD1	12	1.81	0.92	1.9
(1,5)	1:-16:A:SER:H	1:-18:A:GLY:CA	12	1.41	0.53	1.51
(3,23)	1:18:A:GLN:H	1:15:A:ASP:O	12	1.35	0.72	1.5
(1,302)	1:24:A:ILE:H	1:60:A:SER:CB	12	1.33	0.73	1.25
(1,597)	1:54:A:ASP:H	1:57:A:GLN:CA	12	1.29	0.52	1.29
(3,89)	1:63:A:PHE:H	1:20:A:GLY:O	12	1.21	0.66	1.3
(1,674)	1:63:A:PHE:H	1:21:A:LYS:CB	12	1.18	0.58	1.36
(1,683)	1:63:A:PHE:H	1:20:A:GLY:C	12	1.14	0.64	1.16
(1,301)	1:24:A:ILE:H	1:60:A:SER:CA	12	1.08	0.41	1.15

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)	Median (Å)
(3,90)	1:63:A:PHE:N	1:20:A:GLY:O	12	1.07	0.65	1.14
(3,78)	1:58:A:ASP:N	1:54:A:ASP:OD1	12	0.4	0.29	0.26
(1,354)	1:30:A:SER:H	1:28:A:PHE:CA	12	0.32	0.14	0.32
(3,35)	1:24:A:ILE:H	1:59:A:GLY:O	11	1.57	0.39	1.46
(3,36)	1:24:A:ILE:N	1:59:A:GLY:O	11	1.47	0.3	1.39
(1,303)	1:24:A:ILE:H	1:59:A:GLY:C	11	1.46	0.33	1.43
(3,24)	1:18:A:GLN:N	1:15:A:ASP:O	11	1.45	0.68	1.58
(1,673)	1:63:A:PHE:H	1:21:A:LYS:CA	11	1.22	0.42	1.26
(1,86)	1:2:A:ALA:H	1:70:A:VAL:CG1	11	1.14	0.87	1.18
(1,407)	1:36:A:VAL:H	1:37:A:ILE:CG1	11	0.89	0.66	0.61
(1,411)	1:37:A:ILE:H	1:14:A:LEU:CD1	11	0.84	0.49	0.54
(1,640)	1:60:A:SER:H	1:23:A:SER:CA	11	0.74	0.28	0.81
(1,459)	1:41:A:THR:H	1:37:A:ILE:CG2	11	0.72	0.5	0.83
(1,352)	1:30:A:SER:H	1:26:A:GLU:CA	11	0.72	0.35	0.66
(3,48)	1:36:A:VAL:N	1:32:A:GLY:O	11	0.67	0.73	0.38
(1,622)	1:58:A:ASP:H	1:56:A:ASP:CB	11	0.56	0.28	0.66
(3,80)	1:58:A:ASP:N	1:56:A:ASP:OD1	11	0.49	0.28	0.43
(1,682)	1:63:A:PHE:H	1:66:A:LEU:CB	11	0.48	0.23	0.53
(1,631)	1:58:A:ASP:H	1:58:A:ASP:OD1	11	0.46	0.16	0.55
(1,397)	1:35:A:ALA:H	1:38:A:SER:CB	11	0.44	0.16	0.44
(1,448)	1:40:A:GLU:H	1:36:A:VAL:CA	11	0.42	0.22	0.41
(1,669)	1:62:A:THR:H	1:62:A:THR:CG2	11	0.41	0.16	0.41
(3,84)	1:60:A:SER:N	1:58:A:ASP:OD1	11	0.39	0.16	0.4
(1,215)	1:16:A:ARG:H	1:17:A:ASP:CB	11	0.38	0.14	0.37
(1,457)	1:40:A:GLU:H	1:36:A:VAL:C	11	0.37	0.2	0.36
(1,632)	1:58:A:ASP:N	1:58:A:ASP:OD1	11	0.36	0.12	0.38
(1,426)	1:37:A:ILE:H	1:38:A:SER:CB	11	0.23	0.09	0.25
(1,161)	1:10:A:LEU:H	1:11:A:PHE:CB	11	0.22	0.08	0.19
(1,810)	1:76:A:LEU:H	1:1:A:MET:CB	10	3.27	1.19	3.12
(3,75)	1:57:A:GLN:H	1:54:A:ASP:O	10	1.46	0.96	1.5
(3,76)	1:57:A:GLN:N	1:54:A:ASP:O	10	1.34	0.93	1.32
(1,663)	1:62:A:THR:H	1:21:A:LYS:CG	10	1.07	0.45	1.12
(1,811)	1:76:A:LEU:H	1:70:A:VAL:CG1	10	1.05	0.41	0.88
(3,47)	1:36:A:VAL:H	1:32:A:GLY:O	10	0.77	0.74	0.42
(1,630)	1:58:A:ASP:H	1:56:A:ASP:CG	10	0.71	0.33	0.78
(3,79)	1:58:A:ASP:H	1:56:A:ASP:OD1	10	0.68	0.38	0.64
(1,238)	1:18:A:GLN:H	1:15:A:ASP:C	10	0.64	0.27	0.69
(3,45)	1:35:A:ALA:H	1:31:A:PRO:O	10	0.58	0.58	0.33
(1,325)	1:26:A:GLU:H	1:28:A:PHE:CB	10	0.55	0.37	0.52
(1,504)	1:44:A:ASN:H	1:48:A:GLU:CG	10	0.49	0.29	0.38
(1,494)	1:43:A:THR:H	1:49:A:LEU:CD1	10	0.47	0.34	0.43
(3,55)	1:40:A:GLU:H	1:36:A:VAL:O	10	0.42	0.22	0.42

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)	Median (Å)
(3,56)	1:40:A:GLU:N	1:36:A:VAL:O	10	0.41	0.2	0.4
(1,613)	1:56:A:ASP:H	1:65:A:GLU:CG	10	0.4	0.28	0.24
(1,654)	1:61:A:ILE:H	1:23:A:SER:CA	10	0.38	0.16	0.41
(1,648)	1:60:A:SER:H	1:61:A:ILE:CG1	10	0.38	0.22	0.29
(3,2)	1:6:A:GLU:N	1:3:A:THR:O	10	0.38	0.16	0.32
(1,707)	1:65:A:GLU:H	1:66:A:LEU:CB	10	0.35	0.13	0.3
(3,83)	1:60:A:SER:H	1:58:A:ASP:OD1	10	0.34	0.16	0.31
(1,515)	1:45:A:SER:H	1:48:A:GLU:CG	10	0.33	0.17	0.28
(1,34)	1:-10:A:HIS:H	1:-10:A:HIS:CB	10	0.33	0.13	0.34
(1,106)	1:5:A:GLN:H	1:4:A:GLU:CG	10	0.3	0.13	0.27
(1,703)	1:65:A:GLU:H	1:64:A:GLU:CG	10	0.29	0.1	0.34
(1,485)	1:43:A:THR:H	1:39:A:SER:CA	10	0.29	0.13	0.25
(1,284)	1:22:A:ILE:H	1:61:A:ILE:C	10	0.27	0.18	0.2
(1,633)	1:58:A:ASP:H	1:58:A:ASP:CG	10	0.26	0.08	0.26
(1,600)	1:55:A:SER:H	1:54:A:ASP:CB	10	0.2	0.06	0.2
(1,634)	1:59:A:GLY:H	1:50:A:LEU:CD2	9	1.39	0.77	1.44
(3,29)	1:19:A:ASP:H	1:17:A:ASP:OD1	9	0.94	0.83	0.55
(1,410)	1:37:A:ILE:H	1:10:A:LEU:CD2	9	0.79	0.33	0.8
(3,71)	1:54:A:ASP:H	1:50:A:LEU:O	9	0.79	0.42	0.84
(1,389)	1:35:A:ALA:H	1:31:A:PRO:CA	9	0.73	0.54	0.49
(3,72)	1:54:A:ASP:N	1:50:A:LEU:O	9	0.66	0.35	0.72
(1,398)	1:35:A:ALA:H	1:31:A:PRO:C	9	0.65	0.61	0.29
(3,26)	1:18:A:GLN:N	1:15:A:ASP:OD1	9	0.64	0.42	0.53
(1,4)	1:-17:A:SER:H	1:-16:A:SER:CB	9	0.61	0.39	0.57
(1,399)	1:36:A:VAL:H	1:32:A:GLY:CA	9	0.59	0.48	0.35
(1,408)	1:36:A:VAL:H	1:32:A:GLY:C	9	0.58	0.5	0.35
(3,77)	1:58:A:ASP:H	1:54:A:ASP:OD1	9	0.56	0.33	0.49
(1,317)	1:26:A:GLU:H	1:24:A:ILE:CG2	9	0.55	0.16	0.53
(1,695)	1:65:A:GLU:H	1:61:A:ILE:CG2	9	0.55	0.46	0.42
(1,357)	1:30:A:SER:H	1:29:A:LEU:CB	9	0.51	0.16	0.5
(3,1)	1:6:A:GLU:H	1:3:A:THR:O	9	0.5	0.19	0.46
(1,608)	1:56:A:ASP:H	1:55:A:SER:CB	9	0.48	0.15	0.45
(3,39)	1:28:A:PHE:H	1:24:A:ILE:O	9	0.45	0.17	0.46
(1,483)	1:43:A:THR:H	1:38:A:SER:CA	9	0.44	0.23	0.41
(1,424)	1:37:A:ILE:H	1:37:A:ILE:CD1	9	0.44	0.22	0.54
(3,40)	1:28:A:PHE:N	1:24:A:ILE:O	9	0.41	0.16	0.4
(1,484)	1:43:A:THR:H	1:38:A:SER:CB	9	0.4	0.19	0.32
(1,449)	1:40:A:GLU:H	1:36:A:VAL:CG1	9	0.38	0.29	0.26
(1,496)	1:43:A:THR:H	1:38:A:SER:C	9	0.37	0.15	0.39
(3,64)	1:50:A:LEU:N	1:46:A:PRO:O	9	0.37	0.24	0.31
(3,85)	1:61:A:ILE:H	1:22:A:ILE:O	9	0.33	0.12	0.38
(1,412)	1:37:A:ILE:H	1:33:A:LEU:CA	9	0.33	0.23	0.26

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)	Median (Å)
(1,487)	1:43:A:THR:H	1:41:A:THR:CB	9	0.32	0.13	0.33
(1,700)	1:65:A:GLU:H	1:63:A:PHE:CB	9	0.31	0.12	0.35
(1,379)	1:34:A:SER:H	1:32:A:GLY:CA	9	0.3	0.19	0.2
(1,180)	1:13:A:THR:H	1:9:A:SER:CA	9	0.29	0.17	0.21
(1,662)	1:61:A:ILE:H	1:22:A:ILE:C	9	0.29	0.13	0.27
(1,506)	1:45:A:SER:H	1:43:A:THR:CB	9	0.29	0.13	0.26
(1,488)	1:43:A:THR:H	1:41:A:THR:CG2	9	0.29	0.13	0.26
(1,502)	1:44:A:ASN:H	1:45:A:SER:CB	9	0.28	0.13	0.22
(1,605)	1:56:A:ASP:H	1:54:A:ASP:CA	9	0.28	0.12	0.27
(1,781)	1:72:A:LYS:H	1:71:A:LYS:CG	9	0.27	0.13	0.25
(1,433)	1:38:A:SER:H	1:37:A:ILE:CG1	9	0.23	0.07	0.23
(3,67)	1:52:A:GLN:H	1:48:A:GLU:O	9	0.22	0.1	0.21
(3,9)	1:10:A:LEU:H	1:6:A:GLU:O	9	0.21	0.08	0.2
(1,678)	1:63:A:PHE:H	1:62:A:THR:CG2	9	0.21	0.1	0.19
(1,415)	1:37:A:ILE:H	1:35:A:ALA:CB	9	0.2	0.05	0.2
(1,514)	1:45:A:SER:H	1:48:A:GLU:CB	9	0.2	0.07	0.15
(3,31)	1:20:A:GLY:H	1:15:A:ASP:OD2	9	0.2	0.07	0.18
(1,774)	1:71:A:LYS:H	1:71:A:LYS:CE	8	0.92	0.27	1.0
(3,30)	1:19:A:ASP:N	1:17:A:ASP:OD1	8	0.89	0.8	0.49
(1,111)	1:6:A:GLU:H	1:2:A:ALA:CB	8	0.86	0.92	0.32
(1,620)	1:57:A:GLN:H	1:54:A:ASP:C	8	0.72	0.37	0.84
(1,390)	1:35:A:ALA:H	1:32:A:GLY:CA	8	0.63	0.6	0.38
(3,25)	1:18:A:GLN:H	1:15:A:ASP:OD1	8	0.58	0.35	0.55
(1,27)	1:-11:A:HIS:H	1:-12:A:HIS:CB	8	0.52	0.19	0.52
(1,391)	1:35:A:ALA:H	1:33:A:LEU:CA	8	0.45	0.2	0.46
(1,348)	1:29:A:LEU:H	1:28:A:PHE:CB	8	0.4	0.15	0.41
(1,299)	1:24:A:ILE:H	1:24:A:ILE:CD1	8	0.4	0.21	0.38
(1,649)	1:60:A:SER:H	1:58:A:ASP:CG	8	0.39	0.21	0.4
(1,100)	1:4:A:GLU:H	1:5:A:GLN:CB	8	0.38	0.22	0.34
(1,268)	1:21:A:LYS:H	1:62:A:THR:CA	8	0.38	0.37	0.28
(3,63)	1:50:A:LEU:H	1:46:A:PRO:O	8	0.38	0.24	0.33
(1,615)	1:57:A:GLN:H	1:54:A:ASP:CB	8	0.37	0.2	0.34
(1,793)	1:73:A:ALA:H	1:72:A:LYS:CG	8	0.37	0.19	0.37
(3,86)	1:61:A:ILE:N	1:22:A:ILE:O	8	0.34	0.1	0.36
(1,116)	1:6:A:GLU:H	1:5:A:GLN:CG	8	0.33	0.15	0.36
(1,229)	1:17:A:ASP:H	1:26:A:GLU:CG	8	0.31	0.19	0.24
(1,644)	1:60:A:SER:H	1:58:A:ASP:CB	8	0.31	0.16	0.32
(1,396)	1:35:A:ALA:H	1:36:A:VAL:CG2	8	0.3	0.17	0.26
(3,59)	1:43:A:THR:H	1:38:A:SER:O	8	0.3	0.1	0.29
(1,456)	1:40:A:GLU:H	1:41:A:THR:CG2	8	0.29	0.13	0.24
(1,393)	1:35:A:ALA:H	1:34:A:SER:CB	8	0.29	0.15	0.26
(1,554)	1:50:A:LEU:H	1:46:A:PRO:C	8	0.28	0.18	0.2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)	Median (Å)
(3,60)	1:43:A:THR:N	1:38:A:SER:O	8	0.28	0.09	0.28
(3,87)	1:62:A:THR:H	1:65:A:GLU:OE1	8	0.28	0.12	0.3
(1,724)	1:67:A:LYS:H	1:66:A:LEU:CG	8	0.28	0.14	0.24
(1,749)	1:69:A:ALA:H	1:68:A:LYS:CG	8	0.28	0.12	0.28
(1,486)	1:43:A:THR:H	1:41:A:THR:CA	8	0.27	0.12	0.27
(1,507)	1:45:A:SER:H	1:43:A:THR:CG2	8	0.26	0.1	0.25
(1,753)	1:70:A:VAL:H	1:66:A:LEU:CA	8	0.26	0.15	0.2
(1,316)	1:26:A:GLU:H	1:24:A:ILE:CA	8	0.26	0.17	0.22
(1,435)	1:38:A:SER:H	1:37:A:ILE:CD1	8	0.25	0.11	0.28
(1,756)	1:70:A:VAL:H	1:68:A:LYS:CB	8	0.24	0.11	0.24
(1,513)	1:45:A:SER:H	1:48:A:GLU:CA	8	0.24	0.08	0.24
(1,577)	1:52:A:GLN:H	1:51:A:VAL:CG2	8	0.24	0.11	0.22
(1,736)	1:68:A:LYS:H	1:67:A:LYS:CB	8	0.23	0.1	0.2
(1,23)	1:-12:A:HIS:H	1:-13:A:HIS:CB	8	0.22	0.08	0.2
(1,546)	1:50:A:LEU:H	1:47:A:GLN:CA	8	0.22	0.08	0.24
(1,440)	1:39:A:SER:H	1:35:A:ALA:CA	8	0.22	0.07	0.2
(1,725)	1:67:A:LYS:H	1:66:A:LEU:CD1	8	0.22	0.07	0.21
(3,16)	1:13:A:THR:N	1:9:A:SER:O	8	0.21	0.06	0.21
(1,252)	1:19:A:ASP:N	1:19:A:ASP:OD1	8	0.2	0.05	0.18
(1,521)	1:47:A:GLN:H	1:46:A:PRO:CG	8	0.2	0.06	0.2
(3,10)	1:10:A:LEU:N	1:6:A:GLU:O	8	0.19	0.07	0.19
(1,275)	1:22:A:ILE:H	1:22:A:ILE:CG1	8	0.19	0.05	0.2
(1,425)	1:37:A:ILE:H	1:38:A:SER:CA	8	0.17	0.06	0.15
(1,656)	1:61:A:ILE:H	1:60:A:SER:CB	8	0.16	0.09	0.14
(2,1)	1:-8:A:SER:H	1:-18:A:GLY:CA	7	2.9	1.3	2.62
(1,84)	1:2:A:ALA:H	1:40:A:GLU:CB	7	1.47	1.11	1.53
(1,182)	1:13:A:THR:H	1:10:A:LEU:CD2	7	0.8	0.41	1.0
(1,675)	1:63:A:PHE:H	1:21:A:LYS:CG	7	0.69	0.28	0.54
(1,598)	1:54:A:ASP:H	1:50:A:LEU:C	7	0.53	0.3	0.48
(3,57)	1:41:A:THR:H	1:37:A:ILE:O	7	0.53	0.36	0.37
(1,250)	1:19:A:ASP:H	1:17:A:ASP:CG	7	0.49	0.26	0.42
(3,91)	1:65:A:GLU:H	1:62:A:THR:OG1	7	0.47	0.27	0.38
(1,564)	1:51:A:VAL:H	1:50:A:LEU:CD2	7	0.46	0.34	0.27
(3,100)	1:69:A:ALA:N	1:65:A:GLU:O	7	0.45	0.3	0.37
(1,383)	1:34:A:SER:H	1:33:A:LEU:CD1	7	0.44	0.17	0.41
(1,458)	1:41:A:THR:H	1:37:A:ILE:CA	7	0.44	0.39	0.25
(1,698)	1:65:A:GLU:H	1:62:A:THR:CG2	7	0.43	0.21	0.42
(1,337)	1:28:A:PHE:H	1:24:A:ILE:CA	7	0.41	0.17	0.35
(1,752)	1:69:A:ALA:H	1:65:A:GLU:C	7	0.39	0.26	0.34
(3,27)	1:19:A:ASP:H	1:15:A:ASP:OD1	7	0.39	0.22	0.3
(1,553)	1:50:A:LEU:H	1:51:A:VAL:CG2	7	0.37	0.16	0.36
(1,344)	1:28:A:PHE:H	1:24:A:ILE:C	7	0.36	0.13	0.32

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)	Median (Å)
(1,242)	1:19:A:ASP:H	1:17:A:ASP:CB	7	0.36	0.2	0.3
(1,409)	1:37:A:ILE:H	1:10:A:LEU:CD1	7	0.34	0.23	0.24
(1,771)	1:71:A:LYS:H	1:70:A:VAL:CG2	7	0.33	0.35	0.19
(1,192)	1:13:A:THR:H	1:9:A:SER:C	7	0.31	0.18	0.26
(1,248)	1:19:A:ASP:H	1:20:A:GLY:CA	7	0.3	0.08	0.3
(1,381)	1:34:A:SER:H	1:33:A:LEU:CB	7	0.29	0.17	0.22
(1,267)	1:21:A:LYS:H	1:21:A:LYS:CE	7	0.27	0.15	0.28
(1,327)	1:27:A:LEU:H	1:24:A:ILE:CA	7	0.26	0.1	0.23
(3,53)	1:39:A:SER:H	1:35:A:ALA:O	7	0.25	0.15	0.18
(1,370)	1:33:A:LEU:H	1:30:A:SER:CA	7	0.25	0.1	0.24
(3,88)	1:62:A:THR:N	1:65:A:GLU:OE1	7	0.25	0.1	0.28
(1,697)	1:65:A:GLU:H	1:62:A:THR:CB	7	0.24	0.09	0.24
(3,68)	1:52:A:GLN:N	1:48:A:GLU:O	7	0.22	0.07	0.2
(3,93)	1:66:A:LEU:H	1:62:A:THR:O	7	0.21	0.09	0.17
(1,322)	1:26:A:GLU:H	1:26:A:GLU:CG	7	0.21	0.05	0.2
(1,447)	1:39:A:SER:H	1:35:A:ALA:C	7	0.21	0.09	0.21
(1,134)	1:8:A:GLN:H	1:5:A:GLN:CA	7	0.2	0.09	0.15
(3,94)	1:66:A:LEU:N	1:62:A:THR:O	7	0.2	0.1	0.16
(1,328)	1:27:A:LEU:H	1:25:A:ASN:CA	7	0.2	0.07	0.19
(1,576)	1:52:A:GLN:H	1:51:A:VAL:CG1	7	0.2	0.11	0.15
(1,171)	1:11:A:PHE:H	1:7:A:LEU:C	7	0.19	0.07	0.17
(1,162)	1:10:A:LEU:H	1:6:A:GLU:C	7	0.16	0.05	0.16
(1,48)	1:-6:A:LEU:H	1:-6:A:LEU:CB	7	0.16	0.04	0.15
(1,307)	1:25:A:ASN:H	1:24:A:ILE:CB	7	0.14	0.05	0.13
(1,85)	1:2:A:ALA:H	1:40:A:GLU:CG	6	1.19	0.83	1.31
(1,422)	1:37:A:ILE:H	1:37:A:ILE:CG1	6	0.89	0.3	1.0
(3,46)	1:35:A:ALA:N	1:31:A:PRO:O	6	0.86	0.63	0.58
(1,584)	1:53:A:TYR:H	1:50:A:LEU:CD1	6	0.82	0.57	0.76
(1,495)	1:43:A:THR:H	1:49:A:LEU:CD2	6	0.61	0.44	0.6
(1,621)	1:58:A:ASP:H	1:54:A:ASP:CB	6	0.59	0.32	0.55
(1,629)	1:58:A:ASP:H	1:54:A:ASP:CG	6	0.56	0.32	0.55
(3,92)	1:65:A:GLU:N	1:62:A:THR:OG1	6	0.52	0.25	0.44
(1,794)	1:73:A:ALA:H	1:72:A:LYS:CD	6	0.52	0.29	0.38
(3,28)	1:19:A:ASP:N	1:15:A:ASP:OD1	6	0.5	0.27	0.44
(3,58)	1:41:A:THR:N	1:37:A:ILE:O	6	0.49	0.36	0.3
(3,99)	1:69:A:ALA:H	1:65:A:GLU:O	6	0.48	0.32	0.44
(3,73)	1:56:A:ASP:H	1:65:A:GLU:OE2	6	0.47	0.28	0.39
(1,592)	1:54:A:ASP:H	1:50:A:LEU:CA	6	0.46	0.31	0.4
(1,371)	1:33:A:LEU:H	1:30:A:SER:CB	6	0.45	0.24	0.38
(1,476)	1:41:A:THR:H	1:37:A:ILE:C	6	0.44	0.33	0.27
(1,503)	1:44:A:ASN:H	1:48:A:GLU:CB	6	0.43	0.32	0.26
(1,666)	1:62:A:THR:H	1:61:A:ILE:CG2	6	0.43	0.31	0.28

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)	Median (Å)
(1,427)	1:37:A:ILE:H	1:33:A:LEU:C	6	0.39	0.25	0.34
(1,186)	1:13:A:THR:H	1:12:A:ASN:CB	6	0.38	0.14	0.39
(1,297)	1:24:A:ILE:H	1:24:A:ILE:CG1	6	0.37	0.19	0.36
(1,95)	1:4:A:GLU:H	1:3:A:THR:CB	6	0.33	0.21	0.29
(1,377)	1:34:A:SER:H	1:30:A:SER:CB	6	0.33	0.12	0.36
(3,15)	1:13:A:THR:H	1:9:A:SER:O	6	0.32	0.28	0.22
(1,53)	1:-5:A:VAL:H	1:-6:A:LEU:CD2	6	0.32	0.21	0.26
(3,101)	1:70:A:VAL:H	1:66:A:LEU:O	6	0.32	0.13	0.26
(1,305)	1:25:A:ASN:H	1:23:A:SER:CB	6	0.31	0.12	0.36
(1,222)	1:17:A:ASP:H	1:16:A:ARG:CG	6	0.31	0.12	0.3
(1,723)	1:67:A:LYS:H	1:66:A:LEU:CB	6	0.31	0.13	0.31
(1,527)	1:48:A:GLU:H	1:43:A:THR:CB	6	0.31	0.26	0.2
(1,66)	1:-2:A:GLY:H	1:-3:A:ARG:CB	6	0.3	0.13	0.26
(1,764)	1:70:A:VAL:H	1:66:A:LEU:C	6	0.3	0.14	0.26
(1,536)	1:49:A:LEU:H	1:43:A:THR:CB	6	0.3	0.07	0.29
(3,102)	1:70:A:VAL:N	1:66:A:LEU:O	6	0.3	0.11	0.26
(1,382)	1:34:A:SER:H	1:33:A:LEU:CG	6	0.29	0.13	0.24
(1,400)	1:36:A:VAL:H	1:33:A:LEU:CA	6	0.29	0.09	0.3
(1,272)	1:22:A:ILE:H	1:21:A:LYS:CD	6	0.28	0.09	0.26
(1,44)	1:-7:A:GLY:H	1:-8:A:SER:CB	6	0.27	0.17	0.23
(1,312)	1:25:A:ASN:H	1:26:A:GLU:CG	6	0.26	0.1	0.3
(1,748)	1:69:A:ALA:H	1:68:A:LYS:CB	6	0.26	0.12	0.21
(1,32)	1:-10:A:HIS:H	1:-11:A:HIS:CB	6	0.26	0.14	0.19
(1,249)	1:19:A:ASP:H	1:15:A:ASP:CG	6	0.26	0.09	0.26
(1,277)	1:22:A:ILE:H	1:22:A:ILE:CD1	6	0.26	0.11	0.27
(1,336)	1:27:A:LEU:H	1:23:A:SER:C	6	0.26	0.12	0.25
(1,212)	1:16:A:ARG:H	1:15:A:ASP:CB	6	0.25	0.05	0.26
(1,466)	1:41:A:THR:H	1:40:A:GLU:CG	6	0.25	0.06	0.27
(1,520)	1:47:A:GLN:H	1:46:A:PRO:CB	6	0.23	0.09	0.22
(3,81)	1:59:A:GLY:H	1:54:A:ASP:OD2	6	0.23	0.08	0.23
(1,531)	1:48:A:GLU:H	1:47:A:GLN:CG	6	0.23	0.07	0.26
(1,143)	1:8:A:GLN:H	1:9:A:SER:CB	6	0.22	0.13	0.19
(3,54)	1:39:A:SER:N	1:35:A:ALA:O	6	0.21	0.08	0.18
(1,414)	1:37:A:ILE:H	1:35:A:ALA:CA	6	0.2	0.06	0.18
(1,782)	1:72:A:LYS:H	1:71:A:LYS:CD	6	0.2	0.09	0.17
(1,231)	1:18:A:GLN:H	1:15:A:ASP:CB	6	0.2	0.08	0.16
(1,139)	1:8:A:GLN:H	1:7:A:LEU:CD2	6	0.19	0.08	0.15
(1,166)	1:11:A:PHE:H	1:10:A:LEU:CG	6	0.18	0.08	0.15
(1,149)	1:9:A:SER:H	1:8:A:GLN:CG	6	0.18	0.06	0.18
(1,137)	1:8:A:GLN:H	1:7:A:LEU:CG	6	0.17	0.06	0.16
(3,11)	1:11:A:PHE:H	1:7:A:LEU:O	6	0.17	0.04	0.18
(1,548)	1:50:A:LEU:H	1:49:A:LEU:CB	6	0.17	0.06	0.14

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)	Median (Å)
(1,11)	1:-15:A:HIS:H	1:-16:A:SER:CB	6	0.16	0.04	0.16
(1,716)	1:66:A:LEU:H	1:66:A:LEU:CD1	6	0.16	0.06	0.14
(1,93)	1:3:A:THR:H	1:6:A:GLU:CG	5	0.91	0.22	0.97
(1,473)	1:41:A:THR:H	1:49:A:LEU:CD2	5	0.9	0.43	0.92
(1,423)	1:37:A:ILE:H	1:37:A:ILE:CG2	5	0.85	0.06	0.83
(1,642)	1:60:A:SER:H	1:50:A:LEU:CD2	5	0.66	0.34	0.64
(3,74)	1:56:A:ASP:N	1:65:A:GLU:OE2	5	0.54	0.3	0.43
(1,726)	1:67:A:LYS:H	1:66:A:LEU:CD2	5	0.51	0.09	0.52
(3,41)	1:29:A:LEU:H	1:25:A:ASN:O	5	0.46	0.11	0.43
(3,62)	1:48:A:GLU:N	1:45:A:SER:OG	5	0.45	0.3	0.38
(1,101)	1:5:A:GLN:H	1:3:A:THR:CA	5	0.43	0.16	0.41
(3,61)	1:48:A:GLU:H	1:45:A:SER:OG	5	0.43	0.3	0.32
(1,7)	1:-16:A:SER:H	1:-17:A:SER:CB	5	0.42	0.23	0.54
(1,52)	1:-5:A:VAL:H	1:-6:A:LEU:CG	5	0.42	0.27	0.3
(1,505)	1:45:A:SER:H	1:43:A:THR:CA	5	0.39	0.16	0.33
(3,51)	1:38:A:SER:H	1:34:A:SER:O	5	0.39	0.2	0.28
(1,614)	1:56:A:ASP:H	1:65:A:GLU:CD	5	0.38	0.15	0.39
(1,587)	1:53:A:TYR:H	1:52:A:GLN:CG	5	0.37	0.12	0.45
(1,729)	1:67:A:LYS:H	1:67:A:LYS:CG	5	0.35	0.12	0.39
(1,545)	1:50:A:LEU:H	1:46:A:PRO:CA	5	0.35	0.25	0.31
(1,112)	1:6:A:GLU:H	1:3:A:THR:CB	5	0.33	0.09	0.28
(1,174)	1:12:A:ASN:H	1:9:A:SER:CA	5	0.33	0.11	0.37
(1,413)	1:37:A:ILE:H	1:34:A:SER:CA	5	0.32	0.14	0.32
(1,509)	1:45:A:SER:H	1:44:A:ASN:CB	5	0.31	0.18	0.22
(1,160)	1:10:A:LEU:H	1:10:A:LEU:CD2	5	0.3	0.06	0.26
(3,52)	1:38:A:SER:N	1:34:A:SER:O	5	0.3	0.16	0.19
(1,271)	1:22:A:ILE:H	1:21:A:LYS:CG	5	0.3	0.1	0.34
(1,518)	1:47:A:GLN:H	1:45:A:SER:CB	5	0.29	0.04	0.27
(1,183)	1:13:A:THR:H	1:11:A:PHE:CA	5	0.29	0.15	0.29
(1,355)	1:30:A:SER:H	1:28:A:PHE:CB	5	0.29	0.13	0.23
(1,815)	1:76:A:LEU:H	1:76:A:LEU:CB	5	0.28	0.1	0.28
(1,602)	1:55:A:SER:H	1:55:A:SER:CB	5	0.28	0.13	0.23
(1,628)	1:58:A:ASP:H	1:59:A:GLY:CA	5	0.28	0.13	0.25
(1,120)	1:6:A:GLU:H	1:7:A:LEU:CB	5	0.28	0.25	0.18
(3,97)	1:68:A:LYS:H	1:64:A:GLU:O	5	0.27	0.16	0.2
(1,63)	1:-3:A:ARG:H	1:-3:A:ARG:CG	5	0.27	0.17	0.18
(3,37)	1:27:A:LEU:H	1:23:A:SER:O	5	0.27	0.1	0.27
(1,612)	1:56:A:ASP:H	1:57:A:GLN:CB	5	0.26	0.11	0.24
(1,9)	1:-16:A:SER:H	1:-16:A:SER:CB	5	0.26	0.1	0.29
(1,351)	1:29:A:LEU:H	1:25:A:ASN:C	5	0.26	0.11	0.24
(1,517)	1:47:A:GLN:H	1:45:A:SER:CA	5	0.26	0.11	0.24
(1,528)	1:48:A:GLU:H	1:45:A:SER:CB	5	0.26	0.11	0.21

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)	Median (Å)
(1,733)	1:68:A:LYS:H	1:64:A:GLU:CA	5	0.26	0.18	0.19
(1,115)	1:6:A:GLU:H	1:5:A:GLN:CB	5	0.25	0.1	0.31
(1,562)	1:51:A:VAL:H	1:50:A:LEU:CG	5	0.25	0.07	0.27
(3,65)	1:51:A:VAL:H	1:47:A:GLN:O	5	0.25	0.08	0.26
(1,617)	1:57:A:GLN:H	1:56:A:ASP:CB	5	0.25	0.12	0.2
(1,611)	1:56:A:ASP:H	1:57:A:GLN:CA	5	0.25	0.1	0.25
(1,201)	1:14:A:LEU:H	1:15:A:ASP:CB	5	0.24	0.09	0.22
(1,241)	1:19:A:ASP:H	1:17:A:ASP:CA	5	0.24	0.17	0.17
(1,477)	1:42:A:ASN:H	1:39:A:SER:CA	5	0.24	0.06	0.23
(1,721)	1:67:A:LYS:H	1:64:A:GLU:CA	5	0.23	0.1	0.17
(1,345)	1:29:A:LEU:H	1:25:A:ASN:CA	5	0.23	0.08	0.23
(1,266)	1:21:A:LYS:H	1:21:A:LYS:CD	5	0.23	0.1	0.24
(1,763)	1:70:A:VAL:H	1:71:A:LYS:CB	5	0.23	0.1	0.23
(1,308)	1:25:A:ASN:H	1:24:A:ILE:CG1	5	0.22	0.11	0.17
(1,699)	1:65:A:GLU:H	1:63:A:PHE:CA	5	0.22	0.07	0.19
(1,671)	1:62:A:THR:H	1:65:A:GLU:CG	5	0.22	0.1	0.19
(1,145)	1:9:A:SER:H	1:5:A:GLN:CA	5	0.22	0.07	0.24
(1,291)	1:23:A:SER:H	1:26:A:GLU:CB	5	0.21	0.13	0.13
(1,218)	1:17:A:ASP:H	1:15:A:ASP:CA	5	0.21	0.12	0.13
(1,323)	1:26:A:GLU:H	1:27:A:LEU:CB	5	0.21	0.09	0.18
(1,719)	1:66:A:LEU:H	1:62:A:THR:C	5	0.21	0.09	0.24
(1,60)	1:3:A:ARG:H	1:4:A:PRO:CB	5	0.21	0.06	0.24
(1,462)	1:41:A:THR:H	1:39:A:SER:CA	5	0.21	0.03	0.2
(1,465)	1:41:A:THR:H	1:40:A:GLU:CB	5	0.21	0.06	0.23
(1,225)	1:17:A:ASP:H	1:17:A:ASP:CB	5	0.21	0.05	0.18
(3,66)	1:51:A:VAL:N	1:47:A:GLN:O	5	0.2	0.05	0.19
(1,378)	1:34:A:SER:H	1:31:A:PRO:CA	5	0.2	0.11	0.14
(1,335)	1:27:A:LEU:H	1:28:A:PHE:CB	5	0.2	0.07	0.19
(1,652)	1:61:A:ILE:H	1:22:A:ILE:CG1	5	0.2	0.05	0.19
(1,643)	1:60:A:SER:H	1:58:A:ASP:CA	5	0.19	0.1	0.15
(1,766)	1:71:A:LYS:H	1:68:A:LYS:CA	5	0.19	0.06	0.21
(1,270)	1:22:A:ILE:H	1:21:A:LYS:CB	5	0.19	0.08	0.14
(3,8)	1:9:A:SER:N	1:5:A:GLN:O	5	0.19	0.02	0.19
(1,720)	1:67:A:LYS:H	1:63:A:PHE:CA	5	0.18	0.03	0.19
(3,7)	1:9:A:SER:H	1:5:A:GLN:O	5	0.18	0.03	0.18
(1,706)	1:65:A:GLU:H	1:65:A:GLU:CG	5	0.18	0.05	0.16
(3,44)	1:34:A:SER:N	1:30:A:SER:O	5	0.18	0.06	0.14
(1,470)	1:41:A:THR:H	1:42:A:ASN:CA	5	0.18	0.05	0.17
(1,575)	1:52:A:GLN:H	1:51:A:VAL:CB	5	0.18	0.06	0.17
(1,159)	1:10:A:LEU:H	1:10:A:LEU:CG	5	0.18	0.04	0.18
(1,512)	1:45:A:SER:H	1:46:A:PRO:CD	5	0.18	0.04	0.17
(1,661)	1:61:A:ILE:H	1:61:A:ILE:CD1	5	0.17	0.04	0.17

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)	Median (Å)
(1,665)	1:62:A:THR:H	1:61:A:ILE:CG1	5	0.17	0.05	0.16
(1,530)	1:48:A:GLU:H	1:47:A:GLN:CB	5	0.17	0.04	0.16
(1,717)	1:66:A:LEU:H	1:66:A:LEU:CD2	5	0.17	0.03	0.17
(3,12)	1:11:A:PHE:N	1:7:A:LEU:O	5	0.16	0.03	0.17
(1,319)	1:26:A:GLU:H	1:25:A:ASN:CB	5	0.16	0.06	0.14
(1,438)	1:38:A:SER:H	1:39:A:SER:CB	5	0.16	0.04	0.17
(1,88)	1:3:A:THR:H	1:2:A:ALA:CB	5	0.16	0.04	0.15
(1,406)	1:36:A:VAL:H	1:36:A:VAL:CG2	5	0.16	0.03	0.16
(1,677)	1:63:A:PHE:H	1:62:A:THR:CB	5	0.16	0.04	0.17
(1,42)	1:-8:A:SER:H	1:-8:A:SER:CB	5	0.15	0.03	0.15
(1,176)	1:12:A:ASN:H	1:11:A:PHE:CB	5	0.14	0.02	0.15
(1,737)	1:68:A:LYS:H	1:67:A:LYS:CG	5	0.14	0.03	0.13
(1,376)	1:34:A:SER:H	1:27:A:LEU:CD2	4	1.36	0.21	1.4
(1,131)	1:7:A:LEU:H	1:10:A:LEU:CD1	4	1.3	0.38	1.19
(3,21)	1:17:A:ASP:H	1:26:A:GLU:OE2	4	0.95	0.74	0.8
(3,22)	1:17:A:ASP:N	1:26:A:GLU:OE2	4	0.94	0.74	0.81
(1,534)	1:48:A:GLU:H	1:48:A:GLU:CG	4	0.77	0.44	0.82
(1,455)	1:40:A:GLU:H	1:40:A:GLU:CG	4	0.75	0.14	0.78
(1,362)	1:30:A:SER:H	1:31:A:PRO:CG	4	0.61	0.32	0.63
(1,92)	1:3:A:THR:H	1:6:A:GLU:CB	4	0.57	0.23	0.62
(1,334)	1:27:A:LEU:H	1:27:A:LEU:CD1	4	0.56	0.05	0.55
(3,50)	1:37:A:ILE:N	1:33:A:LEU:O	4	0.5	0.2	0.55
(1,324)	1:26:A:GLU:H	1:27:A:LEU:CG	4	0.5	0.21	0.48
(1,64)	1:-3:A:ARG:H	1:-3:A:ARG:CD	4	0.47	0.42	0.28
(1,315)	1:26:A:GLU:H	1:23:A:SER:CB	4	0.47	0.15	0.46
(3,49)	1:37:A:ILE:H	1:33:A:LEU:O	4	0.46	0.21	0.5
(1,138)	1:8:A:GLN:H	1:7:A:LEU:CD1	4	0.45	0.38	0.28
(1,173)	1:12:A:ASN:H	1:8:A:GLN:CG	4	0.44	0.38	0.26
(1,568)	1:51:A:VAL:H	1:51:A:VAL:CG2	4	0.39	0.17	0.4
(1,232)	1:18:A:GLN:H	1:16:A:ARG:CA	4	0.36	0.03	0.36
(1,754)	1:70:A:VAL:H	1:66:A:LEU:CD1	4	0.36	0.2	0.32
(1,102)	1:5:A:GLN:H	1:3:A:THR:CB	4	0.36	0.13	0.4
(1,606)	1:56:A:ASP:H	1:54:A:ASP:CB	4	0.35	0.15	0.35
(1,672)	1:62:A:THR:H	1:65:A:GLU:CD	4	0.35	0.11	0.34
(1,221)	1:17:A:ASP:H	1:16:A:ARG:CB	4	0.34	0.13	0.33
(1,463)	1:41:A:THR:H	1:39:A:SER:CB	4	0.33	0.05	0.32
(1,265)	1:21:A:LYS:H	1:21:A:LYS:CG	4	0.33	0.07	0.33
(1,240)	1:19:A:ASP:H	1:15:A:ASP:CB	4	0.33	0.14	0.34
(1,734)	1:68:A:LYS:H	1:65:A:GLU:CA	4	0.33	0.11	0.36
(1,450)	1:40:A:GLU:H	1:37:A:ILE:CA	4	0.31	0.07	0.34
(1,738)	1:68:A:LYS:H	1:67:A:LYS:CD	4	0.31	0.05	0.32
(1,693)	1:64:A:GLU:H	1:65:A:GLU:CG	4	0.31	0.13	0.28

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)	Median (Å)
(1,304)	1:25:A:ASN:H	1:23:A:SER:CA	4	0.3	0.1	0.34
(1,522)	1:47:A:GLN:H	1:46:A:PRO:CD	4	0.3	0.15	0.29
(1,730)	1:67:A:LYS:H	1:67:A:LYS:CD	4	0.3	0.1	0.28
(3,98)	1:68:A:LYS:N	1:64:A:GLU:O	4	0.3	0.15	0.3
(1,109)	1:5:A:GLN:H	1:5:A:GLN:CG	4	0.3	0.07	0.28
(1,430)	1:38:A:SER:H	1:35:A:ALA:CB	4	0.3	0.12	0.28
(1,429)	1:38:A:SER:H	1:35:A:ALA:CA	4	0.28	0.14	0.25
(1,434)	1:38:A:SER:H	1:37:A:ILE:CG2	4	0.27	0.14	0.28
(1,313)	1:26:A:GLU:H	1:22:A:ILE:CA	4	0.27	0.05	0.28
(1,25)	1:-12:A:HIS:H	1:-12:A:HIS:CB	4	0.26	0.08	0.29
(1,780)	1:72:A:LYS:H	1:71:A:LYS:CB	4	0.24	0.1	0.24
(3,38)	1:27:A:LEU:N	1:23:A:SER:O	4	0.24	0.06	0.26
(1,478)	1:42:A:ASN:H	1:40:A:GLU:CA	4	0.24	0.09	0.24
(1,787)	1:72:A:LYS:H	1:73:A:ALA:CB	4	0.24	0.09	0.23
(1,718)	1:66:A:LEU:H	1:67:A:LYS:CB	4	0.24	0.03	0.25
(1,387)	1:34:A:SER:H	1:35:A:ALA:CB	4	0.24	0.08	0.21
(1,197)	1:14:A:LEU:H	1:13:A:THR:CB	4	0.23	0.07	0.26
(1,443)	1:39:A:SER:H	1:38:A:SER:CB	4	0.23	0.12	0.17
(1,251)	1:19:A:ASP:H	1:19:A:ASP:OD1	4	0.23	0.08	0.23
(1,659)	1:61:A:ILE:H	1:61:A:ILE:CG1	4	0.22	0.05	0.22
(1,346)	1:29:A:LEU:H	1:26:A:GLU:CA	4	0.22	0.06	0.2
(3,14)	1:12:A:ASN:N	1:8:A:GLN:O	4	0.22	0.13	0.16
(1,549)	1:50:A:LEU:H	1:49:A:LEU:CD1	4	0.21	0.02	0.22
(1,696)	1:65:A:GLU:H	1:62:A:THR:CA	4	0.21	0.02	0.21
(1,239)	1:18:A:GLN:H	1:15:A:ASP:CG	4	0.21	0.07	0.24
(1,384)	1:34:A:SER:H	1:33:A:LEU:CD2	4	0.21	0.09	0.18
(1,184)	1:13:A:THR:H	1:11:A:PHE:CB	4	0.2	0.1	0.19
(1,253)	1:19:A:ASP:H	1:19:A:ASP:CG	4	0.2	0.09	0.2
(1,418)	1:37:A:ILE:H	1:36:A:VAL:CG1	4	0.2	0.05	0.22
(1,571)	1:52:A:GLN:H	1:48:A:GLU:CA	4	0.19	0.06	0.21
(1,758)	1:70:A:VAL:H	1:69:A:ALA:CB	4	0.19	0.07	0.2
(3,82)	1:59:A:GLY:N	1:54:A:ASP:OD2	4	0.19	0.04	0.19
(1,493)	1:43:A:THR:H	1:43:A:THR:CG2	4	0.18	0.04	0.18
(1,189)	1:13:A:THR:H	1:13:A:THR:CG2	4	0.18	0.09	0.14
(1,511)	1:45:A:SER:H	1:45:A:SER:CB	4	0.18	0.08	0.18
(1,619)	1:57:A:GLN:H	1:57:A:GLN:CB	4	0.18	0.05	0.18
(1,230)	1:17:A:ASP:H	1:26:A:GLU:CD	4	0.18	0.04	0.17
(1,688)	1:64:A:GLU:H	1:63:A:PHE:CB	4	0.17	0.07	0.15
(1,153)	1:9:A:SER:H	1:5:A:GLN:C	4	0.17	0.04	0.16
(1,428)	1:38:A:SER:H	1:34:A:SER:CA	4	0.17	0.04	0.16
(1,581)	1:52:A:GLN:H	1:48:A:GLU:C	4	0.17	0.07	0.14
(1,570)	1:51:A:VAL:H	1:47:A:GLN:C	4	0.17	0.04	0.18

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)	Median (Å)
(1,133)	1:8:A:GLN:H	1:4:A:GLU:CA	4	0.16	0.05	0.15
(1,770)	1:71:A:LYS:H	1:70:A:VAL:CG1	4	0.16	0.08	0.12
(1,800)	1:74:A:SER:H	1:72:A:LYS:CA	4	0.15	0.03	0.15
(1,714)	1:66:A:LEU:H	1:66:A:LEU:CB	4	0.14	0.04	0.13
(1,593)	1:54:A:ASP:H	1:52:A:GLN:CB	4	0.13	0.0	0.13
(1,625)	1:58:A:ASP:H	1:57:A:GLN:CG	4	0.13	0.02	0.13
(1,550)	1:50:A:LEU:H	1:49:A:LEU:CD2	3	0.7	0.19	0.59
(1,792)	1:73:A:ALA:H	1:72:A:LYS:CB	3	0.47	0.26	0.58
(1,119)	1:6:A:GLU:H	1:6:A:GLU:CG	3	0.42	0.37	0.19
(1,761)	1:70:A:VAL:H	1:70:A:VAL:CG1	3	0.41	0.42	0.13
(1,226)	1:17:A:ASP:H	1:18:A:GLN:CA	3	0.39	0.33	0.21
(1,603)	1:55:A:SER:H	1:65:A:GLU:CB	3	0.38	0.11	0.46
(1,81)	1:2:A:ALA:H	1:1:A:MET:CB	3	0.37	0.05	0.37
(1,227)	1:17:A:ASP:H	1:18:A:GLN:CB	3	0.37	0.27	0.24
(1,641)	1:60:A:SER:H	1:50:A:LEU:CD1	3	0.37	0.16	0.26
(1,744)	1:68:A:LYS:H	1:64:A:GLU:C	3	0.36	0.21	0.34
(1,353)	1:30:A:SER:H	1:27:A:LEU:CA	3	0.36	0.12	0.33
(1,223)	1:17:A:ASP:H	1:16:A:ARG:CD	3	0.34	0.05	0.33
(1,561)	1:51:A:VAL:H	1:50:A:LEU:CB	3	0.34	0.12	0.27
(1,19)	1:-13:A:HIS:H	1:-14:A:HIS:CB	3	0.32	0.04	0.3
(1,441)	1:39:A:SER:H	1:36:A:VAL:CA	3	0.31	0.1	0.29
(3,95)	1:67:A:LYS:H	1:63:A:PHE:O	3	0.3	0.07	0.34
(3,96)	1:67:A:LYS:N	1:63:A:PHE:O	3	0.29	0.14	0.36
(1,121)	1:6:A:GLU:H	1:3:A:THR:C	3	0.29	0.07	0.26
(1,361)	1:30:A:SER:H	1:30:A:SER:CB	3	0.28	0.12	0.35
(1,535)	1:48:A:GLU:H	1:49:A:LEU:CB	3	0.28	0.15	0.21
(1,219)	1:17:A:ASP:H	1:15:A:ASP:CB	3	0.27	0.12	0.25
(1,278)	1:22:A:ILE:H	1:60:A:SER:CA	3	0.26	0.13	0.21
(1,558)	1:51:A:VAL:H	1:48:A:GLU:CG	3	0.25	0.1	0.32
(1,762)	1:70:A:VAL:H	1:70:A:VAL:CG2	3	0.25	0.08	0.27
(1,586)	1:53:A:TYR:H	1:52:A:GLN:CB	3	0.25	0.04	0.27
(3,6)	1:8:A:GLN:N	1:4:A:GLU:O	3	0.25	0.1	0.21
(1,555)	1:51:A:VAL:H	1:47:A:GLN:CA	3	0.25	0.05	0.28
(1,540)	1:49:A:LEU:H	1:48:A:GLU:CG	3	0.24	0.1	0.29
(1,732)	1:67:A:LYS:H	1:63:A:PHE:C	3	0.24	0.09	0.29
(1,563)	1:51:A:VAL:H	1:50:A:LEU:CD1	3	0.24	0.05	0.25
(1,639)	1:59:A:GLY:H	1:54:A:ASP:CG	3	0.23	0.15	0.14
(1,439)	1:38:A:SER:H	1:34:A:SER:C	3	0.23	0.09	0.29
(1,452)	1:40:A:GLU:H	1:39:A:SER:CB	3	0.23	0.08	0.22
(1,255)	1:20:A:GLY:H	1:18:A:GLN:CA	3	0.22	0.06	0.19
(1,146)	1:9:A:SER:H	1:6:A:GLU:CA	3	0.22	0.07	0.18
(1,188)	1:13:A:THR:H	1:13:A:THR:CB	3	0.22	0.1	0.2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)	Median (Å)
(1,314)	1:26:A:GLU:H	1:22:A:ILE:CG2	3	0.21	0.06	0.25
(3,43)	1:34:A:SER:H	1:30:A:SER:O	3	0.21	0.07	0.21
(1,148)	1:9:A:SER:H	1:8:A:GLN:CB	3	0.21	0.07	0.19
(1,144)	1:8:A:GLN:H	1:4:A:GLU:C	3	0.21	0.08	0.19
(1,136)	1:8:A:GLN:H	1:7:A:LEU:CB	3	0.2	0.07	0.21
(1,340)	1:28:A:PHE:H	1:27:A:LEU:CB	3	0.2	0.02	0.21
(1,73)	1:0:A:HIS:H	1:-1:A:SER:CB	3	0.2	0.09	0.15
(1,743)	1:68:A:LYS:H	1:69:A:ALA:CB	3	0.2	0.07	0.19
(1,292)	1:23:A:SER:H	1:26:A:GLU:CG	3	0.19	0.08	0.15
(1,261)	1:21:A:LYS:H	1:19:A:ASP:CB	3	0.19	0.05	0.22
(1,580)	1:52:A:GLN:H	1:53:A:TYR:CB	3	0.19	0.04	0.21
(1,152)	1:9:A:SER:H	1:10:A:LEU:CB	3	0.19	0.04	0.16
(1,471)	1:41:A:THR:H	1:42:A:ASN:CB	3	0.19	0.05	0.15
(1,96)	1:4:A:GLU:H	1:3:A:THR:CG2	3	0.19	0.07	0.15
(1,498)	1:44:A:ASN:H	1:43:A:THR:CB	3	0.19	0.03	0.2
(1,684)	1:64:A:GLU:H	1:62:A:THR:CA	3	0.19	0.05	0.21
(1,167)	1:11:A:PHE:H	1:10:A:LEU:CD1	3	0.18	0.04	0.16
(1,685)	1:64:A:GLU:H	1:62:A:THR:CB	3	0.18	0.03	0.2
(1,731)	1:67:A:LYS:H	1:68:A:LYS:CB	3	0.18	0.03	0.18
(1,745)	1:69:A:ALA:H	1:66:A:LEU:CA	3	0.18	0.02	0.17
(1,797)	1:73:A:ALA:H	1:74:A:SER:CA	3	0.18	0.05	0.2
(1,154)	1:10:A:LEU:H	1:7:A:LEU:CA	3	0.17	0.02	0.17
(1,38)	1:-9:A:SER:H	1:-9:A:SER:CB	3	0.17	0.02	0.18
(1,172)	1:12:A:ASN:H	1:8:A:GLN:CA	3	0.17	0.01	0.17
(1,195)	1:14:A:LEU:H	1:12:A:ASN:CB	3	0.17	0.09	0.11
(1,446)	1:39:A:SER:H	1:40:A:GLU:CB	3	0.17	0.02	0.16
(1,583)	1:53:A:TYR:H	1:50:A:LEU:CA	3	0.16	0.07	0.12
(1,105)	1:5:A:GLN:H	1:4:A:GLU:CB	3	0.16	0.04	0.17
(1,480)	1:42:A:ASN:H	1:41:A:THR:CG2	3	0.16	0.03	0.15
(3,32)	1:20:A:GLY:N	1:15:A:ASP:OD2	3	0.16	0.05	0.13
(1,715)	1:66:A:LEU:H	1:66:A:LEU:CG	3	0.15	0.02	0.16
(1,610)	1:56:A:ASP:H	1:56:A:ASP:CB	3	0.15	0.02	0.14
(1,264)	1:21:A:LYS:H	1:21:A:LYS:CB	3	0.14	0.04	0.12
(1,419)	1:37:A:ILE:H	1:36:A:VAL:CG2	3	0.14	0.02	0.15
(1,127)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:CB	3	0.13	0.02	0.13
(1,122)	1:7:A:LEU:H	1:4:A:GLU:CA	3	0.12	0.0	0.12
(1,747)	1:69:A:ALA:H	1:68:A:LYS:CA	3	0.11	0.0	0.11
(1,99)	1:4:A:GLU:H	1:4:A:GLU:CG	2	1.05	0.05	1.05
(1,785)	1:72:A:LYS:H	1:72:A:LYS:CG	2	0.94	0.05	0.94
(1,708)	1:66:A:LEU:H	1:61:A:ILE:CG2	2	0.88	0.06	0.88
(1,786)	1:72:A:LYS:H	1:72:A:LYS:CD	2	0.86	0.12	0.86
(1,56)	1:-5:A:VAL:H	1:-5:A:VAL:CG1	2	0.58	0.46	0.58

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)	Median (Å)
(1,660)	1:61:A:ILE:H	1:61:A:ILE:CG2	2	0.54	0.02	0.54
(1,363)	1:30:A:SER:H	1:31:A:PRO:CD	2	0.53	0.0	0.53
(1,207)	1:15:A:ASP:H	1:14:A:LEU:CD2	2	0.49	0.38	0.49
(1,190)	1:13:A:THR:H	1:14:A:LEU:CA	2	0.46	0.3	0.46
(1,516)	1:45:A:SER:H	1:49:A:LEU:CB	2	0.41	0.16	0.41
(3,34)	1:22:A:ILE:N	1:61:A:ILE:O	2	0.4	0.22	0.4
(1,309)	1:25:A:ASN:H	1:24:A:ILE:CD1	2	0.38	0.14	0.38
(1,692)	1:64:A:GLU:H	1:65:A:GLU:CB	2	0.38	0.02	0.38
(1,29)	1:-11:A:HIS:H	1:-11:A:HIS:CB	2	0.38	0.04	0.38
(1,805)	1:75:A:ASN:H	1:71:A:LYS:CA	2	0.36	0.1	0.36
(1,281)	1:22:A:ILE:H	1:61:A:ILE:CG1	2	0.35	0.07	0.35
(1,67)	1:-2:A:GLY:H	1:-3:A:ARG:CG	2	0.34	0.19	0.34
(3,33)	1:22:A:ILE:H	1:61:A:ILE:O	2	0.34	0.22	0.34
(1,283)	1:22:A:ILE:H	1:62:A:THR:CA	2	0.34	0.2	0.34
(3,5)	1:8:A:GLN:H	1:4:A:GLU:O	2	0.32	0.15	0.32
(3,19)	1:15:A:ASP:H	1:11:A:PHE:O	2	0.3	0.19	0.3
(3,42)	1:29:A:LEU:N	1:25:A:ASN:O	2	0.3	0.08	0.3
(1,57)	1:-5:A:VAL:H	1:-5:A:VAL:CG2	2	0.27	0.16	0.27
(3,107)	1:73:A:ALA:H	1:69:A:ALA:O	2	0.26	0.05	0.26
(1,36)	1:-9:A:SER:H	1:-10:A:HIS:CB	2	0.24	0.04	0.24
(1,103)	1:5:A:GLN:H	1:3:A:THR:CG2	2	0.24	0.03	0.24
(1,338)	1:28:A:PHE:H	1:25:A:ASN:CA	2	0.24	0.06	0.24
(1,216)	1:16:A:ARG:H	1:26:A:GLU:CB	2	0.23	0.01	0.23
(1,569)	1:51:A:VAL:H	1:52:A:GLN:CB	2	0.23	0.07	0.23
(1,181)	1:13:A:THR:H	1:10:A:LEU:CA	2	0.22	0.11	0.22
(1,194)	1:14:A:LEU:H	1:11:A:PHE:CA	2	0.22	0.0	0.22
(1,198)	1:14:A:LEU:H	1:13:A:THR:CG2	2	0.22	0.04	0.22
(1,16)	1:-14:A:HIS:H	1:-14:A:HIS:CB	2	0.21	0.07	0.21
(1,331)	1:27:A:LEU:H	1:26:A:GLU:CG	2	0.21	0.01	0.21
(1,300)	1:24:A:ILE:H	1:25:A:ASN:CB	2	0.2	0.02	0.2
(1,402)	1:36:A:VAL:H	1:35:A:ALA:CB	2	0.2	0.05	0.2
(1,526)	1:47:A:GLN:H	1:48:A:GLU:CB	2	0.19	0.08	0.19
(1,130)	1:7:A:LEU:H	1:8:A:GLN:CB	2	0.18	0.04	0.18
(1,796)	1:73:A:ALA:H	1:73:A:ALA:CB	2	0.18	0.04	0.18
(1,214)	1:16:A:ARG:H	1:16:A:ARG:CB	2	0.18	0.01	0.18
(1,147)	1:9:A:SER:H	1:8:A:GLN:CA	2	0.18	0.06	0.18
(1,193)	1:14:A:LEU:H	1:10:A:LEU:CA	2	0.17	0.05	0.17
(1,529)	1:48:A:GLU:H	1:47:A:GLN:CA	2	0.16	0.04	0.16
(1,769)	1:71:A:LYS:H	1:70:A:VAL:CB	2	0.16	0.02	0.16
(1,817)	1:76:A:LEU:H	1:76:A:LEU:CD1	2	0.16	0.04	0.16
(1,51)	1:-5:A:VAL:H	1:-6:A:LEU:CB	2	0.16	0.03	0.16
(1,330)	1:27:A:LEU:H	1:26:A:GLU:CB	2	0.16	0.03	0.16

Continued on next page...

Continued from previous page...

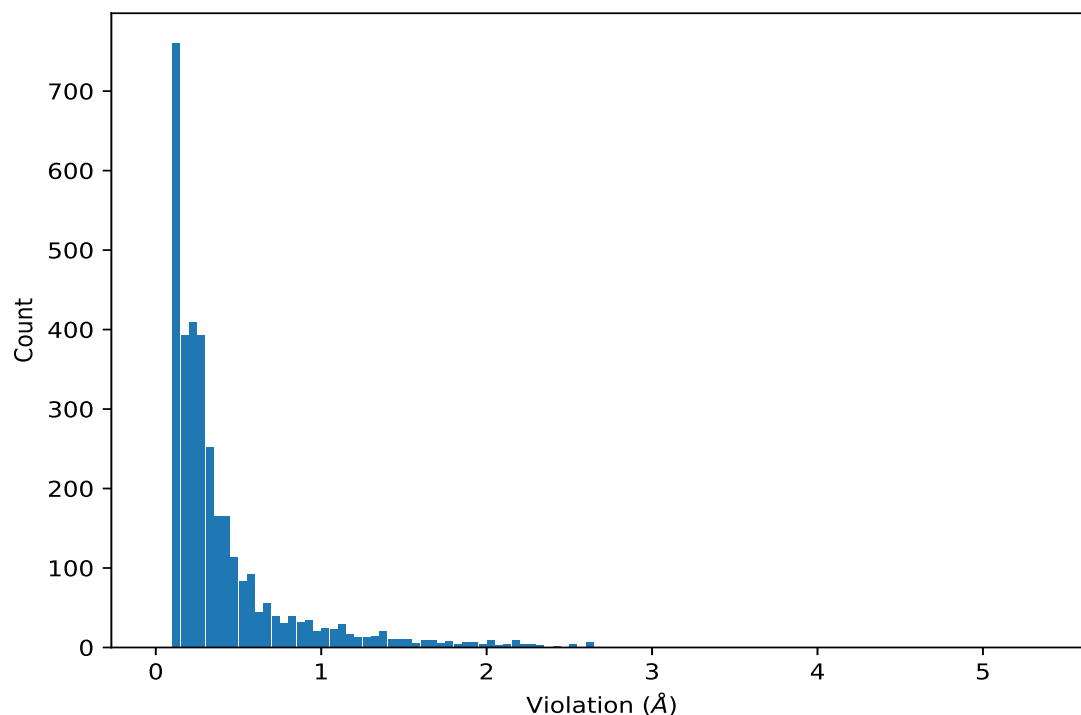
Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)	Median (Å)
(1,461)	1:41:A:THR:H	1:38:A:SER:CB	2	0.16	0.03	0.16
(1,482)	1:42:A:ASN:H	1:42:A:ASN:CB	2	0.16	0.02	0.16
(1,454)	1:40:A:GLU:H	1:40:A:GLU:CB	2	0.16	0.04	0.16
(1,582)	1:53:A:TYR:H	1:49:A:LEU:CA	2	0.16	0.01	0.16
(1,722)	1:67:A:LYS:H	1:66:A:LEU:CA	2	0.15	0.01	0.15
(1,432)	1:38:A:SER:H	1:37:A:ILE:CB	2	0.15	0.02	0.15
(1,460)	1:41:A:THR:H	1:38:A:SER:CA	2	0.15	0.02	0.15
(1,594)	1:54:A:ASP:H	1:53:A:TYR:CA	2	0.15	0.02	0.15
(1,789)	1:73:A:ALA:H	1:69:A:ALA:CA	2	0.15	0.03	0.15
(1,686)	1:64:A:GLU:H	1:62:A:THR:CG2	2	0.14	0.03	0.14
(1,557)	1:51:A:VAL:H	1:48:A:GLU:CA	2	0.14	0.0	0.14
(1,585)	1:53:A:TYR:H	1:52:A:GLN:CA	2	0.14	0.03	0.14
(1,624)	1:58:A:ASP:H	1:57:A:GLN:CB	2	0.14	0.01	0.14
(1,168)	1:11:A:PHE:H	1:10:A:LEU:CD2	2	0.14	0.02	0.14
(1,636)	1:59:A:GLY:H	1:58:A:ASP:CA	2	0.14	0.02	0.14
(1,650)	1:61:A:ILE:H	1:21:A:LYS:CA	2	0.14	0.02	0.14
(1,702)	1:65:A:GLU:H	1:64:A:GLU:CB	2	0.14	0.01	0.14
(1,735)	1:68:A:LYS:H	1:67:A:LYS:CA	2	0.14	0.02	0.14
(1,76)	1:1:A:MET:H	1:0:A:HIS:CA	2	0.13	0.03	0.13
(1,247)	1:19:A:ASP:H	1:19:A:ASP:CB	2	0.13	0.02	0.13
(1,356)	1:30:A:SER:H	1:29:A:LEU:CA	2	0.13	0.0	0.13
(3,104)	1:71:A:LYS:N	1:67:A:LYS:O	2	0.13	0.0	0.13
(1,694)	1:65:A:GLU:H	1:61:A:ILE:CA	2	0.12	0.02	0.12
(1,1)	1:-17:A:SER:H	1:-18:A:GLY:CA	2	0.12	0.01	0.12
(1,72)	1:0:A:HIS:H	1:-1:A:SER:CA	2	0.12	0.0	0.12
(1,519)	1:47:A:GLN:H	1:46:A:PRO:CA	2	0.12	0.01	0.12
(1,653)	1:61:A:ILE:H	1:22:A:ILE:CD1	2	0.12	0.0	0.12
(3,4)	1:7:A:LEU:N	1:3:A:THR:O	2	0.12	0.01	0.12
(1,178)	1:12:A:ASN:H	1:12:A:ASN:CB	2	0.12	0.02	0.12
(1,809)	1:75:A:ASN:H	1:75:A:ASN:CB	2	0.12	0.02	0.12
(1,170)	1:11:A:PHE:H	1:11:A:PHE:CB	2	0.12	0.0	0.12
(1,205)	1:15:A:ASP:H	1:14:A:LEU:CB	2	0.12	0.0	0.12
(1,596)	1:54:A:ASP:H	1:54:A:ASP:CB	2	0.12	0.0	0.12
(3,70)	1:53:A:TYR:N	1:49:A:LEU:O	2	0.12	0.0	0.12
(1,321)	1:26:A:GLU:H	1:26:A:GLU:CB	2	0.11	0.01	0.11
(1,579)	1:52:A:GLN:H	1:52:A:GLN:CB	2	0.11	0.0	0.11
(1,244)	1:19:A:ASP:H	1:18:A:GLN:CB	2	0.11	0.0	0.11
(1,260)	1:21:A:LYS:H	1:19:A:ASP:CA	2	0.11	0.0	0.11
(1,533)	1:48:A:GLU:H	1:48:A:GLU:CB	2	0.1	0.0	0.1

¹Number of violated models, ²Standard deviation

9.5 All violated distance restraints [i](#)

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

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



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

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

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,1)	1:-8:A:SER:H	1:-18:A:GLY:CA	3	5.39
(1,810)	1:76:A:LEU:H	1:1:A:MET:CB	2	4.84
(1,810)	1:76:A:LEU:H	1:1:A:MET:CB	6	4.69
(1,810)	1:76:A:LEU:H	1:1:A:MET:CB	4	4.64
(1,810)	1:76:A:LEU:H	1:1:A:MET:CB	1	4.3
(2,1)	1:-8:A:SER:H	1:-18:A:GLY:CA	6	3.93
(4,1)	1:37:A:ILE:H	1:49:A:LEU:CD1	3	3.37
(1,84)	1:2:A:ALA:H	1:40:A:GLU:CB	1	3.16
(1,810)	1:76:A:LEU:H	1:1:A:MET:CB	5	3.15
(1,810)	1:76:A:LEU:H	1:1:A:MET:CB	3	3.09

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(4,1)	1:37:A:ILE:H	1:49:A:LEU:CD1	10	3.03
(2,1)	1:-8:A:SER:H	1:-18:A:GLY:CA	8	2.87
(3,29)	1:19:A:ASP:H	1:17:A:ASP:OD1	11	2.75
(3,75)	1:57:A:GLN:H	1:54:A:ASP:O	1	2.7
(1,84)	1:2:A:ALA:H	1:40:A:GLU:CB	4	2.69
(3,89)	1:63:A:PHE:H	1:20:A:GLY:O	10	2.65
(3,76)	1:57:A:GLN:N	1:54:A:ASP:O	1	2.65
(1,111)	1:6:A:GLU:H	1:2:A:ALA:CB	1	2.64
(4,1)	1:37:A:ILE:H	1:49:A:LEU:CD1	1	2.63
(3,76)	1:57:A:GLN:N	1:54:A:ASP:O	6	2.62
(2,1)	1:-8:A:SER:H	1:-18:A:GLY:CA	9	2.62
(2,1)	1:-8:A:SER:H	1:-18:A:GLY:CA	4	2.6
(3,75)	1:57:A:GLN:H	1:54:A:ASP:O	6	2.59
(1,683)	1:63:A:PHE:H	1:20:A:GLY:C	10	2.55
(3,90)	1:63:A:PHE:N	1:20:A:GLY:O	10	2.54
(3,75)	1:57:A:GLN:H	1:54:A:ASP:O	12	2.54
(1,634)	1:59:A:GLY:H	1:50:A:LEU:CD2	2	2.5
(1,302)	1:24:A:ILE:H	1:60:A:SER:CB	7	2.49
(4,1)	1:37:A:ILE:H	1:49:A:LEU:CD1	2	2.44
(1,85)	1:2:A:ALA:H	1:40:A:GLU:CG	1	2.43
(3,30)	1:19:A:ASP:N	1:17:A:ASP:OD1	11	2.37
(1,302)	1:24:A:ILE:H	1:60:A:SER:CB	9	2.34
(3,23)	1:18:A:GLN:H	1:15:A:ASP:O	6	2.32
(1,86)	1:2:A:ALA:H	1:70:A:VAL:CG1	11	2.32
(1,86)	1:2:A:ALA:H	1:70:A:VAL:CG1	2	2.28
(1,86)	1:2:A:ALA:H	1:70:A:VAL:CG1	12	2.28
(3,47)	1:36:A:VAL:H	1:32:A:GLY:O	9	2.26
(3,24)	1:18:A:GLN:N	1:15:A:ASP:O	8	2.25
(3,48)	1:36:A:VAL:N	1:32:A:GLY:O	9	2.24
(3,76)	1:57:A:GLN:N	1:54:A:ASP:O	12	2.22
(1,597)	1:54:A:ASP:H	1:57:A:GLN:CA	1	2.22
(3,24)	1:18:A:GLN:N	1:15:A:ASP:O	6	2.21
(3,35)	1:24:A:ILE:H	1:59:A:GLY:O	3	2.19
(3,35)	1:24:A:ILE:H	1:59:A:GLY:O	11	2.19
(1,634)	1:59:A:GLY:H	1:50:A:LEU:CD2	1	2.19
(1,111)	1:6:A:GLU:H	1:2:A:ALA:CB	4	2.19
(3,23)	1:18:A:GLN:H	1:15:A:ASP:O	8	2.16
(1,810)	1:76:A:LEU:H	1:1:A:MET:CB	8	2.16
(3,30)	1:19:A:ASP:N	1:17:A:ASP:OD1	12	2.15
(3,24)	1:18:A:GLN:N	1:15:A:ASP:O	2	2.15
(1,303)	1:24:A:ILE:H	1:59:A:GLY:C	11	2.15
(1,810)	1:76:A:LEU:H	1:1:A:MET:CB	9	2.14

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,29)	1:19:A:ASP:H	1:17:A:ASP:OD1	12	2.12
(1,674)	1:63:A:PHE:H	1:21:A:LYS:CB	10	2.11
(3,47)	1:36:A:VAL:H	1:32:A:GLY:O	8	2.1
(3,35)	1:24:A:ILE:H	1:59:A:GLY:O	10	2.09
(1,673)	1:63:A:PHE:H	1:21:A:LYS:CA	10	2.09
(3,48)	1:36:A:VAL:N	1:32:A:GLY:O	8	2.07
(4,1)	1:37:A:ILE:H	1:49:A:LEU:CD1	4	2.04
(3,36)	1:24:A:ILE:N	1:59:A:GLY:O	3	2.04
(3,75)	1:57:A:GLN:H	1:54:A:ASP:O	10	2.03
(1,5)	1:-16:A:SER:H	1:-18:A:GLY:CA	8	2.03
(1,5)	1:-16:A:SER:H	1:-18:A:GLY:CA	11	2.03
(1,302)	1:24:A:ILE:H	1:60:A:SER:CB	3	2.02
(4,1)	1:37:A:ILE:H	1:49:A:LEU:CD1	6	2.01
(3,23)	1:18:A:GLN:H	1:15:A:ASP:O	2	2.01
(1,634)	1:59:A:GLY:H	1:50:A:LEU:CD2	4	2.0
(1,597)	1:54:A:ASP:H	1:57:A:GLN:CA	6	2.0
(3,21)	1:17:A:ASP:H	1:26:A:GLU:OE2	11	1.99
(3,22)	1:17:A:ASP:N	1:26:A:GLU:OE2	11	1.98
(1,810)	1:76:A:LEU:H	1:1:A:MET:CB	12	1.98
(1,811)	1:76:A:LEU:H	1:70:A:VAL:CG1	9	1.97
(1,389)	1:35:A:ALA:H	1:31:A:PRO:CA	9	1.95
(1,84)	1:2:A:ALA:H	1:40:A:GLU:CB	12	1.95
(3,24)	1:18:A:GLN:N	1:15:A:ASP:O	1	1.94
(1,634)	1:59:A:GLY:H	1:50:A:LEU:CD2	3	1.94
(3,36)	1:24:A:ILE:N	1:59:A:GLY:O	11	1.93
(3,23)	1:18:A:GLN:H	1:15:A:ASP:O	9	1.92
(1,407)	1:36:A:VAL:H	1:37:A:ILE:CG1	8	1.91
(1,398)	1:35:A:ALA:H	1:31:A:PRO:C	9	1.9
(1,131)	1:7:A:LEU:H	1:10:A:LEU:CD1	1	1.89
(3,23)	1:18:A:GLN:H	1:15:A:ASP:O	1	1.88
(1,302)	1:24:A:ILE:H	1:60:A:SER:CB	8	1.88
(3,24)	1:18:A:GLN:N	1:15:A:ASP:O	9	1.86
(1,303)	1:24:A:ILE:H	1:59:A:GLY:C	10	1.86
(3,75)	1:57:A:GLN:H	1:54:A:ASP:O	5	1.85
(1,390)	1:35:A:ALA:H	1:32:A:GLY:CA	8	1.84
(1,584)	1:53:A:TYR:H	1:50:A:LEU:CD1	7	1.81
(4,1)	1:37:A:ILE:H	1:49:A:LEU:CD1	12	1.8
(1,663)	1:62:A:THR:H	1:21:A:LYS:CG	4	1.8
(1,674)	1:63:A:PHE:H	1:21:A:LYS:CB	11	1.79
(1,407)	1:36:A:VAL:H	1:37:A:ILE:CG1	7	1.79
(3,76)	1:57:A:GLN:N	1:54:A:ASP:O	10	1.78
(1,5)	1:-16:A:SER:H	1:-18:A:GLY:CA	10	1.78

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,45)	1:35:A:ALA:H	1:31:A:PRO:O	9	1.77
(3,89)	1:63:A:PHE:H	1:20:A:GLY:O	4	1.75
(1,459)	1:41:A:THR:H	1:37:A:ILE:CG2	10	1.75
(1,411)	1:37:A:ILE:H	1:14:A:LEU:CD1	10	1.75
(3,46)	1:35:A:ALA:N	1:31:A:PRO:O	9	1.74
(1,597)	1:54:A:ASP:H	1:57:A:GLN:CA	10	1.73
(1,85)	1:2:A:ALA:H	1:40:A:GLU:CG	4	1.72
(1,303)	1:24:A:ILE:H	1:59:A:GLY:C	3	1.71
(1,301)	1:24:A:ILE:H	1:60:A:SER:CA	7	1.71
(2,1)	1:-8:A:SER:H	1:-18:A:GLY:CA	2	1.7
(1,810)	1:76:A:LEU:H	1:1:A:MET:CB	7	1.69
(1,5)	1:-16:A:SER:H	1:-18:A:GLY:CA	9	1.69
(3,46)	1:35:A:ALA:N	1:31:A:PRO:O	8	1.68
(1,302)	1:24:A:ILE:H	1:60:A:SER:CB	11	1.68
(1,85)	1:2:A:ALA:H	1:40:A:GLU:CG	12	1.68
(3,36)	1:24:A:ILE:N	1:59:A:GLY:O	10	1.66
(1,683)	1:63:A:PHE:H	1:20:A:GLY:C	4	1.66
(1,674)	1:63:A:PHE:H	1:21:A:LYS:CB	8	1.66
(1,663)	1:62:A:THR:H	1:21:A:LYS:CG	1	1.66
(1,674)	1:63:A:PHE:H	1:21:A:LYS:CB	7	1.63
(3,90)	1:63:A:PHE:N	1:20:A:GLY:O	4	1.62
(3,76)	1:57:A:GLN:N	1:54:A:ASP:O	5	1.62
(3,36)	1:24:A:ILE:N	1:59:A:GLY:O	12	1.62
(3,35)	1:24:A:ILE:H	1:59:A:GLY:O	12	1.62
(1,86)	1:2:A:ALA:H	1:70:A:VAL:CG1	6	1.62
(3,89)	1:63:A:PHE:H	1:20:A:GLY:O	3	1.61
(1,376)	1:34:A:SER:H	1:27:A:LEU:CD2	4	1.61
(1,86)	1:2:A:ALA:H	1:70:A:VAL:CG1	3	1.61
(1,5)	1:-16:A:SER:H	1:-18:A:GLY:CA	3	1.6
(3,24)	1:18:A:GLN:N	1:15:A:ASP:O	7	1.58
(1,301)	1:24:A:ILE:H	1:60:A:SER:CA	11	1.58
(3,45)	1:35:A:ALA:H	1:31:A:PRO:O	8	1.56
(3,23)	1:18:A:GLN:H	1:15:A:ASP:O	7	1.56
(1,683)	1:63:A:PHE:H	1:20:A:GLY:C	3	1.56
(1,473)	1:41:A:THR:H	1:49:A:LEU:CD2	7	1.56
(1,695)	1:65:A:GLU:H	1:61:A:ILE:CG2	6	1.54
(1,5)	1:-16:A:SER:H	1:-18:A:GLY:CA	4	1.54
(1,683)	1:63:A:PHE:H	1:20:A:GLY:C	8	1.53
(1,398)	1:35:A:ALA:H	1:31:A:PRO:C	8	1.53
(1,303)	1:24:A:ILE:H	1:59:A:GLY:C	12	1.53
(1,84)	1:2:A:ALA:H	1:40:A:GLU:CB	11	1.53
(1,411)	1:37:A:ILE:H	1:14:A:LEU:CD1	1	1.52

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,89)	1:63:A:PHE:H	1:20:A:GLY:O	8	1.51
(1,673)	1:63:A:PHE:H	1:21:A:LYS:CA	8	1.51
(1,597)	1:54:A:ASP:H	1:57:A:GLN:CA	3	1.5
(1,408)	1:36:A:VAL:H	1:32:A:GLY:C	9	1.5
(3,35)	1:24:A:ILE:H	1:59:A:GLY:O	1	1.49
(1,303)	1:24:A:ILE:H	1:59:A:GLY:C	7	1.49
(1,4)	1:-17:A:SER:H	1:-16:A:SER:CB	12	1.49
(4,1)	1:37:A:ILE:H	1:49:A:LEU:CD1	11	1.48
(1,811)	1:76:A:LEU:H	1:70:A:VAL:CG1	5	1.48
(1,301)	1:24:A:ILE:H	1:60:A:SER:CA	9	1.48
(1,5)	1:-16:A:SER:H	1:-18:A:GLY:CA	12	1.48
(1,407)	1:36:A:VAL:H	1:37:A:ILE:CG1	9	1.47
(1,376)	1:34:A:SER:H	1:27:A:LEU:CD2	2	1.47
(3,35)	1:24:A:ILE:H	1:59:A:GLY:O	7	1.46
(1,5)	1:-16:A:SER:H	1:-18:A:GLY:CA	5	1.46
(3,24)	1:18:A:GLN:N	1:15:A:ASP:O	3	1.45
(1,597)	1:54:A:ASP:H	1:57:A:GLN:CA	4	1.45
(1,390)	1:35:A:ALA:H	1:32:A:GLY:CA	9	1.45
(3,23)	1:18:A:GLN:H	1:15:A:ASP:O	3	1.44
(1,674)	1:63:A:PHE:H	1:21:A:LYS:CB	9	1.44
(1,634)	1:59:A:GLY:H	1:50:A:LEU:CD2	6	1.44
(1,673)	1:63:A:PHE:H	1:21:A:LYS:CA	1	1.43
(1,303)	1:24:A:ILE:H	1:59:A:GLY:C	1	1.43
(1,495)	1:43:A:THR:H	1:49:A:LEU:CD2	7	1.42
(1,683)	1:63:A:PHE:H	1:20:A:GLY:C	1	1.41
(1,674)	1:63:A:PHE:H	1:21:A:LYS:CB	3	1.41
(3,90)	1:63:A:PHE:N	1:20:A:GLY:O	3	1.4
(1,352)	1:30:A:SER:H	1:26:A:GLU:CA	7	1.4
(3,89)	1:63:A:PHE:H	1:20:A:GLY:O	1	1.39
(3,36)	1:24:A:ILE:N	1:59:A:GLY:O	7	1.39
(3,36)	1:24:A:ILE:N	1:59:A:GLY:O	9	1.39
(1,407)	1:36:A:VAL:H	1:37:A:ILE:CG1	10	1.39
(1,399)	1:36:A:VAL:H	1:32:A:GLY:CA	8	1.39
(1,131)	1:7:A:LEU:H	1:10:A:LEU:CD1	4	1.39
(3,36)	1:24:A:ILE:N	1:59:A:GLY:O	8	1.38
(3,35)	1:24:A:ILE:H	1:59:A:GLY:O	9	1.38
(1,459)	1:41:A:THR:H	1:37:A:ILE:CG2	9	1.38
(1,408)	1:36:A:VAL:H	1:32:A:GLY:C	8	1.38
(1,407)	1:36:A:VAL:H	1:37:A:ILE:CG1	3	1.38
(1,399)	1:36:A:VAL:H	1:32:A:GLY:CA	9	1.38
(3,26)	1:18:A:GLN:N	1:15:A:ASP:OD1	6	1.37
(1,182)	1:13:A:THR:H	1:10:A:LEU:CD2	4	1.37

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,301)	1:24:A:ILE:H	1:60:A:SER:CA	3	1.36
(3,89)	1:63:A:PHE:H	1:20:A:GLY:O	7	1.35
(1,352)	1:30:A:SER:H	1:26:A:GLU:CA	5	1.35
(1,303)	1:24:A:ILE:H	1:59:A:GLY:C	9	1.35
(1,5)	1:-16:A:SER:H	1:-18:A:GLY:CA	6	1.35
(3,36)	1:24:A:ILE:N	1:59:A:GLY:O	1	1.34
(1,663)	1:62:A:THR:H	1:21:A:LYS:CG	2	1.34
(1,534)	1:48:A:GLU:H	1:48:A:GLU:CG	10	1.34
(1,268)	1:21:A:LYS:H	1:62:A:THR:CA	10	1.33
(1,411)	1:37:A:ILE:H	1:14:A:LEU:CD1	2	1.32
(1,376)	1:34:A:SER:H	1:27:A:LEU:CD2	1	1.32
(3,71)	1:54:A:ASP:H	1:50:A:LEU:O	7	1.31
(3,35)	1:24:A:ILE:H	1:59:A:GLY:O	2	1.31
(1,674)	1:63:A:PHE:H	1:21:A:LYS:CB	12	1.31
(1,673)	1:63:A:PHE:H	1:21:A:LYS:CA	3	1.31
(1,597)	1:54:A:ASP:H	1:57:A:GLN:CA	5	1.31
(3,22)	1:17:A:ASP:N	1:26:A:GLU:OE2	12	1.3
(3,21)	1:17:A:ASP:H	1:26:A:GLU:OE2	12	1.3
(1,303)	1:24:A:ILE:H	1:59:A:GLY:C	2	1.3
(3,35)	1:24:A:ILE:H	1:59:A:GLY:O	8	1.28
(1,630)	1:58:A:ASP:H	1:56:A:ASP:CG	6	1.28
(1,302)	1:24:A:ILE:H	1:60:A:SER:CB	12	1.28
(1,673)	1:63:A:PHE:H	1:21:A:LYS:CA	7	1.27
(1,597)	1:54:A:ASP:H	1:57:A:GLN:CA	2	1.27
(1,597)	1:54:A:ASP:H	1:57:A:GLN:CA	12	1.27
(1,504)	1:44:A:ASN:H	1:48:A:GLU:CG	6	1.27
(3,90)	1:63:A:PHE:N	1:20:A:GLY:O	8	1.26
(3,77)	1:58:A:ASP:H	1:54:A:ASP:OD1	1	1.26
(1,673)	1:63:A:PHE:H	1:21:A:LYS:CA	11	1.26
(3,71)	1:54:A:ASP:H	1:50:A:LEU:O	4	1.25
(1,811)	1:76:A:LEU:H	1:70:A:VAL:CG1	4	1.25
(1,325)	1:26:A:GLU:H	1:28:A:PHE:CB	4	1.25
(3,89)	1:63:A:PHE:H	1:20:A:GLY:O	9	1.24
(1,673)	1:63:A:PHE:H	1:21:A:LYS:CA	4	1.24
(1,663)	1:62:A:THR:H	1:21:A:LYS:CG	7	1.23
(1,303)	1:24:A:ILE:H	1:59:A:GLY:C	8	1.23
(3,26)	1:18:A:GLN:N	1:15:A:ASP:OD1	2	1.22
(1,683)	1:63:A:PHE:H	1:20:A:GLY:C	7	1.22
(1,301)	1:24:A:ILE:H	1:60:A:SER:CA	8	1.22
(3,79)	1:58:A:ASP:H	1:56:A:ASP:OD1	3	1.21
(3,79)	1:58:A:ASP:H	1:56:A:ASP:OD1	5	1.21
(3,36)	1:24:A:ILE:N	1:59:A:GLY:O	6	1.21

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,675)	1:63:A:PHE:H	1:21:A:LYS:CG	1	1.21
(1,410)	1:37:A:ILE:H	1:10:A:LEU:CD2	12	1.21
(1,302)	1:24:A:ILE:H	1:60:A:SER:CB	5	1.21
(1,811)	1:76:A:LEU:H	1:70:A:VAL:CG1	2	1.2
(1,673)	1:63:A:PHE:H	1:21:A:LYS:CA	9	1.2
(1,620)	1:57:A:GLN:H	1:54:A:ASP:C	1	1.2
(2,1)	1:-8:A:SER:H	1:-18:A:GLY:CA	10	1.19
(1,494)	1:43:A:THR:H	1:49:A:LEU:CD1	3	1.19
(1,64)	1:-3:A:ARG:H	1:-3:A:ARG:CD	4	1.19
(3,57)	1:41:A:THR:H	1:37:A:ILE:O	10	1.18
(1,771)	1:71:A:LYS:H	1:70:A:VAL:CG2	10	1.18
(1,93)	1:3:A:THR:H	1:6:A:GLU:CG	1	1.18
(1,86)	1:2:A:ALA:H	1:70:A:VAL:CG1	5	1.18
(3,90)	1:63:A:PHE:N	1:20:A:GLY:O	7	1.17
(3,89)	1:63:A:PHE:H	1:20:A:GLY:O	12	1.17
(3,71)	1:54:A:ASP:H	1:50:A:LEU:O	1	1.17
(3,25)	1:18:A:GLN:H	1:15:A:ASP:OD1	2	1.17
(1,301)	1:24:A:ILE:H	1:60:A:SER:CA	2	1.17
(3,71)	1:54:A:ASP:H	1:50:A:LEU:O	2	1.16
(1,389)	1:35:A:ALA:H	1:31:A:PRO:CA	3	1.16
(3,90)	1:63:A:PHE:N	1:20:A:GLY:O	12	1.15
(3,36)	1:24:A:ILE:N	1:59:A:GLY:O	2	1.15
(1,774)	1:71:A:LYS:H	1:71:A:LYS:CE	11	1.15
(1,458)	1:41:A:THR:H	1:37:A:ILE:CA	10	1.15
(3,90)	1:63:A:PHE:N	1:20:A:GLY:O	1	1.14
(3,75)	1:57:A:GLN:H	1:54:A:ASP:O	11	1.14
(3,35)	1:24:A:ILE:H	1:59:A:GLY:O	6	1.14
(1,422)	1:37:A:ILE:H	1:37:A:ILE:CG1	7	1.14
(4,1)	1:37:A:ILE:H	1:49:A:LEU:CD1	7	1.13
(3,90)	1:63:A:PHE:N	1:20:A:GLY:O	9	1.13
(3,79)	1:58:A:ASP:H	1:56:A:ASP:OD1	6	1.13
(1,663)	1:62:A:THR:H	1:21:A:LYS:CG	10	1.13
(1,584)	1:53:A:TYR:H	1:50:A:LEU:CD1	10	1.13
(1,301)	1:24:A:ILE:H	1:60:A:SER:CA	12	1.13
(1,182)	1:13:A:THR:H	1:10:A:LEU:CD2	2	1.13
(1,449)	1:40:A:GLU:H	1:36:A:VAL:CG1	9	1.12
(1,389)	1:35:A:ALA:H	1:31:A:PRO:CA	8	1.12
(3,99)	1:69:A:ALA:H	1:65:A:GLU:O	5	1.11
(1,663)	1:62:A:THR:H	1:21:A:LYS:CG	9	1.11
(1,621)	1:58:A:ASP:H	1:54:A:ASP:CB	1	1.11
(1,410)	1:37:A:ILE:H	1:10:A:LEU:CD2	4	1.11
(1,410)	1:37:A:ILE:H	1:10:A:LEU:CD2	11	1.11

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,78)	1:58:A:ASP:N	1:54:A:ASP:OD1	1	1.1
(3,72)	1:54:A:ASP:N	1:50:A:LEU:O	7	1.1
(3,35)	1:24:A:ILE:H	1:59:A:GLY:O	4	1.1
(3,23)	1:18:A:GLN:H	1:15:A:ASP:O	5	1.1
(1,620)	1:57:A:GLN:H	1:54:A:ASP:C	6	1.1
(1,173)	1:12:A:ASN:H	1:8:A:GLN:CG	2	1.1
(1,99)	1:4:A:GLU:H	1:4:A:GLU:CG	12	1.1
(1,774)	1:71:A:LYS:H	1:71:A:LYS:CE	2	1.09
(1,683)	1:63:A:PHE:H	1:20:A:GLY:C	9	1.09
(1,138)	1:8:A:GLN:H	1:7:A:LEU:CD1	9	1.09
(3,58)	1:41:A:THR:N	1:37:A:ILE:O	10	1.08
(1,666)	1:62:A:THR:H	1:61:A:ILE:CG2	6	1.08
(1,642)	1:60:A:SER:H	1:50:A:LEU:CD2	2	1.08
(1,622)	1:58:A:ASP:H	1:56:A:ASP:CB	6	1.08
(1,473)	1:41:A:THR:H	1:49:A:LEU:CD2	5	1.08
(1,5)	1:-16:A:SER:H	1:-18:A:GLY:CA	7	1.08
(1,774)	1:71:A:LYS:H	1:71:A:LYS:CE	3	1.07
(1,774)	1:71:A:LYS:H	1:71:A:LYS:CE	4	1.07
(1,634)	1:59:A:GLY:H	1:50:A:LEU:CD2	9	1.07
(1,422)	1:37:A:ILE:H	1:37:A:ILE:CG1	8	1.07
(1,93)	1:3:A:THR:H	1:6:A:GLU:CG	5	1.07
(3,75)	1:57:A:GLN:H	1:54:A:ASP:O	3	1.06
(1,640)	1:60:A:SER:H	1:23:A:SER:CA	11	1.06
(1,584)	1:53:A:TYR:H	1:50:A:LEU:CD1	6	1.06
(1,411)	1:37:A:ILE:H	1:14:A:LEU:CD1	4	1.06
(3,72)	1:54:A:ASP:N	1:50:A:LEU:O	4	1.05
(3,36)	1:24:A:ILE:N	1:59:A:GLY:O	4	1.05
(1,640)	1:60:A:SER:H	1:23:A:SER:CA	12	1.05
(1,376)	1:34:A:SER:H	1:27:A:LEU:CD2	9	1.05
(1,303)	1:24:A:ILE:H	1:59:A:GLY:C	4	1.05
(1,695)	1:65:A:GLU:H	1:61:A:ILE:CG2	3	1.04
(1,630)	1:58:A:ASP:H	1:56:A:ASP:CG	5	1.04
(1,410)	1:37:A:ILE:H	1:10:A:LEU:CD2	1	1.04
(1,182)	1:13:A:THR:H	1:10:A:LEU:CD2	11	1.04
(1,56)	1:-5:A:VAL:H	1:-5:A:VAL:CG1	9	1.04
(3,89)	1:63:A:PHE:H	1:20:A:GLY:O	11	1.03
(1,629)	1:58:A:ASP:H	1:54:A:ASP:CG	1	1.03
(1,422)	1:37:A:ILE:H	1:37:A:ILE:CG1	3	1.03
(1,325)	1:26:A:GLU:H	1:28:A:PHE:CB	2	1.03
(1,302)	1:24:A:ILE:H	1:60:A:SER:CB	2	1.03
(1,238)	1:18:A:GLN:H	1:15:A:ASP:C	8	1.03
(3,100)	1:69:A:ALA:N	1:65:A:GLU:O	5	1.02

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,74)	1:56:A:ASP:N	1:65:A:GLU:OE2	3	1.02
(3,25)	1:18:A:GLN:H	1:15:A:ASP:OD1	6	1.02
(3,76)	1:57:A:GLN:N	1:54:A:ASP:O	3	1.01
(1,761)	1:70:A:VAL:H	1:70:A:VAL:CG1	10	1.01
(1,640)	1:60:A:SER:H	1:23:A:SER:CA	9	1.01
(1,564)	1:51:A:VAL:H	1:50:A:LEU:CD2	3	1.01
(1,303)	1:24:A:ILE:H	1:59:A:GLY:C	6	1.01
(3,47)	1:36:A:VAL:H	1:32:A:GLY:O	5	1.0
(1,673)	1:63:A:PHE:H	1:21:A:LYS:CA	12	1.0
(1,503)	1:44:A:ASN:H	1:48:A:GLU:CB	6	1.0
(1,182)	1:13:A:THR:H	1:10:A:LEU:CD2	1	1.0
(1,99)	1:4:A:GLU:H	1:4:A:GLU:CG	11	1.0
(1,786)	1:72:A:LYS:H	1:72:A:LYS:CD	3	0.99
(1,785)	1:72:A:LYS:H	1:72:A:LYS:CG	3	0.99
(1,675)	1:63:A:PHE:H	1:21:A:LYS:CG	4	0.99
(1,411)	1:37:A:ILE:H	1:14:A:LEU:CD1	7	0.99
(1,131)	1:7:A:LEU:H	1:10:A:LEU:CD1	11	0.99
(3,80)	1:58:A:ASP:N	1:56:A:ASP:OD1	3	0.98
(1,752)	1:69:A:ALA:H	1:65:A:GLU:C	5	0.98
(1,642)	1:60:A:SER:H	1:50:A:LEU:CD2	4	0.98
(1,630)	1:58:A:ASP:H	1:56:A:ASP:CG	3	0.98
(1,459)	1:41:A:THR:H	1:37:A:ILE:CG2	8	0.98
(3,73)	1:56:A:ASP:H	1:65:A:GLU:OE2	3	0.97
(1,550)	1:50:A:LEU:H	1:49:A:LEU:CD2	7	0.97
(1,476)	1:41:A:THR:H	1:37:A:ILE:C	10	0.97
(1,362)	1:30:A:SER:H	1:31:A:PRO:CG	4	0.97
(1,238)	1:18:A:GLN:H	1:15:A:ASP:C	6	0.97
(1,93)	1:3:A:THR:H	1:6:A:GLU:CG	4	0.97
(1,683)	1:63:A:PHE:H	1:20:A:GLY:C	12	0.96
(1,423)	1:37:A:ILE:H	1:37:A:ILE:CG2	8	0.96
(1,422)	1:37:A:ILE:H	1:37:A:ILE:CG1	9	0.96
(1,301)	1:24:A:ILE:H	1:60:A:SER:CA	1	0.96
(1,4)	1:-17:A:SER:H	1:-16:A:SER:CB	5	0.96
(3,72)	1:54:A:ASP:N	1:50:A:LEU:O	1	0.95
(3,72)	1:54:A:ASP:N	1:50:A:LEU:O	2	0.95
(3,63)	1:50:A:LEU:H	1:46:A:PRO:O	3	0.95
(3,62)	1:48:A:GLU:N	1:45:A:SER:OG	3	0.95
(3,57)	1:41:A:THR:H	1:37:A:ILE:O	9	0.95
(1,794)	1:73:A:ALA:H	1:72:A:LYS:CD	12	0.95
(1,564)	1:51:A:VAL:H	1:50:A:LEU:CD2	7	0.95
(3,61)	1:48:A:GLU:H	1:45:A:SER:OG	3	0.94
(1,774)	1:71:A:LYS:H	1:71:A:LYS:CE	1	0.94

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,708)	1:66:A:LEU:H	1:61:A:ILE:CG2	3	0.94
(1,640)	1:60:A:SER:H	1:23:A:SER:CA	7	0.94
(1,620)	1:57:A:GLN:H	1:54:A:ASP:C	12	0.94
(1,131)	1:7:A:LEU:H	1:10:A:LEU:CD1	2	0.94
(1,119)	1:6:A:GLU:H	1:6:A:GLU:CG	9	0.94
(1,85)	1:2:A:ALA:H	1:40:A:GLU:CG	11	0.94
(1,17)	1:-14:A:HIS:H	1:-12:A:HIS:CB	1	0.94
(3,64)	1:50:A:LEU:N	1:46:A:PRO:O	3	0.93
(3,26)	1:18:A:GLN:N	1:15:A:ASP:OD1	3	0.93
(3,15)	1:13:A:THR:H	1:9:A:SER:O	8	0.93
(1,811)	1:76:A:LEU:H	1:70:A:VAL:CG1	8	0.93
(1,598)	1:54:A:ASP:H	1:50:A:LEU:C	2	0.93
(3,92)	1:65:A:GLU:N	1:62:A:THR:OG1	7	0.92
(3,24)	1:18:A:GLN:N	1:15:A:ASP:O	5	0.92
(1,674)	1:63:A:PHE:H	1:21:A:LYS:CB	1	0.92
(1,620)	1:57:A:GLN:H	1:54:A:ASP:C	10	0.92
(1,473)	1:41:A:THR:H	1:49:A:LEU:CD2	12	0.92
(1,458)	1:41:A:THR:H	1:37:A:ILE:CA	9	0.92
(1,301)	1:24:A:ILE:H	1:60:A:SER:CA	10	0.91
(3,91)	1:65:A:GLU:H	1:62:A:THR:OG1	7	0.9
(3,28)	1:19:A:ASP:N	1:15:A:ASP:OD1	6	0.9
(1,794)	1:73:A:ALA:H	1:72:A:LYS:CD	10	0.9
(1,774)	1:71:A:LYS:H	1:71:A:LYS:CE	6	0.9
(1,534)	1:48:A:GLU:H	1:48:A:GLU:CG	11	0.9
(1,412)	1:37:A:ILE:H	1:33:A:LEU:CA	5	0.9
(3,58)	1:41:A:THR:N	1:37:A:ILE:O	9	0.89
(1,527)	1:48:A:GLU:H	1:43:A:THR:CB	6	0.89
(1,459)	1:41:A:THR:H	1:37:A:ILE:CG2	2	0.89
(1,459)	1:41:A:THR:H	1:37:A:ILE:CG2	3	0.89
(1,455)	1:40:A:GLU:H	1:40:A:GLU:CG	1	0.89
(1,399)	1:36:A:VAL:H	1:32:A:GLY:CA	5	0.89
(3,77)	1:58:A:ASP:H	1:54:A:ASP:OD1	4	0.88
(1,785)	1:72:A:LYS:H	1:72:A:LYS:CG	6	0.88
(1,622)	1:58:A:ASP:H	1:56:A:ASP:CB	5	0.88
(1,597)	1:54:A:ASP:H	1:57:A:GLN:CA	11	0.88
(1,398)	1:35:A:ALA:H	1:31:A:PRO:C	3	0.88
(1,362)	1:30:A:SER:H	1:31:A:PRO:CG	2	0.88
(1,302)	1:24:A:ILE:H	1:60:A:SER:CB	1	0.88
(3,80)	1:58:A:ASP:N	1:56:A:ASP:OD1	5	0.87
(1,682)	1:63:A:PHE:H	1:66:A:LEU:CB	9	0.87
(1,663)	1:62:A:THR:H	1:21:A:LYS:CG	8	0.87
(1,598)	1:54:A:ASP:H	1:50:A:LEU:C	4	0.87

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,455)	1:40:A:GLU:H	1:40:A:GLU:CG	4	0.87
(1,422)	1:37:A:ILE:H	1:37:A:ILE:CG1	10	0.87
(1,238)	1:18:A:GLN:H	1:15:A:ASP:C	2	0.87
(1,207)	1:15:A:ASP:H	1:14:A:LEU:CD2	12	0.87
(3,90)	1:63:A:PHE:N	1:20:A:GLY:O	11	0.86
(3,56)	1:40:A:GLU:N	1:36:A:VAL:O	9	0.86
(3,55)	1:40:A:GLU:H	1:36:A:VAL:O	9	0.86
(1,774)	1:71:A:LYS:H	1:71:A:LYS:CE	7	0.86
(1,640)	1:60:A:SER:H	1:23:A:SER:CA	10	0.86
(1,621)	1:58:A:ASP:H	1:54:A:ASP:CB	10	0.86
(1,613)	1:56:A:ASP:H	1:65:A:GLU:CG	9	0.86
(1,592)	1:54:A:ASP:H	1:50:A:LEU:CA	4	0.86
(1,483)	1:43:A:THR:H	1:38:A:SER:CA	11	0.86
(1,250)	1:19:A:ASP:H	1:17:A:ASP:CG	9	0.86
(1,226)	1:17:A:ASP:H	1:18:A:GLN:CA	1	0.86
(1,629)	1:58:A:ASP:H	1:54:A:ASP:CG	10	0.85
(1,408)	1:36:A:VAL:H	1:32:A:GLY:C	5	0.85
(3,71)	1:54:A:ASP:H	1:50:A:LEU:O	8	0.84
(3,45)	1:35:A:ALA:H	1:31:A:PRO:O	3	0.84
(3,29)	1:19:A:ASP:H	1:17:A:ASP:OD1	9	0.84
(1,423)	1:37:A:ILE:H	1:37:A:ILE:CG2	7	0.84
(1,317)	1:26:A:GLU:H	1:24:A:ILE:CG2	11	0.84
(1,27)	1:-11:A:HIS:H	1:-12:A:HIS:CB	11	0.84
(3,80)	1:58:A:ASP:N	1:56:A:ASP:OD1	6	0.83
(3,76)	1:57:A:GLN:N	1:54:A:ASP:O	11	0.83
(3,46)	1:35:A:ALA:N	1:31:A:PRO:O	3	0.83
(3,1)	1:6:A:GLU:H	1:3:A:THR:O	6	0.83
(1,811)	1:76:A:LEU:H	1:70:A:VAL:CG1	3	0.83
(1,494)	1:43:A:THR:H	1:49:A:LEU:CD1	7	0.83
(1,484)	1:43:A:THR:H	1:38:A:SER:CB	11	0.83
(1,476)	1:41:A:THR:H	1:37:A:ILE:C	9	0.83
(1,459)	1:41:A:THR:H	1:37:A:ILE:CG2	7	0.83
(1,423)	1:37:A:ILE:H	1:37:A:ILE:CG2	9	0.83
(1,352)	1:30:A:SER:H	1:26:A:GLU:CA	9	0.83
(1,325)	1:26:A:GLU:H	1:28:A:PHE:CB	1	0.83
(1,92)	1:3:A:THR:H	1:6:A:GLU:CB	1	0.83
(1,52)	1:-5:A:VAL:H	1:-6:A:LEU:CG	11	0.83
(1,630)	1:58:A:ASP:H	1:56:A:ASP:CG	8	0.82
(1,427)	1:37:A:ILE:H	1:33:A:LEU:C	5	0.82
(1,423)	1:37:A:ILE:H	1:37:A:ILE:CG2	3	0.82
(1,708)	1:66:A:LEU:H	1:61:A:ILE:CG2	6	0.81
(1,640)	1:60:A:SER:H	1:23:A:SER:CA	8	0.81

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,630)	1:58:A:ASP:H	1:56:A:ASP:CG	4	0.81
(1,592)	1:54:A:ASP:H	1:50:A:LEU:CA	2	0.81
(1,409)	1:37:A:ILE:H	1:10:A:LEU:CD1	12	0.81
(1,324)	1:26:A:GLU:H	1:27:A:LEU:CG	4	0.81
(4,1)	1:37:A:ILE:H	1:49:A:LEU:CD1	5	0.8
(3,92)	1:65:A:GLU:N	1:62:A:THR:OG1	8	0.8
(3,91)	1:65:A:GLU:H	1:62:A:THR:OG1	8	0.8
(1,695)	1:65:A:GLU:H	1:61:A:ILE:CG2	2	0.8
(1,613)	1:56:A:ASP:H	1:65:A:GLU:CG	8	0.8
(1,545)	1:50:A:LEU:H	1:46:A:PRO:CA	3	0.8
(1,410)	1:37:A:ILE:H	1:10:A:LEU:CD2	2	0.8
(1,371)	1:33:A:LEU:H	1:30:A:SER:CB	11	0.8
(1,352)	1:30:A:SER:H	1:26:A:GLU:CA	10	0.8
(3,48)	1:36:A:VAL:N	1:32:A:GLY:O	5	0.79
(1,483)	1:43:A:THR:H	1:38:A:SER:CA	12	0.79
(1,423)	1:37:A:ILE:H	1:37:A:ILE:CG2	10	0.79
(3,29)	1:19:A:ASP:H	1:17:A:ASP:OD1	2	0.78
(3,28)	1:19:A:ASP:N	1:15:A:ASP:OD1	2	0.78
(1,811)	1:76:A:LEU:H	1:70:A:VAL:CG1	10	0.78
(1,615)	1:57:A:GLN:H	1:54:A:ASP:CB	1	0.78
(1,284)	1:22:A:ILE:H	1:61:A:ILE:C	10	0.78
(1,93)	1:3:A:THR:H	1:6:A:GLU:CG	8	0.78
(3,27)	1:19:A:ASP:H	1:15:A:ASP:OD1	6	0.77
(1,648)	1:60:A:SER:H	1:61:A:ILE:CG1	6	0.77
(1,620)	1:57:A:GLN:H	1:54:A:ASP:C	5	0.77
(1,495)	1:43:A:THR:H	1:49:A:LEU:CD2	9	0.77
(1,391)	1:35:A:ALA:H	1:33:A:LEU:CA	8	0.77
(1,250)	1:19:A:ASP:H	1:17:A:ASP:CG	11	0.77
(1,120)	1:6:A:GLU:H	1:7:A:LEU:CB	11	0.77
(1,663)	1:62:A:THR:H	1:21:A:LYS:CG	11	0.76
(1,648)	1:60:A:SER:H	1:61:A:ILE:CG1	3	0.76
(1,630)	1:58:A:ASP:H	1:56:A:ASP:CG	1	0.76
(1,597)	1:54:A:ASP:H	1:57:A:GLN:CA	8	0.76
(1,597)	1:54:A:ASP:H	1:57:A:GLN:CA	9	0.76
(1,357)	1:30:A:SER:H	1:29:A:LEU:CB	8	0.76
(1,317)	1:26:A:GLU:H	1:24:A:ILE:CG2	12	0.76
(1,100)	1:4:A:GLU:H	1:5:A:GLN:CB	7	0.76
(3,1)	1:6:A:GLU:H	1:3:A:THR:O	1	0.75
(1,448)	1:40:A:GLU:H	1:36:A:VAL:CA	9	0.75
(1,242)	1:19:A:ASP:H	1:17:A:ASP:CB	9	0.75
(1,227)	1:17:A:ASP:H	1:18:A:GLN:CB	1	0.75
(1,192)	1:13:A:THR:H	1:9:A:SER:C	8	0.75

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,190)	1:13:A:THR:H	1:14:A:LEU:CA	8	0.75
(1,53)	1:-5:A:VAL:H	1:-6:A:LEU:CD2	5	0.75
(3,78)	1:58:A:ASP:N	1:54:A:ASP:OD1	4	0.74
(3,74)	1:56:A:ASP:N	1:65:A:GLU:OE2	11	0.74
(3,39)	1:28:A:PHE:H	1:24:A:ILE:O	12	0.74
(1,786)	1:72:A:LYS:H	1:72:A:LYS:CD	6	0.74
(1,698)	1:65:A:GLU:H	1:62:A:THR:CG2	7	0.74
(1,634)	1:59:A:GLY:H	1:50:A:LEU:CD2	8	0.74
(1,534)	1:48:A:GLU:H	1:48:A:GLU:CG	12	0.74
(1,503)	1:44:A:ASN:H	1:48:A:GLU:CB	3	0.74
(1,371)	1:33:A:LEU:H	1:30:A:SER:CB	12	0.74
(1,95)	1:4:A:GLU:H	1:3:A:THR:CB	1	0.74
(1,5)	1:-16:A:SER:H	1:-18:A:GLY:CA	1	0.74
(1,675)	1:63:A:PHE:H	1:21:A:LYS:CG	2	0.73
(1,674)	1:63:A:PHE:H	1:21:A:LYS:CB	4	0.73
(1,608)	1:56:A:ASP:H	1:55:A:SER:CB	10	0.73
(1,397)	1:35:A:ALA:H	1:38:A:SER:CB	7	0.73
(1,357)	1:30:A:SER:H	1:29:A:LEU:CB	9	0.73
(1,299)	1:24:A:ILE:H	1:24:A:ILE:CD1	12	0.73
(1,111)	1:6:A:GLU:H	1:2:A:ALA:CB	9	0.73
(3,77)	1:58:A:ASP:H	1:54:A:ASP:OD1	12	0.72
(3,72)	1:54:A:ASP:N	1:50:A:LEU:O	8	0.72
(3,51)	1:38:A:SER:H	1:34:A:SER:O	9	0.72
(3,25)	1:18:A:GLN:H	1:15:A:ASP:OD1	1	0.72
(3,2)	1:6:A:GLU:N	1:3:A:THR:O	6	0.72
(1,811)	1:76:A:LEU:H	1:70:A:VAL:CG1	6	0.72
(1,792)	1:73:A:ALA:H	1:72:A:LYS:CB	12	0.72
(1,698)	1:65:A:GLU:H	1:62:A:THR:CG2	8	0.72
(1,640)	1:60:A:SER:H	1:23:A:SER:CA	4	0.72
(1,622)	1:58:A:ASP:H	1:56:A:ASP:CB	4	0.72
(1,598)	1:54:A:ASP:H	1:50:A:LEU:C	7	0.72
(1,457)	1:40:A:GLU:H	1:36:A:VAL:C	9	0.72
(1,448)	1:40:A:GLU:H	1:36:A:VAL:CA	10	0.72
(1,7)	1:-16:A:SER:H	1:-17:A:SER:CB	2	0.72
(3,79)	1:58:A:ASP:H	1:56:A:ASP:OD1	1	0.71
(3,50)	1:37:A:ILE:N	1:33:A:LEU:O	5	0.71
(1,682)	1:63:A:PHE:H	1:66:A:LEU:CB	4	0.71
(1,669)	1:62:A:THR:H	1:62:A:THR:CG2	7	0.71
(1,553)	1:50:A:LEU:H	1:51:A:VAL:CG2	5	0.71
(1,515)	1:45:A:SER:H	1:48:A:GLU:CG	10	0.71
(1,495)	1:43:A:THR:H	1:49:A:LEU:CD2	12	0.71
(1,793)	1:73:A:ALA:H	1:72:A:LYS:CG	10	0.7

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,608)	1:56:A:ASP:H	1:55:A:SER:CB	6	0.7
(1,554)	1:50:A:LEU:H	1:46:A:PRO:C	3	0.7
(1,504)	1:44:A:ASN:H	1:48:A:GLU:CG	5	0.7
(1,455)	1:40:A:GLU:H	1:40:A:GLU:CG	2	0.7
(1,383)	1:34:A:SER:H	1:33:A:LEU:CD1	9	0.7
(1,315)	1:26:A:GLU:H	1:23:A:SER:CB	2	0.7
(1,238)	1:18:A:GLN:H	1:15:A:ASP:C	1	0.7
(1,238)	1:18:A:GLN:H	1:15:A:ASP:C	3	0.7
(1,180)	1:13:A:THR:H	1:9:A:SER:CA	8	0.7
(4,1)	1:37:A:ILE:H	1:49:A:LEU:CD1	9	0.69
(3,55)	1:40:A:GLU:H	1:36:A:VAL:O	10	0.69
(3,49)	1:37:A:ILE:H	1:33:A:LEU:O	5	0.69
(1,683)	1:63:A:PHE:H	1:20:A:GLY:C	11	0.69
(1,631)	1:58:A:ASP:H	1:58:A:ASP:OD1	11	0.69
(1,613)	1:56:A:ASP:H	1:65:A:GLU:CG	6	0.69
(1,494)	1:43:A:THR:H	1:49:A:LEU:CD1	12	0.69
(1,424)	1:37:A:ILE:H	1:37:A:ILE:CD1	8	0.69
(1,391)	1:35:A:ALA:H	1:33:A:LEU:CA	9	0.69
(1,352)	1:30:A:SER:H	1:26:A:GLU:CA	11	0.69
(1,337)	1:28:A:PHE:H	1:24:A:ILE:CA	12	0.69
(1,250)	1:19:A:ASP:H	1:17:A:ASP:CG	2	0.69
(3,50)	1:37:A:ILE:N	1:33:A:LEU:O	11	0.68
(3,23)	1:18:A:GLN:H	1:15:A:ASP:O	4	0.68
(1,682)	1:63:A:PHE:H	1:66:A:LEU:CB	5	0.68
(1,505)	1:45:A:SER:H	1:43:A:THR:CA	8	0.68
(1,457)	1:40:A:GLU:H	1:36:A:VAL:C	10	0.68
(1,424)	1:37:A:ILE:H	1:37:A:ILE:CD1	10	0.68
(1,316)	1:26:A:GLU:H	1:24:A:ILE:CA	4	0.68
(1,238)	1:18:A:GLN:H	1:15:A:ASP:C	9	0.68
(1,215)	1:16:A:ARG:H	1:17:A:ASP:CB	6	0.68
(1,100)	1:4:A:GLU:H	1:5:A:GLN:CB	5	0.68
(3,73)	1:56:A:ASP:H	1:65:A:GLU:OE2	11	0.67
(3,24)	1:18:A:GLN:N	1:15:A:ASP:O	4	0.67
(1,673)	1:63:A:PHE:H	1:21:A:LYS:CA	2	0.67
(1,649)	1:60:A:SER:H	1:58:A:ASP:CG	4	0.67
(1,622)	1:58:A:ASP:H	1:56:A:ASP:CB	8	0.67
(1,191)	1:13:A:THR:H	1:14:A:LEU:CB	8	0.67
(1,4)	1:-17:A:SER:H	1:-16:A:SER:CB	10	0.67
(3,100)	1:69:A:ALA:N	1:65:A:GLU:O	9	0.66
(3,79)	1:58:A:ASP:H	1:56:A:ASP:OD1	2	0.66
(3,78)	1:58:A:ASP:N	1:54:A:ASP:OD1	12	0.66
(3,25)	1:18:A:GLN:H	1:15:A:ASP:OD1	3	0.66

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,23)	1:18:A:GLN:H	1:15:A:ASP:O	12	0.66
(3,1)	1:6:A:GLU:H	1:3:A:THR:O	4	0.66
(1,811)	1:76:A:LEU:H	1:70:A:VAL:CG1	1	0.66
(1,649)	1:60:A:SER:H	1:58:A:ASP:CG	10	0.66
(1,622)	1:58:A:ASP:H	1:56:A:ASP:CB	1	0.66
(1,622)	1:58:A:ASP:H	1:56:A:ASP:CB	3	0.66
(1,410)	1:37:A:ILE:H	1:10:A:LEU:CD2	10	0.66
(1,396)	1:35:A:ALA:H	1:36:A:VAL:CG2	9	0.66
(1,352)	1:30:A:SER:H	1:26:A:GLU:CA	8	0.66
(3,24)	1:18:A:GLN:N	1:15:A:ASP:O	12	0.65
(1,726)	1:67:A:LYS:H	1:66:A:LEU:CD2	9	0.65
(1,629)	1:58:A:ASP:H	1:54:A:ASP:CG	4	0.65
(1,299)	1:24:A:ILE:H	1:24:A:ILE:CD1	10	0.65
(1,811)	1:76:A:LEU:H	1:70:A:VAL:CG1	7	0.64
(1,642)	1:60:A:SER:H	1:50:A:LEU:CD2	9	0.64
(1,509)	1:45:A:SER:H	1:44:A:ASN:CB	8	0.64
(1,381)	1:34:A:SER:H	1:33:A:LEU:CB	9	0.64
(3,84)	1:60:A:SER:N	1:58:A:ASP:OD1	4	0.63
(3,79)	1:58:A:ASP:H	1:56:A:ASP:OD1	8	0.63
(3,49)	1:37:A:ILE:H	1:33:A:LEU:O	11	0.63
(1,754)	1:70:A:VAL:H	1:66:A:LEU:CD1	4	0.63
(1,744)	1:68:A:LYS:H	1:64:A:GLU:C	5	0.63
(1,654)	1:61:A:ILE:H	1:23:A:SER:CA	6	0.63
(1,473)	1:41:A:THR:H	1:49:A:LEU:CD2	9	0.63
(1,448)	1:40:A:GLU:H	1:36:A:VAL:CA	12	0.63
(1,397)	1:35:A:ALA:H	1:38:A:SER:CB	10	0.63
(1,379)	1:34:A:SER:H	1:32:A:GLY:CA	9	0.63
(1,348)	1:29:A:LEU:H	1:28:A:PHE:CB	12	0.63
(1,334)	1:27:A:LEU:H	1:27:A:LEU:CD1	2	0.63
(1,317)	1:26:A:GLU:H	1:24:A:ILE:CG2	4	0.63
(1,101)	1:5:A:GLN:H	1:3:A:THR:CA	4	0.63
(1,92)	1:3:A:THR:H	1:6:A:GLU:CB	5	0.63
(1,52)	1:-5:A:VAL:H	1:-6:A:LEU:CG	10	0.63
(3,41)	1:29:A:LEU:H	1:25:A:ASN:O	1	0.62
(3,40)	1:28:A:PHE:N	1:24:A:ILE:O	2	0.62
(3,34)	1:22:A:ILE:N	1:61:A:ILE:O	10	0.62
(1,654)	1:61:A:ILE:H	1:23:A:SER:CA	12	0.62
(1,621)	1:58:A:ASP:H	1:54:A:ASP:CB	4	0.62
(1,592)	1:54:A:ASP:H	1:50:A:LEU:CA	7	0.62
(1,448)	1:40:A:GLU:H	1:36:A:VAL:CA	6	0.62
(1,427)	1:37:A:ILE:H	1:33:A:LEU:C	11	0.62
(1,92)	1:3:A:THR:H	1:6:A:GLU:CB	4	0.62

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,27)	1:-11:A:HIS:H	1:-12:A:HIS:CB	8	0.62
(3,56)	1:40:A:GLU:N	1:36:A:VAL:O	10	0.61
(3,26)	1:18:A:GLN:N	1:15:A:ASP:OD1	1	0.61
(1,753)	1:70:A:VAL:H	1:66:A:LEU:CA	5	0.61
(1,733)	1:68:A:LYS:H	1:64:A:GLU:CA	5	0.61
(1,682)	1:63:A:PHE:H	1:66:A:LEU:CB	10	0.61
(1,669)	1:62:A:THR:H	1:62:A:THR:CG2	8	0.61
(1,631)	1:58:A:ASP:H	1:58:A:ASP:OD1	10	0.61
(1,424)	1:37:A:ILE:H	1:37:A:ILE:CD1	9	0.61
(1,407)	1:36:A:VAL:H	1:37:A:ILE:CG1	2	0.61
(1,379)	1:34:A:SER:H	1:32:A:GLY:CA	3	0.61
(1,354)	1:30:A:SER:H	1:28:A:PHE:CA	3	0.61
(1,229)	1:17:A:ASP:H	1:26:A:GLU:CG	9	0.61
(1,101)	1:5:A:GLN:H	1:3:A:THR:CA	5	0.61
(1,44)	1:-7:A:GLY:H	1:-8:A:SER:CB	10	0.61
(1,27)	1:-11:A:HIS:H	1:-12:A:HIS:CB	12	0.61
(3,79)	1:58:A:ASP:H	1:56:A:ASP:OD1	4	0.6
(3,62)	1:48:A:GLU:N	1:45:A:SER:OG	10	0.6
(3,40)	1:28:A:PHE:N	1:24:A:ILE:O	4	0.6
(3,40)	1:28:A:PHE:N	1:24:A:ILE:O	12	0.6
(3,27)	1:19:A:ASP:H	1:15:A:ASP:OD1	2	0.6
(1,793)	1:73:A:ALA:H	1:72:A:LYS:CG	12	0.6
(1,648)	1:60:A:SER:H	1:61:A:ILE:CG1	4	0.6
(1,640)	1:60:A:SER:H	1:23:A:SER:CA	2	0.6
(1,631)	1:58:A:ASP:H	1:58:A:ASP:OD1	2	0.6
(1,506)	1:45:A:SER:H	1:43:A:THR:CB	8	0.6
(1,357)	1:30:A:SER:H	1:29:A:LEU:CB	10	0.6
(1,301)	1:24:A:ILE:H	1:60:A:SER:CA	4	0.6
(1,229)	1:17:A:ASP:H	1:26:A:GLU:CG	4	0.6
(1,186)	1:13:A:THR:H	1:12:A:ASN:CB	6	0.6
(3,101)	1:70:A:VAL:H	1:66:A:LEU:O	5	0.59
(3,100)	1:69:A:ALA:N	1:65:A:GLU:O	8	0.59
(3,84)	1:60:A:SER:N	1:58:A:ASP:OD1	11	0.59
(3,83)	1:60:A:SER:H	1:58:A:ASP:OD1	4	0.59
(3,2)	1:6:A:GLU:N	1:3:A:THR:O	1	0.59
(1,764)	1:70:A:VAL:H	1:66:A:LEU:C	5	0.59
(1,641)	1:60:A:SER:H	1:50:A:LEU:CD1	3	0.59
(1,632)	1:58:A:ASP:N	1:58:A:ASP:OD1	2	0.59
(1,631)	1:58:A:ASP:H	1:58:A:ASP:OD1	1	0.59
(1,630)	1:58:A:ASP:H	1:56:A:ASP:CG	2	0.59
(1,614)	1:56:A:ASP:H	1:65:A:GLU:CD	3	0.59
(1,608)	1:56:A:ASP:H	1:55:A:SER:CB	9	0.59

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,568)	1:51:A:VAL:H	1:51:A:VAL:CG2	8	0.59
(1,550)	1:50:A:LEU:H	1:49:A:LEU:CD2	5	0.59
(1,456)	1:40:A:GLU:H	1:41:A:THR:CG2	11	0.59
(1,348)	1:29:A:LEU:H	1:28:A:PHE:CB	1	0.59
(1,344)	1:28:A:PHE:H	1:24:A:ILE:C	12	0.59
(1,297)	1:24:A:ILE:H	1:24:A:ILE:CG1	12	0.59
(3,84)	1:60:A:SER:N	1:58:A:ASP:OD1	10	0.58
(3,83)	1:60:A:SER:H	1:58:A:ASP:OD1	10	0.58
(3,39)	1:28:A:PHE:H	1:24:A:ILE:O	4	0.58
(1,792)	1:73:A:ALA:H	1:72:A:LYS:CB	10	0.58
(1,424)	1:37:A:ILE:H	1:37:A:ILE:CD1	3	0.58
(1,397)	1:35:A:ALA:H	1:38:A:SER:CB	6	0.58
(1,383)	1:34:A:SER:H	1:33:A:LEU:CD1	7	0.58
(1,383)	1:34:A:SER:H	1:33:A:LEU:CD1	8	0.58
(1,297)	1:24:A:ILE:H	1:24:A:ILE:CG1	10	0.58
(1,267)	1:21:A:LYS:H	1:21:A:LYS:CE	10	0.58
(1,238)	1:18:A:GLN:H	1:15:A:ASP:C	7	0.58
(1,4)	1:-17:A:SER:H	1:-16:A:SER:CB	8	0.58
(3,78)	1:58:A:ASP:N	1:54:A:ASP:OD1	5	0.57
(3,77)	1:58:A:ASP:H	1:54:A:ASP:OD1	10	0.57
(3,39)	1:28:A:PHE:H	1:24:A:ILE:O	2	0.57
(3,30)	1:19:A:ASP:N	1:17:A:ASP:OD1	9	0.57
(1,663)	1:62:A:THR:H	1:21:A:LYS:CG	3	0.57
(1,615)	1:57:A:GLN:H	1:54:A:ASP:CB	6	0.57
(1,516)	1:45:A:SER:H	1:49:A:LEU:CB	3	0.57
(1,484)	1:43:A:THR:H	1:38:A:SER:CB	12	0.57
(1,393)	1:35:A:ALA:H	1:34:A:SER:CB	2	0.57
(1,337)	1:28:A:PHE:H	1:24:A:ILE:CA	11	0.57
(1,334)	1:27:A:LEU:H	1:27:A:LEU:CD1	10	0.57
(1,317)	1:26:A:GLU:H	1:24:A:ILE:CG2	10	0.57
(1,4)	1:-17:A:SER:H	1:-16:A:SER:CB	6	0.57
(3,97)	1:68:A:LYS:H	1:64:A:GLU:O	5	0.56
(3,80)	1:58:A:ASP:N	1:56:A:ASP:OD1	2	0.56
(3,61)	1:48:A:GLU:H	1:45:A:SER:OG	10	0.56
(3,47)	1:36:A:VAL:H	1:32:A:GLY:O	11	0.56
(3,33)	1:22:A:ILE:H	1:61:A:ILE:O	10	0.56
(1,781)	1:72:A:LYS:H	1:71:A:LYS:CG	7	0.56
(1,674)	1:63:A:PHE:H	1:21:A:LYS:CB	2	0.56
(1,631)	1:58:A:ASP:H	1:58:A:ASP:OD1	4	0.56
(1,613)	1:56:A:ASP:H	1:65:A:GLU:CG	1	0.56
(1,605)	1:56:A:ASP:H	1:54:A:ASP:CA	12	0.56
(1,487)	1:43:A:THR:H	1:41:A:THR:CB	6	0.56

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,352)	1:30:A:SER:H	1:26:A:GLU:CA	1	0.56
(1,241)	1:19:A:ASP:H	1:17:A:ASP:CA	9	0.56
(1,215)	1:16:A:ARG:H	1:17:A:ASP:CB	3	0.56
(1,93)	1:3:A:THR:H	1:6:A:GLU:CG	3	0.56
(1,66)	1:-2:A:GLY:H	1:-3:A:ARG:CB	5	0.56
(1,34)	1:-10:A:HIS:H	1:-10:A:HIS:CB	2	0.56
(3,99)	1:69:A:ALA:H	1:65:A:GLU:O	9	0.55
(3,91)	1:65:A:GLU:H	1:62:A:THR:OG1	9	0.55
(3,41)	1:29:A:LEU:H	1:25:A:ASN:O	7	0.55
(3,30)	1:19:A:ASP:N	1:17:A:ASP:OD1	2	0.55
(3,29)	1:19:A:ASP:H	1:17:A:ASP:OD1	1	0.55
(3,28)	1:19:A:ASP:N	1:15:A:ASP:OD1	8	0.55
(1,707)	1:65:A:GLU:H	1:66:A:LEU:CB	5	0.55
(1,682)	1:63:A:PHE:H	1:66:A:LEU:CB	1	0.55
(1,660)	1:61:A:ILE:H	1:61:A:ILE:CG2	3	0.55
(1,631)	1:58:A:ASP:H	1:58:A:ASP:OD1	12	0.55
(1,606)	1:56:A:ASP:H	1:54:A:ASP:CB	10	0.55
(1,502)	1:44:A:ASN:H	1:45:A:SER:CB	9	0.55
(1,496)	1:43:A:THR:H	1:38:A:SER:C	11	0.55
(1,494)	1:43:A:THR:H	1:49:A:LEU:CD1	6	0.55
(1,455)	1:40:A:GLU:H	1:40:A:GLU:CG	12	0.55
(1,397)	1:35:A:ALA:H	1:38:A:SER:CB	4	0.55
(1,382)	1:34:A:SER:H	1:33:A:LEU:CG	9	0.55
(1,325)	1:26:A:GLU:H	1:28:A:PHE:CB	12	0.55
(1,324)	1:26:A:GLU:H	1:27:A:LEU:CG	10	0.55
(3,83)	1:60:A:SER:H	1:58:A:ASP:OD1	11	0.54
(3,39)	1:28:A:PHE:H	1:24:A:ILE:O	11	0.54
(3,1)	1:6:A:GLU:H	1:3:A:THR:O	3	0.54
(1,724)	1:67:A:LYS:H	1:66:A:LEU:CG	9	0.54
(1,723)	1:67:A:LYS:H	1:66:A:LEU:CB	8	0.54
(1,700)	1:65:A:GLU:H	1:63:A:PHE:CB	1	0.54
(1,675)	1:63:A:PHE:H	1:21:A:LYS:CG	8	0.54
(1,675)	1:63:A:PHE:H	1:21:A:LYS:CG	11	0.54
(1,424)	1:37:A:ILE:H	1:37:A:ILE:CD1	7	0.54
(1,413)	1:37:A:ILE:H	1:34:A:SER:CA	9	0.54
(1,411)	1:37:A:ILE:H	1:14:A:LEU:CD1	5	0.54
(1,283)	1:22:A:ILE:H	1:62:A:THR:CA	10	0.54
(1,7)	1:-16:A:SER:H	1:-17:A:SER:CB	1	0.54
(1,7)	1:-16:A:SER:H	1:-17:A:SER:CB	7	0.54
(3,80)	1:58:A:ASP:N	1:56:A:ASP:OD1	1	0.53
(3,55)	1:40:A:GLU:H	1:36:A:VAL:O	12	0.53
(3,52)	1:38:A:SER:N	1:34:A:SER:O	9	0.53

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,29)	1:19:A:ASP:H	1:17:A:ASP:OD1	4	0.53
(3,27)	1:19:A:ASP:H	1:15:A:ASP:OD1	8	0.53
(3,26)	1:18:A:GLN:N	1:15:A:ASP:OD1	8	0.53
(1,726)	1:67:A:LYS:H	1:66:A:LEU:CD2	5	0.53
(1,682)	1:63:A:PHE:H	1:66:A:LEU:CB	8	0.53
(1,640)	1:60:A:SER:H	1:23:A:SER:CA	6	0.53
(1,568)	1:51:A:VAL:H	1:51:A:VAL:CG2	5	0.53
(1,550)	1:50:A:LEU:H	1:49:A:LEU:CD2	9	0.53
(1,485)	1:43:A:THR:H	1:39:A:SER:CA	5	0.53
(1,391)	1:35:A:ALA:H	1:33:A:LEU:CA	1	0.53
(1,363)	1:30:A:SER:H	1:31:A:PRO:CD	2	0.53
(1,363)	1:30:A:SER:H	1:31:A:PRO:CD	4	0.53
(1,357)	1:30:A:SER:H	1:29:A:LEU:CB	12	0.53
(1,334)	1:27:A:LEU:H	1:27:A:LEU:CD1	4	0.53
(1,317)	1:26:A:GLU:H	1:24:A:ILE:CG2	3	0.53
(1,183)	1:13:A:THR:H	1:11:A:PHE:CA	8	0.53
(1,116)	1:6:A:GLU:H	1:5:A:GLN:CG	3	0.53
(1,67)	1:-2:A:GLY:H	1:-3:A:ARG:CG	5	0.53
(1,27)	1:-11:A:HIS:H	1:-12:A:HIS:CB	5	0.53
(1,726)	1:67:A:LYS:H	1:66:A:LEU:CD2	8	0.52
(1,707)	1:65:A:GLU:H	1:66:A:LEU:CB	1	0.52
(1,693)	1:64:A:GLU:H	1:65:A:GLU:CG	12	0.52
(1,669)	1:62:A:THR:H	1:62:A:THR:CG2	12	0.52
(1,660)	1:61:A:ILE:H	1:61:A:ILE:CG2	6	0.52
(1,649)	1:60:A:SER:H	1:58:A:ASP:CG	7	0.52
(1,628)	1:58:A:ASP:H	1:59:A:GLY:CA	5	0.52
(1,485)	1:43:A:THR:H	1:39:A:SER:CA	7	0.52
(1,352)	1:30:A:SER:H	1:26:A:GLU:CA	3	0.52
(1,325)	1:26:A:GLU:H	1:28:A:PHE:CB	6	0.52
(1,309)	1:25:A:ASN:H	1:24:A:ILE:CD1	3	0.52
(1,221)	1:17:A:ASP:H	1:16:A:ARG:CB	1	0.52
(1,106)	1:5:A:GLN:H	1:4:A:GLU:CG	8	0.52
(1,63)	1:-3:A:ARG:H	1:-3:A:ARG:CG	9	0.52
(3,99)	1:69:A:ALA:H	1:65:A:GLU:O	8	0.51
(3,92)	1:65:A:GLU:N	1:62:A:THR:OG1	9	0.51
(3,26)	1:18:A:GLN:N	1:15:A:ASP:OD1	7	0.51
(1,644)	1:60:A:SER:H	1:58:A:ASP:CB	4	0.51
(1,561)	1:51:A:VAL:H	1:50:A:LEU:CB	3	0.51
(1,496)	1:43:A:THR:H	1:38:A:SER:C	3	0.51
(1,494)	1:43:A:THR:H	1:49:A:LEU:CD1	1	0.51
(1,488)	1:43:A:THR:H	1:41:A:THR:CG2	6	0.51
(1,457)	1:40:A:GLU:H	1:36:A:VAL:C	12	0.51

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,449)	1:40:A:GLU:H	1:36:A:VAL:CG1	10	0.51
(1,391)	1:35:A:ALA:H	1:33:A:LEU:CA	7	0.51
(1,353)	1:30:A:SER:H	1:27:A:LEU:CA	4	0.51
(1,334)	1:27:A:LEU:H	1:27:A:LEU:CD1	1	0.51
(1,325)	1:26:A:GLU:H	1:28:A:PHE:CB	11	0.51
(1,299)	1:24:A:ILE:H	1:24:A:ILE:CD1	3	0.51
(1,110)	1:5:A:GLN:H	1:6:A:GLU:CG	9	0.51
(3,102)	1:70:A:VAL:N	1:66:A:LEU:O	5	0.5
(3,84)	1:60:A:SER:N	1:58:A:ASP:OD1	2	0.5
(3,64)	1:50:A:LEU:N	1:46:A:PRO:O	6	0.5
(3,53)	1:39:A:SER:H	1:35:A:ALA:O	10	0.5
(3,51)	1:38:A:SER:H	1:34:A:SER:O	7	0.5
(1,707)	1:65:A:GLU:H	1:66:A:LEU:CB	9	0.5
(1,522)	1:47:A:GLN:H	1:46:A:PRO:CD	5	0.5
(1,504)	1:44:A:ASN:H	1:48:A:GLU:CG	8	0.5
(1,483)	1:43:A:THR:H	1:38:A:SER:CA	3	0.5
(1,429)	1:38:A:SER:H	1:35:A:ALA:CA	7	0.5
(1,389)	1:35:A:ALA:H	1:31:A:PRO:CA	5	0.5
(1,357)	1:30:A:SER:H	1:29:A:LEU:CB	3	0.5
(1,348)	1:29:A:LEU:H	1:28:A:PHE:CB	11	0.5
(1,317)	1:26:A:GLU:H	1:24:A:ILE:CG2	2	0.5
(1,242)	1:19:A:ASP:H	1:17:A:ASP:CB	11	0.5
(1,34)	1:-10:A:HIS:H	1:-10:A:HIS:CB	7	0.5
(1,32)	1:-10:A:HIS:H	1:-11:A:HIS:CB	2	0.5
(1,27)	1:-11:A:HIS:H	1:-12:A:HIS:CB	4	0.5
(3,77)	1:58:A:ASP:H	1:54:A:ASP:OD1	5	0.49
(3,57)	1:41:A:THR:H	1:37:A:ILE:O	2	0.49
(3,19)	1:15:A:ASP:H	1:11:A:PHE:O	3	0.49
(1,756)	1:70:A:VAL:H	1:68:A:LYS:CB	7	0.49
(1,674)	1:63:A:PHE:H	1:21:A:LYS:CB	6	0.49
(1,672)	1:62:A:THR:H	1:65:A:GLU:CD	3	0.49
(1,666)	1:62:A:THR:H	1:61:A:ILE:CG2	3	0.49
(1,632)	1:58:A:ASP:N	1:58:A:ASP:OD1	11	0.49
(1,495)	1:43:A:THR:H	1:49:A:LEU:CD2	5	0.49
(1,484)	1:43:A:THR:H	1:38:A:SER:CB	6	0.49
(1,412)	1:37:A:ILE:H	1:33:A:LEU:CA	11	0.49
(1,411)	1:37:A:ILE:H	1:14:A:LEU:CD1	6	0.49
(1,410)	1:37:A:ILE:H	1:10:A:LEU:CD2	5	0.49
(1,397)	1:35:A:ALA:H	1:38:A:SER:CB	3	0.49
(1,389)	1:35:A:ALA:H	1:31:A:PRO:CA	4	0.49
(1,377)	1:34:A:SER:H	1:30:A:SER:CB	12	0.49
(1,354)	1:30:A:SER:H	1:28:A:PHE:CA	10	0.49

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,317)	1:26:A:GLU:H	1:24:A:ILE:CG2	9	0.49
(1,302)	1:24:A:ILE:H	1:60:A:SER:CB	4	0.49
(1,240)	1:19:A:ASP:H	1:15:A:ASP:CB	8	0.49
(1,27)	1:-11:A:HIS:H	1:-12:A:HIS:CB	9	0.49
(3,98)	1:68:A:LYS:N	1:64:A:GLU:O	5	0.48
(3,63)	1:50:A:LEU:H	1:46:A:PRO:O	6	0.48
(3,56)	1:40:A:GLU:N	1:36:A:VAL:O	12	0.48
(3,48)	1:36:A:VAL:N	1:32:A:GLY:O	2	0.48
(1,749)	1:69:A:ALA:H	1:68:A:LYS:CG	12	0.48
(1,682)	1:63:A:PHE:H	1:66:A:LEU:CB	7	0.48
(1,669)	1:62:A:THR:H	1:62:A:THR:CG2	2	0.48
(1,662)	1:61:A:ILE:H	1:22:A:ILE:C	10	0.48
(1,631)	1:58:A:ASP:H	1:58:A:ASP:OD1	6	0.48
(1,621)	1:58:A:ASP:H	1:54:A:ASP:CB	12	0.48
(1,617)	1:57:A:GLN:H	1:56:A:ASP:CB	11	0.48
(1,602)	1:55:A:SER:H	1:55:A:SER:CB	6	0.48
(1,598)	1:54:A:ASP:H	1:50:A:LEU:C	1	0.48
(1,535)	1:48:A:GLU:H	1:49:A:LEU:CB	2	0.48
(1,496)	1:43:A:THR:H	1:38:A:SER:C	4	0.48
(1,411)	1:37:A:ILE:H	1:14:A:LEU:CD1	12	0.48
(1,327)	1:27:A:LEU:H	1:24:A:ILE:CA	5	0.48
(1,297)	1:24:A:ILE:H	1:24:A:ILE:CG1	3	0.48
(1,222)	1:17:A:ASP:H	1:16:A:ARG:CG	10	0.48
(1,215)	1:16:A:ARG:H	1:17:A:ASP:CB	2	0.48
(1,143)	1:8:A:GLN:H	1:9:A:SER:CB	5	0.48
(1,86)	1:2:A:ALA:H	1:70:A:VAL:CG1	1	0.48
(3,87)	1:62:A:THR:H	1:65:A:GLU:OE1	11	0.47
(3,85)	1:61:A:ILE:H	1:22:A:ILE:O	6	0.47
(3,55)	1:40:A:GLU:H	1:36:A:VAL:O	6	0.47
(3,53)	1:39:A:SER:H	1:35:A:ALA:O	5	0.47
(1,805)	1:75:A:ASN:H	1:71:A:LYS:CA	11	0.47
(1,754)	1:70:A:VAL:H	1:66:A:LEU:CD1	6	0.47
(1,748)	1:69:A:ALA:H	1:68:A:LYS:CB	12	0.47
(1,729)	1:67:A:LYS:H	1:67:A:LYS:CG	1	0.47
(1,662)	1:61:A:ILE:H	1:22:A:ILE:C	12	0.47
(1,614)	1:56:A:ASP:H	1:65:A:GLU:CD	6	0.47
(1,496)	1:43:A:THR:H	1:38:A:SER:C	2	0.47
(1,483)	1:43:A:THR:H	1:38:A:SER:CA	4	0.47
(1,430)	1:38:A:SER:H	1:35:A:ALA:CB	7	0.47
(1,399)	1:36:A:VAL:H	1:32:A:GLY:CA	11	0.47
(1,393)	1:35:A:ALA:H	1:34:A:SER:CB	5	0.47
(1,352)	1:30:A:SER:H	1:26:A:GLU:CA	12	0.47

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,337)	1:28:A:PHE:H	1:24:A:ILE:CA	3	0.47
(1,301)	1:24:A:ILE:H	1:60:A:SER:CA	5	0.47
(1,102)	1:5:A:GLN:H	1:3:A:THR:CB	4	0.47
(1,102)	1:5:A:GLN:H	1:3:A:THR:CB	5	0.47
(1,4)	1:-17:A:SER:H	1:-16:A:SER:CB	11	0.47
(3,52)	1:38:A:SER:N	1:34:A:SER:O	7	0.46
(3,48)	1:36:A:VAL:N	1:32:A:GLY:O	1	0.46
(3,39)	1:28:A:PHE:H	1:24:A:ILE:O	3	0.46
(3,5)	1:8:A:GLN:H	1:4:A:GLU:O	12	0.46
(3,2)	1:6:A:GLU:N	1:3:A:THR:O	4	0.46
(3,1)	1:6:A:GLU:H	1:3:A:THR:O	8	0.46
(1,729)	1:67:A:LYS:H	1:67:A:LYS:CG	10	0.46
(1,691)	1:64:A:GLU:H	1:64:A:GLU:CG	10	0.46
(1,644)	1:60:A:SER:H	1:58:A:ASP:CB	9	0.46
(1,632)	1:58:A:ASP:N	1:58:A:ASP:OD1	1	0.46
(1,620)	1:57:A:GLN:H	1:54:A:ASP:C	11	0.46
(1,608)	1:56:A:ASP:H	1:55:A:SER:CB	8	0.46
(1,603)	1:55:A:SER:H	1:65:A:GLU:CB	8	0.46
(1,603)	1:55:A:SER:H	1:65:A:GLU:CB	9	0.46
(1,587)	1:53:A:TYR:H	1:52:A:GLN:CG	2	0.46
(1,584)	1:53:A:TYR:H	1:50:A:LEU:CD1	2	0.46
(1,515)	1:45:A:SER:H	1:48:A:GLU:CG	7	0.46
(1,515)	1:45:A:SER:H	1:48:A:GLU:CG	8	0.46
(1,504)	1:44:A:ASN:H	1:48:A:GLU:CG	4	0.46
(1,449)	1:40:A:GLU:H	1:36:A:VAL:CG1	12	0.46
(1,410)	1:37:A:ILE:H	1:10:A:LEU:CD2	6	0.46
(1,409)	1:37:A:ILE:H	1:10:A:LEU:CD1	2	0.46
(1,354)	1:30:A:SER:H	1:28:A:PHE:CA	5	0.46
(1,315)	1:26:A:GLU:H	1:23:A:SER:CB	5	0.46
(1,248)	1:19:A:ASP:H	1:20:A:GLY:CA	9	0.46
(1,186)	1:13:A:THR:H	1:12:A:ASN:CB	8	0.46
(1,112)	1:6:A:GLU:H	1:3:A:THR:CB	3	0.46
(3,71)	1:54:A:ASP:H	1:50:A:LEU:O	9	0.45
(3,64)	1:50:A:LEU:N	1:46:A:PRO:O	12	0.45
(3,60)	1:43:A:THR:N	1:38:A:SER:O	3	0.45
(3,56)	1:40:A:GLU:N	1:36:A:VAL:O	3	0.45
(3,56)	1:40:A:GLU:N	1:36:A:VAL:O	6	0.45
(1,730)	1:67:A:LYS:H	1:67:A:LYS:CD	1	0.45
(1,675)	1:63:A:PHE:H	1:21:A:LYS:CG	10	0.45
(1,669)	1:62:A:THR:H	1:62:A:THR:CG2	9	0.45
(1,644)	1:60:A:SER:H	1:58:A:ASP:CB	7	0.45
(1,639)	1:59:A:GLY:H	1:54:A:ASP:CG	5	0.45

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,629)	1:58:A:ASP:H	1:54:A:ASP:CG	12	0.45
(1,608)	1:56:A:ASP:H	1:55:A:SER:CB	2	0.45
(1,587)	1:53:A:TYR:H	1:52:A:GLN:CG	3	0.45
(1,587)	1:53:A:TYR:H	1:52:A:GLN:CG	4	0.45
(1,576)	1:52:A:GLN:H	1:51:A:VAL:CG1	12	0.45
(1,488)	1:43:A:THR:H	1:41:A:THR:CG2	7	0.45
(1,487)	1:43:A:THR:H	1:41:A:THR:CB	7	0.45
(1,486)	1:43:A:THR:H	1:41:A:THR:CA	11	0.45
(1,357)	1:30:A:SER:H	1:29:A:LEU:CB	5	0.45
(1,355)	1:30:A:SER:H	1:28:A:PHE:CB	4	0.45
(1,344)	1:28:A:PHE:H	1:24:A:ILE:C	2	0.45
(1,315)	1:26:A:GLU:H	1:23:A:SER:CB	10	0.45
(1,116)	1:6:A:GLU:H	1:5:A:GLN:CG	4	0.45
(3,73)	1:56:A:ASP:H	1:65:A:GLU:OE2	6	0.44
(3,67)	1:52:A:GLN:H	1:48:A:GLU:O	5	0.44
(3,64)	1:50:A:LEU:N	1:46:A:PRO:O	9	0.44
(3,59)	1:43:A:THR:H	1:38:A:SER:O	3	0.44
(3,55)	1:40:A:GLU:H	1:36:A:VAL:O	3	0.44
(3,40)	1:28:A:PHE:N	1:24:A:ILE:O	3	0.44
(1,734)	1:68:A:LYS:H	1:65:A:GLU:CA	12	0.44
(1,726)	1:67:A:LYS:H	1:66:A:LEU:CD2	4	0.44
(1,654)	1:61:A:ILE:H	1:23:A:SER:CA	11	0.44
(1,644)	1:60:A:SER:H	1:58:A:ASP:CB	10	0.44
(1,612)	1:56:A:ASP:H	1:57:A:GLN:CB	1	0.44
(1,536)	1:49:A:LEU:H	1:43:A:THR:CB	1	0.44
(1,487)	1:43:A:THR:H	1:41:A:THR:CB	9	0.44
(1,441)	1:39:A:SER:H	1:36:A:VAL:CA	9	0.44
(1,411)	1:37:A:ILE:H	1:14:A:LEU:CD1	8	0.44
(1,409)	1:37:A:ILE:H	1:10:A:LEU:CD1	7	0.44
(1,397)	1:35:A:ALA:H	1:38:A:SER:CB	9	0.44
(1,389)	1:35:A:ALA:H	1:31:A:PRO:CA	12	0.44
(1,348)	1:29:A:LEU:H	1:28:A:PHE:CB	2	0.44
(1,278)	1:22:A:ILE:H	1:60:A:SER:CA	10	0.44
(1,277)	1:22:A:ILE:H	1:22:A:ILE:CD1	12	0.44
(1,222)	1:17:A:ASP:H	1:16:A:ARG:CG	1	0.44
(1,116)	1:6:A:GLU:H	1:5:A:GLN:CG	12	0.44
(1,106)	1:5:A:GLN:H	1:4:A:GLU:CG	5	0.44
(1,81)	1:2:A:ALA:H	1:1:A:MET:CB	1	0.44
(1,4)	1:-17:A:SER:H	1:-16:A:SER:CB	9	0.44
(3,86)	1:61:A:ILE:N	1:22:A:ILE:O	6	0.43
(3,85)	1:61:A:ILE:H	1:22:A:ILE:O	10	0.43
(3,85)	1:61:A:ILE:H	1:22:A:ILE:O	12	0.43

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,80)	1:58:A:ASP:N	1:56:A:ASP:OD1	4	0.43
(3,74)	1:56:A:ASP:N	1:65:A:GLU:OE2	6	0.43
(3,41)	1:29:A:LEU:H	1:25:A:ASN:O	12	0.43
(3,30)	1:19:A:ASP:N	1:17:A:ASP:OD1	1	0.43
(3,25)	1:18:A:GLN:H	1:15:A:ASP:OD1	7	0.43
(3,20)	1:15:A:ASP:N	1:11:A:PHE:O	3	0.43
(3,14)	1:12:A:ASN:N	1:8:A:GLN:O	3	0.43
(1,752)	1:69:A:ALA:H	1:65:A:GLU:C	9	0.43
(1,736)	1:68:A:LYS:H	1:67:A:LYS:CB	6	0.43
(1,698)	1:65:A:GLU:H	1:62:A:THR:CG2	1	0.43
(1,654)	1:61:A:ILE:H	1:23:A:SER:CA	4	0.43
(1,577)	1:52:A:GLN:H	1:51:A:VAL:CG2	8	0.43
(1,504)	1:44:A:ASN:H	1:48:A:GLU:CG	3	0.43
(1,459)	1:41:A:THR:H	1:37:A:ILE:CG2	6	0.43
(1,457)	1:40:A:GLU:H	1:36:A:VAL:C	6	0.43
(1,443)	1:39:A:SER:H	1:38:A:SER:CB	10	0.43
(1,396)	1:35:A:ALA:H	1:36:A:VAL:CG2	1	0.43
(1,355)	1:30:A:SER:H	1:28:A:PHE:CB	2	0.43
(1,352)	1:30:A:SER:H	1:26:A:GLU:CA	2	0.43
(1,305)	1:25:A:ASN:H	1:23:A:SER:CB	2	0.43
(1,305)	1:25:A:ASN:H	1:23:A:SER:CB	10	0.43
(1,299)	1:24:A:ILE:H	1:24:A:ILE:CD1	11	0.43
(1,240)	1:19:A:ASP:H	1:15:A:ASP:CB	12	0.43
(1,219)	1:17:A:ASP:H	1:15:A:ASP:CB	1	0.43
(1,182)	1:13:A:THR:H	1:10:A:LEU:CD2	7	0.43
(1,112)	1:6:A:GLU:H	1:3:A:THR:CB	6	0.43
(1,106)	1:5:A:GLN:H	1:4:A:GLU:CG	9	0.43
(1,63)	1:-3:A:ARG:H	1:-3:A:ARG:CG	4	0.43
(1,57)	1:-5:A:VAL:H	1:-5:A:VAL:CG2	9	0.43
(1,27)	1:-11:A:HIS:H	1:-12:A:HIS:CB	10	0.43
(3,86)	1:61:A:ILE:N	1:22:A:ILE:O	10	0.42
(3,50)	1:37:A:ILE:N	1:33:A:LEU:O	12	0.42
(3,47)	1:36:A:VAL:H	1:32:A:GLY:O	2	0.42
(3,37)	1:27:A:LEU:H	1:23:A:SER:O	3	0.42
(3,30)	1:19:A:ASP:N	1:17:A:ASP:OD1	4	0.42
(1,815)	1:76:A:LEU:H	1:76:A:LEU:CB	9	0.42
(1,793)	1:73:A:ALA:H	1:72:A:LYS:CG	3	0.42
(1,793)	1:73:A:ALA:H	1:72:A:LYS:CG	4	0.42
(1,698)	1:65:A:GLU:H	1:62:A:THR:CG2	9	0.42
(1,695)	1:65:A:GLU:H	1:61:A:ILE:CG2	10	0.42
(1,695)	1:65:A:GLU:H	1:61:A:ILE:CG2	12	0.42
(1,662)	1:61:A:ILE:H	1:22:A:ILE:C	11	0.42

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,649)	1:60:A:SER:H	1:58:A:ASP:CG	9	0.42
(1,634)	1:59:A:GLY:H	1:50:A:LEU:CD2	10	0.42
(1,633)	1:58:A:ASP:H	1:58:A:ASP:CG	4	0.42
(1,488)	1:43:A:THR:H	1:41:A:THR:CG2	9	0.42
(1,448)	1:40:A:GLU:H	1:36:A:VAL:CA	2	0.42
(1,434)	1:38:A:SER:H	1:37:A:ILE:CG2	7	0.42
(1,400)	1:36:A:VAL:H	1:33:A:LEU:CA	1	0.42
(1,390)	1:35:A:ALA:H	1:32:A:GLY:CA	7	0.42
(1,389)	1:35:A:ALA:H	1:31:A:PRO:CA	6	0.42
(1,291)	1:23:A:SER:H	1:26:A:GLU:CB	12	0.42
(1,281)	1:22:A:ILE:H	1:61:A:ILE:CG1	6	0.42
(1,272)	1:22:A:ILE:H	1:21:A:LYS:CD	6	0.42
(1,265)	1:21:A:LYS:H	1:21:A:LYS:CG	11	0.42
(1,250)	1:19:A:ASP:H	1:17:A:ASP:CG	4	0.42
(1,218)	1:17:A:ASP:H	1:15:A:ASP:CA	7	0.42
(1,116)	1:6:A:GLU:H	1:5:A:GLN:CG	9	0.42
(1,29)	1:-11:A:HIS:H	1:-11:A:HIS:CB	11	0.42
(3,96)	1:67:A:LYS:N	1:63:A:PHE:O	10	0.41
(3,87)	1:62:A:THR:H	1:65:A:GLU:OE1	6	0.41
(3,86)	1:61:A:ILE:N	1:22:A:ILE:O	12	0.41
(3,47)	1:36:A:VAL:H	1:32:A:GLY:O	1	0.41
(1,734)	1:68:A:LYS:H	1:65:A:GLU:CA	5	0.41
(1,724)	1:67:A:LYS:H	1:66:A:LEU:CG	1	0.41
(1,707)	1:65:A:GLU:H	1:66:A:LEU:CB	3	0.41
(1,703)	1:65:A:GLU:H	1:64:A:GLU:CG	3	0.41
(1,669)	1:62:A:THR:H	1:62:A:THR:CG2	4	0.41
(1,654)	1:61:A:ILE:H	1:23:A:SER:CA	7	0.41
(1,654)	1:61:A:ILE:H	1:23:A:SER:CA	8	0.41
(1,598)	1:54:A:ASP:H	1:50:A:LEU:C	8	0.41
(1,506)	1:45:A:SER:H	1:43:A:THR:CB	3	0.41
(1,505)	1:45:A:SER:H	1:43:A:THR:CA	2	0.41
(1,502)	1:44:A:ASN:H	1:45:A:SER:CB	7	0.41
(1,483)	1:43:A:THR:H	1:38:A:SER:CA	2	0.41
(1,463)	1:41:A:THR:H	1:39:A:SER:CB	9	0.41
(1,457)	1:40:A:GLU:H	1:36:A:VAL:C	3	0.41
(1,448)	1:40:A:GLU:H	1:36:A:VAL:CA	3	0.41
(1,390)	1:35:A:ALA:H	1:32:A:GLY:CA	2	0.41
(1,383)	1:34:A:SER:H	1:33:A:LEU:CD1	1	0.41
(1,378)	1:34:A:SER:H	1:31:A:PRO:CA	12	0.41
(1,371)	1:33:A:LEU:H	1:30:A:SER:CB	1	0.41
(1,354)	1:30:A:SER:H	1:28:A:PHE:CA	8	0.41
(1,351)	1:29:A:LEU:H	1:25:A:ASN:C	7	0.41

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,344)	1:28:A:PHE:H	1:24:A:ILE:C	11	0.41
(1,336)	1:27:A:LEU:H	1:23:A:SER:C	5	0.41
(1,325)	1:26:A:GLU:H	1:28:A:PHE:CB	3	0.41
(1,324)	1:26:A:GLU:H	1:27:A:LEU:CG	2	0.41
(1,249)	1:19:A:ASP:H	1:15:A:ASP:CG	11	0.41
(1,232)	1:18:A:GLN:H	1:16:A:ARG:CA	6	0.41
(1,223)	1:17:A:ASP:H	1:16:A:ARG:CD	11	0.41
(1,174)	1:12:A:ASN:H	1:9:A:SER:CA	7	0.41
(1,101)	1:5:A:GLN:H	1:3:A:THR:CA	9	0.41
(1,23)	1:-12:A:HIS:H	1:-13:A:HIS:CB	5	0.41
(1,9)	1:-16:A:SER:H	1:-16:A:SER:CB	12	0.41
(3,98)	1:68:A:LYS:N	1:64:A:GLU:O	12	0.4
(3,84)	1:60:A:SER:N	1:58:A:ASP:OD1	9	0.4
(3,84)	1:60:A:SER:N	1:58:A:ASP:OD1	12	0.4
(3,77)	1:58:A:ASP:H	1:54:A:ASP:OD1	11	0.4
(3,59)	1:43:A:THR:H	1:38:A:SER:O	4	0.4
(3,55)	1:40:A:GLU:H	1:36:A:VAL:O	11	0.4
(3,40)	1:28:A:PHE:N	1:24:A:ILE:O	11	0.4
(3,2)	1:6:A:GLU:N	1:3:A:THR:O	3	0.4
(3,1)	1:6:A:GLU:H	1:3:A:THR:O	10	0.4
(1,749)	1:69:A:ALA:H	1:68:A:LYS:CG	7	0.4
(1,726)	1:67:A:LYS:H	1:66:A:LEU:CD2	1	0.4
(1,700)	1:65:A:GLU:H	1:63:A:PHE:CB	3	0.4
(1,692)	1:64:A:GLU:H	1:65:A:GLU:CB	12	0.4
(1,678)	1:63:A:PHE:H	1:62:A:THR:CG2	3	0.4
(1,672)	1:62:A:THR:H	1:65:A:GLU:CD	5	0.4
(1,615)	1:57:A:GLN:H	1:54:A:ASP:CB	4	0.4
(1,608)	1:56:A:ASP:H	1:55:A:SER:CB	1	0.4
(1,606)	1:56:A:ASP:H	1:54:A:ASP:CB	12	0.4
(1,602)	1:55:A:SER:H	1:55:A:SER:CB	1	0.4
(1,564)	1:51:A:VAL:H	1:50:A:LEU:CD2	1	0.4
(1,553)	1:50:A:LEU:H	1:51:A:VAL:CG2	12	0.4
(1,528)	1:48:A:GLU:H	1:45:A:SER:CB	10	0.4
(1,522)	1:47:A:GLN:H	1:46:A:PRO:CD	12	0.4
(1,515)	1:45:A:SER:H	1:48:A:GLU:CG	12	0.4
(1,435)	1:38:A:SER:H	1:37:A:ILE:CD1	10	0.4
(1,434)	1:38:A:SER:H	1:37:A:ILE:CG2	8	0.4
(1,407)	1:36:A:VAL:H	1:37:A:ILE:CG1	1	0.4
(1,391)	1:35:A:ALA:H	1:33:A:LEU:CA	2	0.4
(1,381)	1:34:A:SER:H	1:33:A:LEU:CB	8	0.4
(1,375)	1:33:A:LEU:H	1:33:A:LEU:CD2	9	0.4
(1,370)	1:33:A:LEU:H	1:30:A:SER:CA	3	0.4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,336)	1:27:A:LEU:H	1:23:A:SER:C	3	0.4
(1,271)	1:22:A:ILE:H	1:21:A:LYS:CG	5	0.4
(1,268)	1:21:A:LYS:H	1:62:A:THR:CA	4	0.4
(1,228)	1:17:A:ASP:H	1:18:A:GLN:CG	1	0.4
(1,221)	1:17:A:ASP:H	1:16:A:ARG:CB	11	0.4
(1,186)	1:13:A:THR:H	1:12:A:ASN:CB	1	0.4
(1,174)	1:12:A:ASN:H	1:9:A:SER:CA	3	0.4
(1,109)	1:5:A:GLN:H	1:5:A:GLN:CG	8	0.4
(1,106)	1:5:A:GLN:H	1:4:A:GLU:CG	7	0.4
(1,100)	1:4:A:GLU:H	1:5:A:GLN:CB	8	0.4
(1,32)	1:-10:A:HIS:H	1:-11:A:HIS:CB	7	0.4
(3,102)	1:70:A:VAL:N	1:66:A:LEU:O	3	0.39
(3,80)	1:58:A:ASP:N	1:56:A:ASP:OD1	7	0.39
(3,68)	1:52:A:GLN:N	1:48:A:GLU:O	5	0.39
(3,54)	1:39:A:SER:N	1:35:A:ALA:O	5	0.39
(3,29)	1:19:A:ASP:H	1:17:A:ASP:OD1	5	0.39
(3,6)	1:8:A:GLN:N	1:4:A:GLU:O	12	0.39
(1,729)	1:67:A:LYS:H	1:67:A:LYS:CG	6	0.39
(1,703)	1:65:A:GLU:H	1:64:A:GLU:CG	12	0.39
(1,700)	1:65:A:GLU:H	1:63:A:PHE:CB	5	0.39
(1,697)	1:65:A:GLU:H	1:62:A:THR:CB	8	0.39
(1,675)	1:63:A:PHE:H	1:21:A:LYS:CG	7	0.39
(1,673)	1:63:A:PHE:H	1:21:A:LYS:CA	6	0.39
(1,671)	1:62:A:THR:H	1:65:A:GLU:CG	5	0.39
(1,656)	1:61:A:ILE:H	1:60:A:SER:CB	5	0.39
(1,643)	1:60:A:SER:H	1:58:A:ASP:CA	9	0.39
(1,632)	1:58:A:ASP:N	1:58:A:ASP:OD1	10	0.39
(1,622)	1:58:A:ASP:H	1:56:A:ASP:CB	2	0.39
(1,622)	1:58:A:ASP:H	1:56:A:ASP:CB	11	0.39
(1,614)	1:56:A:ASP:H	1:65:A:GLU:CD	8	0.39
(1,611)	1:56:A:ASP:H	1:57:A:GLN:CA	10	0.39
(1,517)	1:47:A:GLN:H	1:45:A:SER:CA	8	0.39
(1,513)	1:45:A:SER:H	1:48:A:GLU:CA	12	0.39
(1,507)	1:45:A:SER:H	1:43:A:THR:CG2	3	0.39
(1,502)	1:44:A:ASN:H	1:45:A:SER:CB	10	0.39
(1,496)	1:43:A:THR:H	1:38:A:SER:C	12	0.39
(1,448)	1:40:A:GLU:H	1:36:A:VAL:CA	11	0.39
(1,426)	1:37:A:ILE:H	1:38:A:SER:CB	11	0.39
(1,377)	1:34:A:SER:H	1:30:A:SER:CB	6	0.39
(1,361)	1:30:A:SER:H	1:30:A:SER:CB	5	0.39
(1,357)	1:30:A:SER:H	1:29:A:LEU:CB	6	0.39
(1,357)	1:30:A:SER:H	1:29:A:LEU:CB	7	0.39

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,304)	1:25:A:ASN:H	1:23:A:SER:CA	10	0.39
(1,301)	1:24:A:ILE:H	1:60:A:SER:CA	6	0.39
(1,215)	1:16:A:ARG:H	1:17:A:ASP:CB	1	0.39
(1,180)	1:13:A:THR:H	1:9:A:SER:CA	7	0.39
(1,161)	1:10:A:LEU:H	1:11:A:PHE:CB	9	0.39
(1,160)	1:10:A:LEU:H	1:10:A:LEU:CD2	9	0.39
(1,84)	1:2:A:ALA:H	1:40:A:GLU:CB	8	0.39
(1,34)	1:-10:A:HIS:H	1:-10:A:HIS:CB	3	0.39
(1,34)	1:-10:A:HIS:H	1:-10:A:HIS:CB	10	0.39
(3,101)	1:70:A:VAL:H	1:66:A:LEU:O	3	0.38
(3,94)	1:66:A:LEU:N	1:62:A:THR:O	4	0.38
(3,91)	1:65:A:GLU:H	1:62:A:THR:OG1	4	0.38
(3,85)	1:61:A:ILE:H	1:22:A:ILE:O	4	0.38
(3,85)	1:61:A:ILE:H	1:22:A:ILE:O	11	0.38
(3,84)	1:60:A:SER:N	1:58:A:ASP:OD1	7	0.38
(3,83)	1:60:A:SER:H	1:58:A:ASP:OD1	7	0.38
(3,72)	1:54:A:ASP:N	1:50:A:LEU:O	12	0.38
(3,63)	1:50:A:LEU:H	1:46:A:PRO:O	9	0.38
(3,63)	1:50:A:LEU:H	1:46:A:PRO:O	12	0.38
(3,62)	1:48:A:GLU:N	1:45:A:SER:OG	6	0.38
(3,48)	1:36:A:VAL:N	1:32:A:GLY:O	11	0.38
(3,42)	1:29:A:LEU:N	1:25:A:ASN:O	7	0.38
(3,41)	1:29:A:LEU:H	1:25:A:ASN:O	11	0.38
(3,39)	1:28:A:PHE:H	1:24:A:ILE:O	5	0.38
(1,794)	1:73:A:ALA:H	1:72:A:LYS:CD	3	0.38
(1,781)	1:72:A:LYS:H	1:71:A:LYS:CG	8	0.38
(1,721)	1:67:A:LYS:H	1:64:A:GLU:CA	11	0.38
(1,700)	1:65:A:GLU:H	1:63:A:PHE:CB	12	0.38
(1,632)	1:58:A:ASP:N	1:58:A:ASP:OD1	4	0.38
(1,632)	1:58:A:ASP:N	1:58:A:ASP:OD1	12	0.38
(1,577)	1:52:A:GLN:H	1:51:A:VAL:CG2	6	0.38
(1,554)	1:50:A:LEU:H	1:46:A:PRO:C	9	0.38
(1,545)	1:50:A:LEU:H	1:46:A:PRO:CA	12	0.38
(1,528)	1:48:A:GLU:H	1:45:A:SER:CB	4	0.38
(1,520)	1:47:A:GLN:H	1:46:A:PRO:CB	1	0.38
(1,507)	1:45:A:SER:H	1:43:A:THR:CG2	1	0.38
(1,379)	1:34:A:SER:H	1:32:A:GLY:CA	6	0.38
(1,377)	1:34:A:SER:H	1:30:A:SER:CB	7	0.38
(1,370)	1:33:A:LEU:H	1:30:A:SER:CA	8	0.38
(1,362)	1:30:A:SER:H	1:31:A:PRO:CG	12	0.38
(1,348)	1:29:A:LEU:H	1:28:A:PHE:CB	5	0.38
(1,317)	1:26:A:GLU:H	1:24:A:ILE:CG2	1	0.38

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,312)	1:25:A:ASN:H	1:26:A:GLU:CG	2	0.38
(1,272)	1:22:A:ILE:H	1:21:A:LYS:CD	11	0.38
(1,268)	1:21:A:LYS:H	1:62:A:THR:CA	3	0.38
(1,266)	1:21:A:LYS:H	1:21:A:LYS:CD	10	0.38
(1,238)	1:18:A:GLN:H	1:15:A:ASP:C	4	0.38
(1,201)	1:14:A:LEU:H	1:15:A:ASP:CB	8	0.38
(1,186)	1:13:A:THR:H	1:12:A:ASN:CB	5	0.38
(1,121)	1:6:A:GLU:H	1:3:A:THR:C	1	0.38
(1,95)	1:4:A:GLU:H	1:3:A:THR:CB	4	0.38
(1,64)	1:-3:A:ARG:H	1:-3:A:ARG:CD	9	0.38
(3,100)	1:69:A:ALA:N	1:65:A:GLU:O	7	0.37
(3,88)	1:62:A:THR:N	1:65:A:GLU:OE1	6	0.37
(3,86)	1:61:A:ILE:N	1:22:A:ILE:O	4	0.37
(3,81)	1:59:A:GLY:H	1:54:A:ASP:OD2	8	0.37
(3,71)	1:54:A:ASP:H	1:50:A:LEU:O	3	0.37
(3,57)	1:41:A:THR:H	1:37:A:ILE:O	6	0.37
(3,49)	1:37:A:ILE:H	1:33:A:LEU:O	12	0.37
(3,39)	1:28:A:PHE:H	1:24:A:ILE:O	7	0.37
(3,9)	1:10:A:LEU:H	1:6:A:GLU:O	11	0.37
(1,794)	1:73:A:ALA:H	1:72:A:LYS:CD	4	0.37
(1,787)	1:72:A:LYS:H	1:73:A:ALA:CB	12	0.37
(1,782)	1:72:A:LYS:H	1:71:A:LYS:CD	7	0.37
(1,724)	1:67:A:LYS:H	1:66:A:LEU:CG	8	0.37
(1,723)	1:67:A:LYS:H	1:66:A:LEU:CB	4	0.37
(1,692)	1:64:A:GLU:H	1:65:A:GLU:CB	9	0.37
(1,683)	1:63:A:PHE:H	1:20:A:GLY:C	5	0.37
(1,649)	1:60:A:SER:H	1:58:A:ASP:CG	11	0.37
(1,517)	1:47:A:GLN:H	1:45:A:SER:CA	12	0.37
(1,507)	1:45:A:SER:H	1:43:A:THR:CG2	8	0.37
(1,486)	1:43:A:THR:H	1:41:A:THR:CA	6	0.37
(1,486)	1:43:A:THR:H	1:41:A:THR:CA	12	0.37
(1,427)	1:37:A:ILE:H	1:33:A:LEU:C	12	0.37
(1,426)	1:37:A:ILE:H	1:38:A:SER:CB	6	0.37
(1,413)	1:37:A:ILE:H	1:34:A:SER:CA	5	0.37
(1,408)	1:36:A:VAL:H	1:32:A:GLY:C	11	0.37
(1,387)	1:34:A:SER:H	1:35:A:ALA:CB	8	0.37
(1,383)	1:34:A:SER:H	1:33:A:LEU:CD1	11	0.37
(1,305)	1:25:A:ASN:H	1:23:A:SER:CB	4	0.37
(1,271)	1:22:A:ILE:H	1:21:A:LYS:CG	6	0.37
(1,229)	1:17:A:ASP:H	1:26:A:GLU:CG	10	0.37
(1,215)	1:16:A:ARG:H	1:17:A:ASP:CB	4	0.37
(1,215)	1:16:A:ARG:H	1:17:A:ASP:CB	9	0.37

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,174)	1:12:A:ASN:H	1:9:A:SER:CA	6	0.37
(1,160)	1:10:A:LEU:H	1:10:A:LEU:CD2	5	0.37
(1,134)	1:8:A:GLN:H	1:5:A:GLN:CA	11	0.37
(1,100)	1:4:A:GLU:H	1:5:A:GLN:CB	9	0.37
(1,81)	1:2:A:ALA:H	1:1:A:MET:CB	3	0.37
(1,66)	1:-2:A:GLY:H	1:-3:A:ARG:CB	2	0.37
(1,53)	1:-5:A:VAL:H	1:-6:A:LEU:CD2	9	0.37
(1,19)	1:-13:A:HIS:H	1:-14:A:HIS:CB	4	0.37
(3,99)	1:69:A:ALA:H	1:65:A:GLU:O	7	0.36
(3,96)	1:67:A:LYS:N	1:63:A:PHE:O	5	0.36
(3,93)	1:66:A:LEU:H	1:62:A:THR:O	4	0.36
(3,92)	1:65:A:GLU:N	1:62:A:THR:OG1	1	0.36
(3,88)	1:62:A:THR:N	1:65:A:GLU:OE1	11	0.36
(3,85)	1:61:A:ILE:H	1:22:A:ILE:O	8	0.36
(3,72)	1:54:A:ASP:N	1:50:A:LEU:O	3	0.36
(3,65)	1:51:A:VAL:H	1:47:A:GLN:O	8	0.36
(3,59)	1:43:A:THR:H	1:38:A:SER:O	2	0.36
(3,56)	1:40:A:GLU:N	1:36:A:VAL:O	11	0.36
(3,1)	1:6:A:GLU:H	1:3:A:THR:O	12	0.36
(1,815)	1:76:A:LEU:H	1:76:A:LEU:CB	7	0.36
(1,780)	1:72:A:LYS:H	1:71:A:LYS:CB	9	0.36
(1,763)	1:70:A:VAL:H	1:71:A:LYS:CB	12	0.36
(1,752)	1:69:A:ALA:H	1:65:A:GLU:C	3	0.36
(1,749)	1:69:A:ALA:H	1:68:A:LYS:CG	5	0.36
(1,748)	1:69:A:ALA:H	1:68:A:LYS:CB	3	0.36
(1,738)	1:68:A:LYS:H	1:67:A:LYS:CD	6	0.36
(1,703)	1:65:A:GLU:H	1:64:A:GLU:CG	11	0.36
(1,642)	1:60:A:SER:H	1:50:A:LEU:CD2	7	0.36
(1,608)	1:56:A:ASP:H	1:55:A:SER:CB	3	0.36
(1,554)	1:50:A:LEU:H	1:46:A:PRO:C	12	0.36
(1,553)	1:50:A:LEU:H	1:51:A:VAL:CG2	7	0.36
(1,553)	1:50:A:LEU:H	1:51:A:VAL:CG2	8	0.36
(1,518)	1:47:A:GLN:H	1:45:A:SER:CB	8	0.36
(1,496)	1:43:A:THR:H	1:38:A:SER:C	1	0.36
(1,485)	1:43:A:THR:H	1:39:A:SER:CA	2	0.36
(1,457)	1:40:A:GLU:H	1:36:A:VAL:C	11	0.36
(1,450)	1:40:A:GLU:H	1:37:A:ILE:CA	9	0.36
(1,450)	1:40:A:GLU:H	1:37:A:ILE:CA	10	0.36
(1,424)	1:37:A:ILE:H	1:37:A:ILE:CD1	5	0.36
(1,400)	1:36:A:VAL:H	1:33:A:LEU:CA	8	0.36
(1,384)	1:34:A:SER:H	1:33:A:LEU:CD2	9	0.36
(1,382)	1:34:A:SER:H	1:33:A:LEU:CG	7	0.36

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,308)	1:25:A:ASN:H	1:24:A:ILE:CG1	3	0.36
(1,304)	1:25:A:ASN:H	1:23:A:SER:CA	2	0.36
(1,232)	1:18:A:GLN:H	1:16:A:ARG:CA	3	0.36
(1,215)	1:16:A:ARG:H	1:17:A:ASP:CB	10	0.36
(1,180)	1:13:A:THR:H	1:9:A:SER:CA	12	0.36
(1,161)	1:10:A:LEU:H	1:11:A:PHE:CB	12	0.36
(1,115)	1:6:A:GLU:H	1:5:A:GLN:CB	5	0.36
(1,111)	1:6:A:GLU:H	1:2:A:ALA:CB	12	0.36
(3,95)	1:67:A:LYS:H	1:63:A:PHE:O	10	0.35
(3,86)	1:61:A:ILE:N	1:22:A:ILE:O	8	0.35
(3,71)	1:54:A:ASP:H	1:50:A:LEU:O	12	0.35
(3,60)	1:43:A:THR:N	1:38:A:SER:O	4	0.35
(3,58)	1:41:A:THR:N	1:37:A:ILE:O	6	0.35
(3,40)	1:28:A:PHE:N	1:24:A:ILE:O	5	0.35
(3,31)	1:20:A:GLY:H	1:15:A:ASP:OD2	5	0.35
(3,29)	1:19:A:ASP:H	1:17:A:ASP:OD1	10	0.35
(1,755)	1:70:A:VAL:H	1:67:A:LYS:CA	7	0.35
(1,736)	1:68:A:LYS:H	1:67:A:LYS:CB	1	0.35
(1,703)	1:65:A:GLU:H	1:64:A:GLU:CG	1	0.35
(1,703)	1:65:A:GLU:H	1:64:A:GLU:CG	9	0.35
(1,700)	1:65:A:GLU:H	1:63:A:PHE:CB	6	0.35
(1,699)	1:65:A:GLU:H	1:63:A:PHE:CA	1	0.35
(1,678)	1:63:A:PHE:H	1:62:A:THR:CG2	4	0.35
(1,669)	1:62:A:THR:H	1:62:A:THR:CG2	6	0.35
(1,669)	1:62:A:THR:H	1:62:A:THR:CG2	11	0.35
(1,615)	1:57:A:GLN:H	1:54:A:ASP:CB	3	0.35
(1,608)	1:56:A:ASP:H	1:55:A:SER:CB	4	0.35
(1,587)	1:53:A:TYR:H	1:52:A:GLN:CG	6	0.35
(1,573)	1:52:A:GLN:H	1:49:A:LEU:CA	7	0.35
(1,494)	1:43:A:THR:H	1:49:A:LEU:CD1	8	0.35
(1,487)	1:43:A:THR:H	1:41:A:THR:CB	11	0.35
(1,486)	1:43:A:THR:H	1:41:A:THR:CA	9	0.35
(1,478)	1:42:A:ASN:H	1:40:A:GLU:CA	5	0.35
(1,435)	1:38:A:SER:H	1:37:A:ILE:CD1	4	0.35
(1,408)	1:36:A:VAL:H	1:32:A:GLY:C	2	0.35
(1,399)	1:36:A:VAL:H	1:32:A:GLY:CA	12	0.35
(1,390)	1:35:A:ALA:H	1:32:A:GLY:CA	1	0.35
(1,377)	1:34:A:SER:H	1:30:A:SER:CB	11	0.35
(1,361)	1:30:A:SER:H	1:30:A:SER:CB	11	0.35
(1,351)	1:29:A:LEU:H	1:25:A:ASN:C	1	0.35
(1,337)	1:28:A:PHE:H	1:24:A:ILE:CA	7	0.35
(1,308)	1:25:A:ASN:H	1:24:A:ILE:CG1	12	0.35

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,302)	1:24:A:ILE:H	1:60:A:SER:CB	10	0.35
(1,265)	1:21:A:LYS:H	1:21:A:LYS:CG	10	0.35
(1,242)	1:19:A:ASP:H	1:17:A:ASP:CB	4	0.35
(1,232)	1:18:A:GLN:H	1:16:A:ARG:CA	4	0.35
(1,231)	1:18:A:GLN:H	1:15:A:ASP:CB	8	0.35
(1,222)	1:17:A:ASP:H	1:16:A:ARG:CG	11	0.35
(1,188)	1:13:A:THR:H	1:13:A:THR:CB	8	0.35
(1,183)	1:13:A:THR:H	1:11:A:PHE:CA	6	0.35
(1,174)	1:12:A:ASN:H	1:9:A:SER:CA	2	0.35
(1,138)	1:8:A:GLN:H	1:7:A:LEU:CD1	6	0.35
(3,95)	1:67:A:LYS:H	1:63:A:PHE:O	5	0.34
(3,87)	1:62:A:THR:H	1:65:A:GLU:OE1	5	0.34
(3,87)	1:62:A:THR:H	1:65:A:GLU:OE1	9	0.34
(3,86)	1:61:A:ILE:N	1:22:A:ILE:O	11	0.34
(3,83)	1:60:A:SER:H	1:58:A:ASP:OD1	9	0.34
(3,79)	1:58:A:ASP:H	1:56:A:ASP:OD1	7	0.34
(3,73)	1:56:A:ASP:H	1:65:A:GLU:OE2	8	0.34
(3,47)	1:36:A:VAL:H	1:32:A:GLY:O	3	0.34
(3,30)	1:19:A:ASP:N	1:17:A:ASP:OD1	5	0.34
(3,25)	1:18:A:GLN:H	1:15:A:ASP:OD1	8	0.34
(1,762)	1:70:A:VAL:H	1:70:A:VAL:CG2	2	0.34
(1,753)	1:70:A:VAL:H	1:66:A:LEU:CA	3	0.34
(1,752)	1:69:A:ALA:H	1:65:A:GLU:C	7	0.34
(1,744)	1:68:A:LYS:H	1:64:A:GLU:C	12	0.34
(1,738)	1:68:A:LYS:H	1:67:A:LYS:CD	9	0.34
(1,723)	1:67:A:LYS:H	1:66:A:LEU:CB	1	0.34
(1,721)	1:67:A:LYS:H	1:64:A:GLU:CA	10	0.34
(1,719)	1:66:A:LEU:H	1:62:A:THR:C	4	0.34
(1,683)	1:63:A:PHE:H	1:20:A:GLY:C	6	0.34
(1,612)	1:56:A:ASP:H	1:57:A:GLN:CB	5	0.34
(1,509)	1:45:A:SER:H	1:44:A:ASN:CB	11	0.34
(1,484)	1:43:A:THR:H	1:38:A:SER:CB	3	0.34
(1,447)	1:39:A:SER:H	1:35:A:ALA:C	10	0.34
(1,440)	1:39:A:SER:H	1:35:A:ALA:CA	10	0.34
(1,411)	1:37:A:ILE:H	1:14:A:LEU:CD1	9	0.34
(1,396)	1:35:A:ALA:H	1:36:A:VAL:CG2	10	0.34
(1,371)	1:33:A:LEU:H	1:30:A:SER:CB	7	0.34
(1,354)	1:30:A:SER:H	1:28:A:PHE:CA	9	0.34
(1,354)	1:30:A:SER:H	1:28:A:PHE:CA	11	0.34
(1,328)	1:27:A:LEU:H	1:25:A:ASN:CA	8	0.34
(1,323)	1:26:A:GLU:H	1:27:A:LEU:CB	11	0.34
(1,305)	1:25:A:ASN:H	1:23:A:SER:CB	5	0.34

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,299)	1:24:A:ILE:H	1:24:A:ILE:CD1	6	0.34
(1,284)	1:22:A:ILE:H	1:61:A:ILE:C	11	0.34
(1,271)	1:22:A:ILE:H	1:21:A:LYS:CG	8	0.34
(1,268)	1:21:A:LYS:H	1:62:A:THR:CA	1	0.34
(1,232)	1:18:A:GLN:H	1:16:A:ARG:CA	12	0.34
(1,215)	1:16:A:ARG:H	1:17:A:ASP:CB	5	0.34
(1,184)	1:13:A:THR:H	1:11:A:PHE:CB	8	0.34
(1,182)	1:13:A:THR:H	1:10:A:LEU:CD2	8	0.34
(1,102)	1:5:A:GLN:H	1:3:A:THR:CB	1	0.34
(1,34)	1:-10:A:HIS:H	1:-10:A:HIS:CB	5	0.34
(1,34)	1:-10:A:HIS:H	1:-10:A:HIS:CB	11	0.34
(3,97)	1:68:A:LYS:H	1:64:A:GLU:O	12	0.33
(3,78)	1:58:A:ASP:N	1:54:A:ASP:OD1	6	0.33
(3,59)	1:43:A:THR:H	1:38:A:SER:O	1	0.33
(3,46)	1:35:A:ALA:N	1:31:A:PRO:O	6	0.33
(3,45)	1:35:A:ALA:H	1:31:A:PRO:O	5	0.33
(3,45)	1:35:A:ALA:H	1:31:A:PRO:O	6	0.33
(3,45)	1:35:A:ALA:H	1:31:A:PRO:O	12	0.33
(3,41)	1:29:A:LEU:H	1:25:A:ASN:O	5	0.33
(3,28)	1:19:A:ASP:N	1:15:A:ASP:OD1	1	0.33
(3,10)	1:10:A:LEU:N	1:6:A:GLU:O	11	0.33
(3,2)	1:6:A:GLU:N	1:3:A:THR:O	2	0.33
(1,764)	1:70:A:VAL:H	1:66:A:LEU:C	3	0.33
(1,752)	1:69:A:ALA:H	1:65:A:GLU:C	8	0.33
(1,703)	1:65:A:GLU:H	1:64:A:GLU:CG	4	0.33
(1,697)	1:65:A:GLU:H	1:62:A:THR:CB	7	0.33
(1,682)	1:63:A:PHE:H	1:66:A:LEU:CB	6	0.33
(1,662)	1:61:A:ILE:H	1:22:A:ILE:C	8	0.33
(1,640)	1:60:A:SER:H	1:23:A:SER:CA	1	0.33
(1,633)	1:58:A:ASP:H	1:58:A:ASP:CG	11	0.33
(1,633)	1:58:A:ASP:H	1:58:A:ASP:CG	12	0.33
(1,615)	1:57:A:GLN:H	1:54:A:ASP:CB	11	0.33
(1,562)	1:51:A:VAL:H	1:50:A:LEU:CG	9	0.33
(1,558)	1:51:A:VAL:H	1:48:A:GLU:CG	10	0.33
(1,540)	1:49:A:LEU:H	1:48:A:GLU:CG	12	0.33
(1,518)	1:47:A:GLN:H	1:45:A:SER:CB	6	0.33
(1,505)	1:45:A:SER:H	1:43:A:THR:CA	6	0.33
(1,504)	1:44:A:ASN:H	1:48:A:GLU:CG	9	0.33
(1,487)	1:43:A:THR:H	1:41:A:THR:CB	12	0.33
(1,477)	1:42:A:ASN:H	1:39:A:SER:CA	10	0.33
(1,463)	1:41:A:THR:H	1:39:A:SER:CB	7	0.33
(1,456)	1:40:A:GLU:H	1:41:A:THR:CG2	3	0.33

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,452)	1:40:A:GLU:H	1:39:A:SER:CB	9	0.33
(1,450)	1:40:A:GLU:H	1:37:A:ILE:CA	3	0.33
(1,435)	1:38:A:SER:H	1:37:A:ILE:CD1	6	0.33
(1,398)	1:35:A:ALA:H	1:31:A:PRO:C	5	0.33
(1,397)	1:35:A:ALA:H	1:38:A:SER:CB	8	0.33
(1,353)	1:30:A:SER:H	1:27:A:LEU:CA	1	0.33
(1,345)	1:29:A:LEU:H	1:25:A:ASN:CA	1	0.33
(1,312)	1:25:A:ASN:H	1:26:A:GLU:CG	3	0.33
(1,251)	1:19:A:ASP:H	1:19:A:ASP:OD1	3	0.33
(1,248)	1:19:A:ASP:H	1:20:A:GLY:CA	6	0.33
(1,223)	1:17:A:ASP:H	1:16:A:ARG:CD	2	0.33
(1,189)	1:13:A:THR:H	1:13:A:THR:CG2	8	0.33
(1,181)	1:13:A:THR:H	1:10:A:LEU:CA	8	0.33
(1,179)	1:12:A:ASN:H	1:8:A:GLN:C	3	0.33
(1,166)	1:11:A:PHE:H	1:10:A:LEU:CG	7	0.33
(1,115)	1:6:A:GLU:H	1:5:A:GLN:CB	7	0.33
(1,106)	1:5:A:GLN:H	1:4:A:GLU:CG	10	0.33
(1,86)	1:2:A:ALA:H	1:70:A:VAL:CG1	4	0.33
(1,71)	1:-1:A:SER:H	1:-1:A:SER:CB	5	0.33
(1,29)	1:-11:A:HIS:H	1:-11:A:HIS:CB	6	0.33
(1,25)	1:-12:A:HIS:H	1:-12:A:HIS:CB	4	0.33
(3,61)	1:48:A:GLU:H	1:45:A:SER:OG	6	0.32
(3,37)	1:27:A:LEU:H	1:23:A:SER:O	4	0.32
(3,22)	1:17:A:ASP:N	1:26:A:GLU:OE2	8	0.32
(3,2)	1:6:A:GLU:N	1:3:A:THR:O	10	0.32
(3,1)	1:6:A:GLU:H	1:3:A:THR:O	2	0.32
(1,793)	1:73:A:ALA:H	1:72:A:LYS:CG	1	0.32
(1,781)	1:72:A:LYS:H	1:71:A:LYS:CG	11	0.32
(1,780)	1:72:A:LYS:H	1:71:A:LYS:CB	2	0.32
(1,763)	1:70:A:VAL:H	1:71:A:LYS:CB	5	0.32
(1,732)	1:67:A:LYS:H	1:63:A:PHE:C	10	0.32
(1,725)	1:67:A:LYS:H	1:66:A:LEU:CD1	12	0.32
(1,724)	1:67:A:LYS:H	1:66:A:LEU:CG	5	0.32
(1,707)	1:65:A:GLU:H	1:66:A:LEU:CB	6	0.32
(1,654)	1:61:A:ILE:H	1:23:A:SER:CA	3	0.32
(1,648)	1:60:A:SER:H	1:61:A:ILE:CG1	1	0.32
(1,630)	1:58:A:ASP:H	1:56:A:ASP:CG	11	0.32
(1,611)	1:56:A:ASP:H	1:57:A:GLN:CA	5	0.32
(1,605)	1:56:A:ASP:H	1:54:A:ASP:CA	2	0.32
(1,597)	1:54:A:ASP:H	1:57:A:GLN:CA	7	0.32
(1,558)	1:51:A:VAL:H	1:48:A:GLU:CG	11	0.32
(1,553)	1:50:A:LEU:H	1:51:A:VAL:CG2	4	0.32

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,546)	1:50:A:LEU:H	1:47:A:GLN:CA	4	0.32
(1,536)	1:49:A:LEU:H	1:43:A:THR:CB	12	0.32
(1,515)	1:45:A:SER:H	1:48:A:GLU:CG	4	0.32
(1,513)	1:45:A:SER:H	1:48:A:GLU:CA	3	0.32
(1,505)	1:45:A:SER:H	1:43:A:THR:CA	11	0.32
(1,484)	1:43:A:THR:H	1:38:A:SER:CB	2	0.32
(1,484)	1:43:A:THR:H	1:38:A:SER:CB	4	0.32
(1,484)	1:43:A:THR:H	1:38:A:SER:CB	9	0.32
(1,483)	1:43:A:THR:H	1:38:A:SER:CA	7	0.32
(1,476)	1:41:A:THR:H	1:37:A:ILE:C	2	0.32
(1,463)	1:41:A:THR:H	1:39:A:SER:CB	8	0.32
(1,457)	1:40:A:GLU:H	1:36:A:VAL:C	2	0.32
(1,456)	1:40:A:GLU:H	1:41:A:THR:CG2	6	0.32
(1,449)	1:40:A:GLU:H	1:36:A:VAL:CG1	6	0.32
(1,440)	1:39:A:SER:H	1:35:A:ALA:CA	5	0.32
(1,433)	1:38:A:SER:H	1:37:A:ILE:CG1	2	0.32
(1,430)	1:38:A:SER:H	1:35:A:ALA:CB	8	0.32
(1,413)	1:37:A:ILE:H	1:34:A:SER:CA	7	0.32
(1,344)	1:28:A:PHE:H	1:24:A:ILE:C	3	0.32
(1,337)	1:28:A:PHE:H	1:24:A:ILE:CA	2	0.32
(1,327)	1:27:A:LEU:H	1:24:A:ILE:CA	2	0.32
(1,313)	1:26:A:GLU:H	1:22:A:ILE:CA	3	0.32
(1,312)	1:25:A:ASN:H	1:26:A:GLU:CG	9	0.32
(1,304)	1:25:A:ASN:H	1:23:A:SER:CA	5	0.32
(1,270)	1:22:A:ILE:H	1:21:A:LYS:CB	5	0.32
(1,249)	1:19:A:ASP:H	1:15:A:ASP:CG	8	0.32
(1,212)	1:16:A:ARG:H	1:15:A:ASP:CB	4	0.32
(1,201)	1:14:A:LEU:H	1:15:A:ASP:CB	6	0.32
(1,192)	1:13:A:THR:H	1:9:A:SER:C	12	0.32
(1,186)	1:13:A:THR:H	1:12:A:ASN:CB	4	0.32
(1,180)	1:13:A:THR:H	1:9:A:SER:CA	11	0.32
(1,171)	1:11:A:PHE:H	1:7:A:LEU:C	2	0.32
(1,146)	1:9:A:SER:H	1:6:A:GLU:CA	5	0.32
(1,73)	1:0:A:HIS:H	1:-1:A:SER:CB	5	0.32
(1,53)	1:-5:A:VAL:H	1:-6:A:LEU:CD2	8	0.32
(3,107)	1:73:A:ALA:H	1:69:A:ALA:O	12	0.31
(3,93)	1:66:A:LEU:H	1:62:A:THR:O	9	0.31
(3,91)	1:65:A:GLU:H	1:62:A:THR:OG1	1	0.31
(3,89)	1:63:A:PHE:H	1:20:A:GLY:O	6	0.31
(3,72)	1:54:A:ASP:N	1:50:A:LEU:O	9	0.31
(3,65)	1:51:A:VAL:H	1:47:A:GLN:O	2	0.31
(3,64)	1:50:A:LEU:N	1:46:A:PRO:O	4	0.31

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,60)	1:43:A:THR:N	1:38:A:SER:O	2	0.31
(3,46)	1:35:A:ALA:N	1:31:A:PRO:O	12	0.31
(3,16)	1:13:A:THR:N	1:9:A:SER:O	12	0.31
(3,13)	1:12:A:ASN:H	1:8:A:GLN:O	3	0.31
(1,756)	1:70:A:VAL:H	1:68:A:LYS:CB	6	0.31
(1,753)	1:70:A:VAL:H	1:66:A:LEU:CA	1	0.31
(1,749)	1:69:A:ALA:H	1:68:A:LYS:CG	10	0.31
(1,738)	1:68:A:LYS:H	1:67:A:LYS:CD	7	0.31
(1,734)	1:68:A:LYS:H	1:65:A:GLU:CA	7	0.31
(1,730)	1:67:A:LYS:H	1:67:A:LYS:CD	10	0.31
(1,648)	1:60:A:SER:H	1:61:A:ILE:CG1	10	0.31
(1,632)	1:58:A:ASP:N	1:58:A:ASP:OD1	6	0.31
(1,622)	1:58:A:ASP:H	1:56:A:ASP:CB	9	0.31
(1,600)	1:55:A:SER:H	1:54:A:ASP:CB	12	0.31
(1,545)	1:50:A:LEU:H	1:46:A:PRO:CA	9	0.31
(1,531)	1:48:A:GLU:H	1:47:A:GLN:CG	2	0.31
(1,520)	1:47:A:GLN:H	1:46:A:PRO:CB	7	0.31
(1,514)	1:45:A:SER:H	1:48:A:GLU:CB	6	0.31
(1,504)	1:44:A:ASN:H	1:48:A:GLU:CG	2	0.31
(1,503)	1:44:A:ASN:H	1:48:A:GLU:CB	12	0.31
(1,496)	1:43:A:THR:H	1:38:A:SER:C	6	0.31
(1,488)	1:43:A:THR:H	1:41:A:THR:CG2	11	0.31
(1,478)	1:42:A:ASN:H	1:40:A:GLU:CA	7	0.31
(1,447)	1:39:A:SER:H	1:35:A:ALA:C	5	0.31
(1,426)	1:37:A:ILE:H	1:38:A:SER:CB	4	0.31
(1,411)	1:37:A:ILE:H	1:14:A:LEU:CD1	11	0.31
(1,393)	1:35:A:ALA:H	1:34:A:SER:CB	4	0.31
(1,354)	1:30:A:SER:H	1:28:A:PHE:CA	7	0.31
(1,346)	1:29:A:LEU:H	1:26:A:GLU:CA	12	0.31
(1,345)	1:29:A:LEU:H	1:25:A:ASN:CA	12	0.31
(1,344)	1:28:A:PHE:H	1:24:A:ILE:C	5	0.31
(1,335)	1:27:A:LEU:H	1:28:A:PHE:CB	4	0.31
(1,292)	1:23:A:SER:H	1:26:A:GLU:CG	7	0.31
(1,265)	1:21:A:LYS:H	1:21:A:LYS:CG	12	0.31
(1,255)	1:20:A:GLY:H	1:18:A:GLN:CA	6	0.31
(1,253)	1:19:A:ASP:H	1:19:A:ASP:CG	3	0.31
(1,229)	1:17:A:ASP:H	1:26:A:GLU:CG	8	0.31
(1,225)	1:17:A:ASP:H	1:17:A:ASP:CB	1	0.31
(1,144)	1:8:A:GLN:H	1:4:A:GLU:C	12	0.31
(1,139)	1:8:A:GLN:H	1:7:A:LEU:CD2	5	0.31
(1,134)	1:8:A:GLN:H	1:5:A:GLN:CA	4	0.31
(1,115)	1:6:A:GLU:H	1:5:A:GLN:CB	11	0.31

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,101)	1:5:A:GLN:H	1:3:A:THR:CA	7	0.31
(1,100)	1:4:A:GLU:H	1:5:A:GLN:CB	1	0.31
(1,100)	1:4:A:GLU:H	1:5:A:GLN:CB	4	0.31
(1,95)	1:4:A:GLU:H	1:3:A:THR:CB	2	0.31
(1,81)	1:2:A:ALA:H	1:1:A:MET:CB	8	0.31
(1,66)	1:-2:A:GLY:H	1:-3:A:ARG:CB	4	0.31
(1,25)	1:-12:A:HIS:H	1:-12:A:HIS:CB	6	0.31
(1,9)	1:-16:A:SER:H	1:-16:A:SER:CB	2	0.31
(4,1)	1:37:A:ILE:H	1:49:A:LEU:CD1	8	0.3
(3,60)	1:43:A:THR:N	1:38:A:SER:O	1	0.3
(3,43)	1:34:A:SER:H	1:30:A:SER:O	12	0.3
(3,38)	1:27:A:LEU:N	1:23:A:SER:O	5	0.3
(3,27)	1:19:A:ASP:H	1:15:A:ASP:OD1	12	0.3
(3,21)	1:17:A:ASP:H	1:26:A:GLU:OE2	8	0.3
(3,9)	1:10:A:LEU:H	1:6:A:GLU:O	6	0.3
(1,764)	1:70:A:VAL:H	1:66:A:LEU:C	7	0.3
(1,716)	1:66:A:LEU:H	1:66:A:LEU:CD1	8	0.3
(1,698)	1:65:A:GLU:H	1:62:A:THR:CG2	2	0.3
(1,693)	1:64:A:GLU:H	1:65:A:GLU:CG	3	0.3
(1,654)	1:61:A:ILE:H	1:23:A:SER:CA	10	0.3
(1,614)	1:56:A:ASP:H	1:65:A:GLU:CD	9	0.3
(1,606)	1:56:A:ASP:H	1:54:A:ASP:CB	1	0.3
(1,605)	1:56:A:ASP:H	1:54:A:ASP:CA	4	0.3
(1,584)	1:53:A:TYR:H	1:50:A:LEU:CD1	5	0.3
(1,569)	1:51:A:VAL:H	1:52:A:GLN:CB	8	0.3
(1,548)	1:50:A:LEU:H	1:49:A:LEU:CB	3	0.3
(1,546)	1:50:A:LEU:H	1:47:A:GLN:CA	3	0.3
(1,546)	1:50:A:LEU:H	1:47:A:GLN:CA	11	0.3
(1,521)	1:47:A:GLN:H	1:46:A:PRO:CG	5	0.3
(1,514)	1:45:A:SER:H	1:48:A:GLU:CB	12	0.3
(1,504)	1:44:A:ASN:H	1:48:A:GLU:CG	11	0.3
(1,439)	1:38:A:SER:H	1:34:A:SER:C	7	0.3
(1,435)	1:38:A:SER:H	1:37:A:ILE:CD1	2	0.3
(1,433)	1:38:A:SER:H	1:37:A:ILE:CG1	6	0.3
(1,427)	1:37:A:ILE:H	1:33:A:LEU:C	4	0.3
(1,425)	1:37:A:ILE:H	1:38:A:SER:CA	11	0.3
(1,412)	1:37:A:ILE:H	1:33:A:LEU:CA	12	0.3
(1,400)	1:36:A:VAL:H	1:33:A:LEU:CA	2	0.3
(1,397)	1:35:A:ALA:H	1:38:A:SER:CB	11	0.3
(1,397)	1:35:A:ALA:H	1:38:A:SER:CB	12	0.3
(1,396)	1:35:A:ALA:H	1:36:A:VAL:CG2	8	0.3
(1,338)	1:28:A:PHE:H	1:25:A:ASN:CA	2	0.3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,322)	1:26:A:GLU:H	1:26:A:GLU:CG	4	0.3
(1,316)	1:26:A:GLU:H	1:24:A:ILE:CA	8	0.3
(1,291)	1:23:A:SER:H	1:26:A:GLU:CB	7	0.3
(1,284)	1:22:A:ILE:H	1:61:A:ILE:C	6	0.3
(1,267)	1:21:A:LYS:H	1:21:A:LYS:CE	12	0.3
(1,248)	1:19:A:ASP:H	1:20:A:GLY:CA	2	0.3
(1,248)	1:19:A:ASP:H	1:20:A:GLY:CA	3	0.3
(1,242)	1:19:A:ASP:H	1:17:A:ASP:CB	2	0.3
(1,210)	1:15:A:ASP:H	1:11:A:PHE:C	3	0.3
(1,148)	1:9:A:SER:H	1:8:A:GLN:CB	5	0.3
(1,145)	1:9:A:SER:H	1:5:A:GLN:CA	12	0.3
(1,109)	1:5:A:GLN:H	1:5:A:GLN:CG	7	0.3
(1,52)	1:-5:A:VAL:H	1:-6:A:LEU:CG	12	0.3
(1,44)	1:-7:A:GLY:H	1:-8:A:SER:CB	1	0.3
(1,44)	1:-7:A:GLY:H	1:-8:A:SER:CB	8	0.3
(1,19)	1:-13:A:HIS:H	1:-14:A:HIS:CB	2	0.3
(3,102)	1:70:A:VAL:N	1:66:A:LEU:O	8	0.29
(3,100)	1:69:A:ALA:N	1:65:A:GLU:O	3	0.29
(3,88)	1:62:A:THR:N	1:65:A:GLU:OE1	5	0.29
(3,84)	1:60:A:SER:N	1:58:A:ASP:OD1	1	0.29
(3,80)	1:58:A:ASP:N	1:56:A:ASP:OD1	8	0.29
(3,78)	1:58:A:ASP:N	1:54:A:ASP:OD1	11	0.29
(3,55)	1:40:A:GLU:H	1:36:A:VAL:O	2	0.29
(3,47)	1:36:A:VAL:H	1:32:A:GLY:O	12	0.29
(3,44)	1:34:A:SER:N	1:30:A:SER:O	12	0.29
(1,770)	1:71:A:LYS:H	1:70:A:VAL:CG1	10	0.29
(1,743)	1:68:A:LYS:H	1:69:A:ALA:CB	11	0.29
(1,736)	1:68:A:LYS:H	1:67:A:LYS:CB	3	0.29
(1,732)	1:67:A:LYS:H	1:63:A:PHE:C	5	0.29
(1,725)	1:67:A:LYS:H	1:66:A:LEU:CD1	1	0.29
(1,707)	1:65:A:GLU:H	1:66:A:LEU:CB	12	0.29
(1,688)	1:64:A:GLU:H	1:63:A:PHE:CB	1	0.29
(1,672)	1:62:A:THR:H	1:65:A:GLU:CD	6	0.29
(1,669)	1:62:A:THR:H	1:62:A:THR:CG2	10	0.29
(1,666)	1:62:A:THR:H	1:61:A:ILE:CG2	12	0.29
(1,659)	1:61:A:ILE:H	1:61:A:ILE:CG1	6	0.29
(1,563)	1:51:A:VAL:H	1:50:A:LEU:CD1	7	0.29
(1,562)	1:51:A:VAL:H	1:50:A:LEU:CG	2	0.29
(1,540)	1:49:A:LEU:H	1:48:A:GLU:CG	2	0.29
(1,536)	1:49:A:LEU:H	1:43:A:THR:CB	2	0.29
(1,536)	1:49:A:LEU:H	1:43:A:THR:CB	10	0.29
(1,502)	1:44:A:ASN:H	1:45:A:SER:CB	5	0.29

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,484)	1:43:A:THR:H	1:38:A:SER:CB	7	0.29
(1,473)	1:41:A:THR:H	1:49:A:LEU:CD2	11	0.29
(1,466)	1:41:A:THR:H	1:40:A:GLU:CG	3	0.29
(1,466)	1:41:A:THR:H	1:40:A:GLU:CG	12	0.29
(1,465)	1:41:A:THR:H	1:40:A:GLU:CB	2	0.29
(1,458)	1:41:A:THR:H	1:37:A:ILE:CA	12	0.29
(1,441)	1:39:A:SER:H	1:36:A:VAL:CA	8	0.29
(1,439)	1:38:A:SER:H	1:34:A:SER:C	9	0.29
(1,433)	1:38:A:SER:H	1:37:A:ILE:CG1	4	0.29
(1,429)	1:38:A:SER:H	1:35:A:ALA:CA	8	0.29
(1,415)	1:37:A:ILE:H	1:35:A:ALA:CB	9	0.29
(1,414)	1:37:A:ILE:H	1:35:A:ALA:CA	9	0.29
(1,412)	1:37:A:ILE:H	1:33:A:LEU:CA	4	0.29
(1,407)	1:36:A:VAL:H	1:37:A:ILE:CG1	6	0.29
(1,400)	1:36:A:VAL:H	1:33:A:LEU:CA	5	0.29
(1,398)	1:35:A:ALA:H	1:31:A:PRO:C	12	0.29
(1,393)	1:35:A:ALA:H	1:34:A:SER:CB	1	0.29
(1,383)	1:34:A:SER:H	1:33:A:LEU:CD1	12	0.29
(1,370)	1:33:A:LEU:H	1:30:A:SER:CA	11	0.29
(1,336)	1:27:A:LEU:H	1:23:A:SER:C	7	0.29
(1,323)	1:26:A:GLU:H	1:27:A:LEU:CB	4	0.29
(1,313)	1:26:A:GLU:H	1:22:A:ILE:CA	9	0.29
(1,277)	1:22:A:ILE:H	1:22:A:ILE:CD1	11	0.29
(1,272)	1:22:A:ILE:H	1:21:A:LYS:CD	5	0.29
(1,267)	1:21:A:LYS:H	1:21:A:LYS:CE	7	0.29
(1,249)	1:19:A:ASP:H	1:15:A:ASP:CG	12	0.29
(1,223)	1:17:A:ASP:H	1:16:A:ARG:CD	10	0.29
(1,195)	1:14:A:LEU:H	1:12:A:ASN:CB	8	0.29
(1,183)	1:13:A:THR:H	1:11:A:PHE:CA	5	0.29
(1,136)	1:8:A:GLN:H	1:7:A:LEU:CB	6	0.29
(1,116)	1:6:A:GLU:H	1:5:A:GLN:CG	6	0.29
(1,96)	1:4:A:GLU:H	1:3:A:THR:CG2	1	0.29
(1,60)	1:-3:A:ARG:H	1:-4:A:PRO:CB	4	0.29
(1,9)	1:-16:A:SER:H	1:-16:A:SER:CB	6	0.29
(3,94)	1:66:A:LEU:N	1:62:A:THR:O	10	0.28
(3,92)	1:65:A:GLU:N	1:62:A:THR:OG1	2	0.28
(3,89)	1:63:A:PHE:H	1:20:A:GLY:O	2	0.28
(3,88)	1:62:A:THR:N	1:65:A:GLU:OE1	9	0.28
(3,83)	1:60:A:SER:H	1:58:A:ASP:OD1	12	0.28
(3,81)	1:59:A:GLY:H	1:54:A:ASP:OD2	9	0.28
(3,77)	1:58:A:ASP:H	1:54:A:ASP:OD1	9	0.28
(3,75)	1:57:A:GLN:H	1:54:A:ASP:O	4	0.28

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,75)	1:57:A:GLN:H	1:54:A:ASP:O	9	0.28
(3,66)	1:51:A:VAL:N	1:47:A:GLN:O	11	0.28
(3,63)	1:50:A:LEU:H	1:46:A:PRO:O	2	0.28
(3,57)	1:41:A:THR:H	1:37:A:ILE:O	5	0.28
(3,51)	1:38:A:SER:H	1:34:A:SER:O	4	0.28
(3,38)	1:27:A:LEU:N	1:23:A:SER:O	4	0.28
(3,24)	1:18:A:GLN:N	1:15:A:ASP:O	10	0.28
(3,23)	1:18:A:GLN:H	1:15:A:ASP:O	10	0.28
(3,16)	1:13:A:THR:N	1:9:A:SER:O	7	0.28
(1,815)	1:76:A:LEU:H	1:76:A:LEU:CB	12	0.28
(1,781)	1:72:A:LYS:H	1:71:A:LYS:CG	5	0.28
(1,725)	1:67:A:LYS:H	1:66:A:LEU:CD1	9	0.28
(1,706)	1:65:A:GLU:H	1:65:A:GLU:CG	8	0.28
(1,632)	1:58:A:ASP:N	1:58:A:ASP:OD1	8	0.28
(1,631)	1:58:A:ASP:H	1:58:A:ASP:OD1	8	0.28
(1,630)	1:58:A:ASP:H	1:56:A:ASP:CG	9	0.28
(1,608)	1:56:A:ASP:H	1:55:A:SER:CB	11	0.28
(1,605)	1:56:A:ASP:H	1:54:A:ASP:CA	3	0.28
(1,586)	1:53:A:TYR:H	1:52:A:GLN:CB	3	0.28
(1,581)	1:52:A:GLN:H	1:48:A:GLU:C	5	0.28
(1,575)	1:52:A:GLN:H	1:51:A:VAL:CB	6	0.28
(1,568)	1:51:A:VAL:H	1:51:A:VAL:CG2	12	0.28
(1,555)	1:51:A:VAL:H	1:47:A:GLN:CA	2	0.28
(1,555)	1:51:A:VAL:H	1:47:A:GLN:CA	8	0.28
(1,514)	1:45:A:SER:H	1:48:A:GLU:CB	4	0.28
(1,504)	1:44:A:ASN:H	1:48:A:GLU:CG	1	0.28
(1,504)	1:44:A:ASN:H	1:48:A:GLU:CG	7	0.28
(1,485)	1:43:A:THR:H	1:39:A:SER:CA	6	0.28
(1,466)	1:41:A:THR:H	1:40:A:GLU:CG	4	0.28
(1,414)	1:37:A:ILE:H	1:35:A:ALA:CA	7	0.28
(1,398)	1:35:A:ALA:H	1:31:A:PRO:C	11	0.28
(1,391)	1:35:A:ALA:H	1:33:A:LEU:CA	10	0.28
(1,389)	1:35:A:ALA:H	1:31:A:PRO:CA	11	0.28
(1,317)	1:26:A:GLU:H	1:24:A:ILE:CG2	5	0.28
(1,312)	1:25:A:ASN:H	1:26:A:GLU:CG	12	0.28
(1,284)	1:22:A:ILE:H	1:61:A:ILE:C	12	0.28
(1,281)	1:22:A:ILE:H	1:61:A:ILE:CG1	3	0.28
(1,267)	1:21:A:LYS:H	1:21:A:LYS:CE	3	0.28
(1,253)	1:19:A:ASP:H	1:19:A:ASP:CG	2	0.28
(1,251)	1:19:A:ASP:H	1:19:A:ASP:OD1	2	0.28
(1,250)	1:19:A:ASP:H	1:17:A:ASP:CG	1	0.28
(1,212)	1:16:A:ARG:H	1:15:A:ASP:CB	12	0.28

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,197)	1:14:A:LEU:H	1:13:A:THR:CB	1	0.28
(1,197)	1:14:A:LEU:H	1:13:A:THR:CB	6	0.28
(1,182)	1:13:A:THR:H	1:10:A:LEU:CD2	9	0.28
(1,162)	1:10:A:LEU:H	1:6:A:GLU:C	11	0.28
(1,139)	1:8:A:GLN:H	1:7:A:LEU:CD2	11	0.28
(1,116)	1:6:A:GLU:H	1:5:A:GLN:CG	10	0.28
(1,112)	1:6:A:GLU:H	1:3:A:THR:CB	5	0.28
(1,84)	1:2:A:ALA:H	1:40:A:GLU:CB	10	0.28
(1,36)	1:-9:A:SER:H	1:-10:A:HIS:CB	2	0.28
(1,19)	1:-13:A:HIS:H	1:-14:A:HIS:CB	6	0.28
(1,16)	1:-14:A:HIS:H	1:-14:A:HIS:CB	8	0.28
(3,92)	1:65:A:GLU:N	1:62:A:THR:OG1	4	0.27
(3,81)	1:59:A:GLY:H	1:54:A:ASP:OD2	11	0.27
(3,67)	1:52:A:GLN:H	1:48:A:GLU:O	9	0.27
(3,64)	1:50:A:LEU:N	1:46:A:PRO:O	2	0.27
(3,37)	1:27:A:LEU:H	1:23:A:SER:O	5	0.27
(3,30)	1:19:A:ASP:N	1:17:A:ASP:OD1	10	0.27
(3,15)	1:13:A:THR:H	1:9:A:SER:O	12	0.27
(3,2)	1:6:A:GLU:N	1:3:A:THR:O	12	0.27
(1,766)	1:71:A:LYS:H	1:68:A:LYS:CA	9	0.27
(1,762)	1:70:A:VAL:H	1:70:A:VAL:CG2	12	0.27
(1,758)	1:70:A:VAL:H	1:69:A:ALA:CB	7	0.27
(1,756)	1:70:A:VAL:H	1:68:A:LYS:CB	10	0.27
(1,723)	1:67:A:LYS:H	1:66:A:LEU:CB	9	0.27
(1,718)	1:66:A:LEU:H	1:67:A:LYS:CB	4	0.27
(1,707)	1:65:A:GLU:H	1:66:A:LEU:CB	7	0.27
(1,662)	1:61:A:ILE:H	1:22:A:ILE:C	4	0.27
(1,648)	1:60:A:SER:H	1:61:A:ILE:CG1	11	0.27
(1,633)	1:58:A:ASP:H	1:58:A:ASP:CG	6	0.27
(1,631)	1:58:A:ASP:H	1:58:A:ASP:OD1	7	0.27
(1,621)	1:58:A:ASP:H	1:54:A:ASP:CB	11	0.27
(1,620)	1:57:A:GLN:H	1:54:A:ASP:C	3	0.27
(1,613)	1:56:A:ASP:H	1:65:A:GLU:CG	12	0.27
(1,605)	1:56:A:ASP:H	1:54:A:ASP:CA	1	0.27
(1,586)	1:53:A:TYR:H	1:52:A:GLN:CB	7	0.27
(1,564)	1:51:A:VAL:H	1:50:A:LEU:CD2	5	0.27
(1,564)	1:51:A:VAL:H	1:50:A:LEU:CD2	10	0.27
(1,562)	1:51:A:VAL:H	1:50:A:LEU:CG	3	0.27
(1,561)	1:51:A:VAL:H	1:50:A:LEU:CB	7	0.27
(1,531)	1:48:A:GLU:H	1:47:A:GLN:CG	4	0.27
(1,526)	1:47:A:GLN:H	1:48:A:GLU:CB	8	0.27
(1,518)	1:47:A:GLN:H	1:45:A:SER:CB	12	0.27

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,513)	1:45:A:SER:H	1:48:A:GLU:CA	9	0.27
(1,506)	1:45:A:SER:H	1:43:A:THR:CB	1	0.27
(1,463)	1:41:A:THR:H	1:39:A:SER:CB	6	0.27
(1,433)	1:38:A:SER:H	1:37:A:ILE:CG1	11	0.27
(1,426)	1:37:A:ILE:H	1:38:A:SER:CB	9	0.27
(1,408)	1:36:A:VAL:H	1:32:A:GLY:C	1	0.27
(1,399)	1:36:A:VAL:H	1:32:A:GLY:CA	3	0.27
(1,381)	1:34:A:SER:H	1:33:A:LEU:CB	7	0.27
(1,371)	1:33:A:LEU:H	1:30:A:SER:CB	2	0.27
(1,337)	1:28:A:PHE:H	1:24:A:ILE:CA	5	0.27
(1,315)	1:26:A:GLU:H	1:23:A:SER:CB	1	0.27
(1,313)	1:26:A:GLU:H	1:22:A:ILE:CA	2	0.27
(1,277)	1:22:A:ILE:H	1:22:A:ILE:CD1	1	0.27
(1,277)	1:22:A:ILE:H	1:22:A:ILE:CD1	9	0.27
(1,275)	1:22:A:ILE:H	1:22:A:ILE:CG1	11	0.27
(1,266)	1:21:A:LYS:H	1:21:A:LYS:CD	9	0.27
(1,252)	1:19:A:ASP:N	1:19:A:ASP:OD1	7	0.27
(1,238)	1:18:A:GLN:H	1:15:A:ASP:C	5	0.27
(1,218)	1:17:A:ASP:H	1:15:A:ASP:CA	4	0.27
(1,215)	1:16:A:ARG:H	1:17:A:ASP:CB	11	0.27
(1,212)	1:16:A:ARG:H	1:15:A:ASP:CB	11	0.27
(1,192)	1:13:A:THR:H	1:9:A:SER:C	7	0.27
(1,184)	1:13:A:THR:H	1:11:A:PHE:CB	4	0.27
(1,149)	1:9:A:SER:H	1:8:A:GLN:CG	3	0.27
(1,145)	1:9:A:SER:H	1:5:A:GLN:CA	6	0.27
(1,137)	1:8:A:GLN:H	1:7:A:LEU:CG	5	0.27
(1,111)	1:6:A:GLU:H	1:2:A:ALA:CB	10	0.27
(1,103)	1:5:A:GLN:H	1:3:A:THR:CG2	5	0.27
(1,95)	1:4:A:GLU:H	1:3:A:THR:CB	8	0.27
(3,101)	1:70:A:VAL:H	1:66:A:LEU:O	8	0.26
(3,94)	1:66:A:LEU:N	1:62:A:THR:O	9	0.26
(3,89)	1:63:A:PHE:H	1:20:A:GLY:O	5	0.26
(3,87)	1:62:A:THR:H	1:65:A:GLU:OE1	3	0.26
(3,85)	1:61:A:ILE:H	1:22:A:ILE:O	7	0.26
(3,74)	1:56:A:ASP:N	1:65:A:GLU:OE2	8	0.26
(3,65)	1:51:A:VAL:H	1:47:A:GLN:O	11	0.26
(3,56)	1:40:A:GLU:N	1:36:A:VAL:O	2	0.26
(3,51)	1:38:A:SER:H	1:34:A:SER:O	5	0.26
(3,48)	1:36:A:VAL:N	1:32:A:GLY:O	3	0.26
(3,40)	1:28:A:PHE:N	1:24:A:ILE:O	7	0.26
(3,39)	1:28:A:PHE:H	1:24:A:ILE:O	1	0.26
(3,28)	1:19:A:ASP:N	1:15:A:ASP:OD1	3	0.26

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,26)	1:18:A:GLN:N	1:15:A:ASP:OD1	10	0.26
(3,15)	1:13:A:THR:H	1:9:A:SER:O	7	0.26
(3,9)	1:10:A:LEU:H	1:6:A:GLU:O	2	0.26
(1,805)	1:75:A:ASN:H	1:71:A:LYS:CA	12	0.26
(1,794)	1:73:A:ALA:H	1:72:A:LYS:CD	1	0.26
(1,756)	1:70:A:VAL:H	1:68:A:LYS:CB	8	0.26
(1,718)	1:66:A:LEU:H	1:67:A:LYS:CB	5	0.26
(1,707)	1:65:A:GLU:H	1:66:A:LEU:CB	8	0.26
(1,700)	1:65:A:GLU:H	1:63:A:PHE:CB	4	0.26
(1,699)	1:65:A:GLU:H	1:63:A:PHE:CA	3	0.26
(1,683)	1:63:A:PHE:H	1:20:A:GLY:C	2	0.26
(1,666)	1:62:A:THR:H	1:61:A:ILE:CG2	10	0.26
(1,663)	1:62:A:THR:H	1:21:A:LYS:CG	12	0.26
(1,652)	1:61:A:ILE:H	1:22:A:ILE:CG1	11	0.26
(1,641)	1:60:A:SER:H	1:50:A:LEU:CD1	11	0.26
(1,641)	1:60:A:SER:H	1:50:A:LEU:CD1	12	0.26
(1,633)	1:58:A:ASP:H	1:58:A:ASP:CG	1	0.26
(1,633)	1:58:A:ASP:H	1:58:A:ASP:CG	2	0.26
(1,632)	1:58:A:ASP:N	1:58:A:ASP:OD1	5	0.26
(1,631)	1:58:A:ASP:H	1:58:A:ASP:OD1	5	0.26
(1,630)	1:58:A:ASP:H	1:56:A:ASP:CG	10	0.26
(1,628)	1:58:A:ASP:H	1:59:A:GLY:CA	3	0.26
(1,615)	1:57:A:GLN:H	1:54:A:ASP:CB	10	0.26
(1,600)	1:55:A:SER:H	1:54:A:ASP:CB	2	0.26
(1,583)	1:53:A:TYR:H	1:50:A:LEU:CA	7	0.26
(1,553)	1:50:A:LEU:H	1:51:A:VAL:CG2	10	0.26
(1,531)	1:48:A:GLU:H	1:47:A:GLN:CG	1	0.26
(1,531)	1:48:A:GLU:H	1:47:A:GLN:CG	10	0.26
(1,518)	1:47:A:GLN:H	1:45:A:SER:CB	11	0.26
(1,513)	1:45:A:SER:H	1:48:A:GLU:CA	4	0.26
(1,511)	1:45:A:SER:H	1:45:A:SER:CB	2	0.26
(1,511)	1:45:A:SER:H	1:45:A:SER:CB	10	0.26
(1,507)	1:45:A:SER:H	1:43:A:THR:CG2	12	0.26
(1,506)	1:45:A:SER:H	1:43:A:THR:CB	2	0.26
(1,506)	1:45:A:SER:H	1:43:A:THR:CB	11	0.26
(1,506)	1:45:A:SER:H	1:43:A:THR:CB	12	0.26
(1,488)	1:43:A:THR:H	1:41:A:THR:CG2	12	0.26
(1,485)	1:43:A:THR:H	1:39:A:SER:CA	12	0.26
(1,477)	1:42:A:ASN:H	1:39:A:SER:CA	1	0.26
(1,471)	1:41:A:THR:H	1:42:A:ASN:CB	11	0.26
(1,466)	1:41:A:THR:H	1:40:A:GLU:CG	1	0.26
(1,462)	1:41:A:THR:H	1:39:A:SER:CA	7	0.26

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,449)	1:40:A:GLU:H	1:36:A:VAL:CG1	2	0.26
(1,448)	1:40:A:GLU:H	1:36:A:VAL:CA	5	0.26
(1,440)	1:39:A:SER:H	1:35:A:ALA:CA	1	0.26
(1,435)	1:38:A:SER:H	1:37:A:ILE:CD1	9	0.26
(1,426)	1:37:A:ILE:H	1:38:A:SER:CB	2	0.26
(1,415)	1:37:A:ILE:H	1:35:A:ALA:CB	12	0.26
(1,413)	1:37:A:ILE:H	1:34:A:SER:CA	11	0.26
(1,412)	1:37:A:ILE:H	1:33:A:LEU:CA	7	0.26
(1,348)	1:29:A:LEU:H	1:28:A:PHE:CB	3	0.26
(1,348)	1:29:A:LEU:H	1:28:A:PHE:CB	4	0.26
(1,327)	1:27:A:LEU:H	1:24:A:ILE:CA	4	0.26
(1,314)	1:26:A:GLU:H	1:22:A:ILE:CG2	9	0.26
(1,307)	1:25:A:ASN:H	1:24:A:ILE:CB	5	0.26
(1,302)	1:24:A:ILE:H	1:60:A:SER:CB	6	0.26
(1,282)	1:22:A:ILE:H	1:61:A:ILE:CG2	6	0.26
(1,271)	1:22:A:ILE:H	1:21:A:LYS:CG	7	0.26
(1,252)	1:19:A:ASP:N	1:19:A:ASP:OD1	2	0.26
(1,252)	1:19:A:ASP:N	1:19:A:ASP:OD1	3	0.26
(1,248)	1:19:A:ASP:H	1:20:A:GLY:CA	1	0.26
(1,241)	1:19:A:ASP:H	1:17:A:ASP:CA	4	0.26
(1,239)	1:18:A:GLN:H	1:15:A:ASP:CG	9	0.26
(1,239)	1:18:A:GLN:H	1:15:A:ASP:CG	12	0.26
(1,221)	1:17:A:ASP:H	1:16:A:ARG:CB	3	0.26
(1,198)	1:14:A:LEU:H	1:13:A:THR:CG2	6	0.26
(1,192)	1:13:A:THR:H	1:9:A:SER:C	11	0.26
(1,173)	1:12:A:ASN:H	1:8:A:GLN:CG	4	0.26
(1,160)	1:10:A:LEU:H	1:10:A:LEU:CD2	10	0.26
(1,143)	1:8:A:GLN:H	1:9:A:SER:CB	1	0.26
(1,121)	1:6:A:GLU:H	1:3:A:THR:C	4	0.26
(1,111)	1:6:A:GLU:H	1:2:A:ALA:CB	2	0.26
(1,85)	1:2:A:ALA:H	1:40:A:GLU:CG	2	0.26
(1,84)	1:2:A:ALA:H	1:40:A:GLU:CB	9	0.26
(1,34)	1:-10:A:HIS:H	1:-10:A:HIS:CB	12	0.26
(1,25)	1:-12:A:HIS:H	1:-12:A:HIS:CB	1	0.26
(3,101)	1:70:A:VAL:H	1:66:A:LEU:O	1	0.25
(3,93)	1:66:A:LEU:H	1:62:A:THR:O	10	0.25
(3,91)	1:65:A:GLU:H	1:62:A:THR:OG1	2	0.25
(3,86)	1:61:A:ILE:N	1:22:A:ILE:O	7	0.25
(3,83)	1:60:A:SER:H	1:58:A:ASP:OD1	2	0.25
(3,77)	1:58:A:ASP:H	1:54:A:ASP:OD1	2	0.25
(3,74)	1:56:A:ASP:N	1:65:A:GLU:OE2	4	0.25
(3,60)	1:43:A:THR:N	1:38:A:SER:O	6	0.25

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,59)	1:43:A:THR:H	1:38:A:SER:O	11	0.25
(3,58)	1:41:A:THR:N	1:37:A:ILE:O	2	0.25
(3,46)	1:35:A:ALA:N	1:31:A:PRO:O	11	0.25
(3,40)	1:28:A:PHE:N	1:24:A:ILE:O	1	0.25
(3,31)	1:20:A:GLY:H	1:15:A:ASP:OD2	4	0.25
(3,26)	1:18:A:GLN:N	1:15:A:ASP:OD1	4	0.25
(3,10)	1:10:A:LEU:N	1:6:A:GLU:O	6	0.25
(1,782)	1:72:A:LYS:H	1:71:A:LYS:CD	3	0.25
(1,781)	1:72:A:LYS:H	1:71:A:LYS:CG	6	0.25
(1,774)	1:71:A:LYS:H	1:71:A:LYS:CE	9	0.25
(1,749)	1:69:A:ALA:H	1:68:A:LYS:CG	8	0.25
(1,746)	1:69:A:ALA:H	1:66:A:LEU:CD1	5	0.25
(1,730)	1:67:A:LYS:H	1:67:A:LYS:CD	3	0.25
(1,729)	1:67:A:LYS:H	1:67:A:LYS:CG	3	0.25
(1,719)	1:66:A:LEU:H	1:62:A:THR:C	9	0.25
(1,697)	1:65:A:GLU:H	1:62:A:THR:CB	3	0.25
(1,693)	1:64:A:GLU:H	1:65:A:GLU:CG	9	0.25
(1,671)	1:62:A:THR:H	1:65:A:GLU:CG	6	0.25
(1,659)	1:61:A:ILE:H	1:61:A:ILE:CG1	3	0.25
(1,652)	1:61:A:ILE:H	1:22:A:ILE:CG1	5	0.25
(1,628)	1:58:A:ASP:H	1:59:A:GLY:CA	6	0.25
(1,617)	1:57:A:GLN:H	1:56:A:ASP:CB	4	0.25
(1,611)	1:56:A:ASP:H	1:57:A:GLN:CA	1	0.25
(1,571)	1:52:A:GLN:H	1:48:A:GLU:CA	1	0.25
(1,571)	1:52:A:GLN:H	1:48:A:GLU:CA	5	0.25
(1,563)	1:51:A:VAL:H	1:50:A:LEU:CD1	9	0.25
(1,536)	1:49:A:LEU:H	1:43:A:THR:CB	5	0.25
(1,518)	1:47:A:GLN:H	1:45:A:SER:CB	4	0.25
(1,516)	1:45:A:SER:H	1:49:A:LEU:CB	5	0.25
(1,470)	1:41:A:THR:H	1:42:A:ASN:CA	11	0.25
(1,459)	1:41:A:THR:H	1:37:A:ILE:CG2	11	0.25
(1,458)	1:41:A:THR:H	1:37:A:ILE:CA	6	0.25
(1,456)	1:40:A:GLU:H	1:41:A:THR:CG2	12	0.25
(1,426)	1:37:A:ILE:H	1:38:A:SER:CB	10	0.25
(1,418)	1:37:A:ILE:H	1:36:A:VAL:CG1	6	0.25
(1,402)	1:36:A:VAL:H	1:35:A:ALA:CB	11	0.25
(1,397)	1:35:A:ALA:H	1:38:A:SER:CB	2	0.25
(1,379)	1:34:A:SER:H	1:32:A:GLY:CA	5	0.25
(1,359)	1:30:A:SER:H	1:29:A:LEU:CD2	3	0.25
(1,354)	1:30:A:SER:H	1:28:A:PHE:CA	4	0.25
(1,335)	1:27:A:LEU:H	1:28:A:PHE:CB	6	0.25
(1,322)	1:26:A:GLU:H	1:26:A:GLU:CG	9	0.25

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,322)	1:26:A:GLU:H	1:26:A:GLU:CG	12	0.25
(1,319)	1:26:A:GLU:H	1:25:A:ASN:CB	3	0.25
(1,314)	1:26:A:GLU:H	1:22:A:ILE:CG2	8	0.25
(1,309)	1:25:A:ASN:H	1:24:A:ILE:CD1	5	0.25
(1,299)	1:24:A:ILE:H	1:24:A:ILE:CD1	9	0.25
(1,284)	1:22:A:ILE:H	1:61:A:ILE:C	9	0.25
(1,267)	1:21:A:LYS:H	1:21:A:LYS:CE	11	0.25
(1,248)	1:19:A:ASP:H	1:20:A:GLY:CA	7	0.25
(1,242)	1:19:A:ASP:H	1:17:A:ASP:CB	3	0.25
(1,222)	1:17:A:ASP:H	1:16:A:ARG:CG	3	0.25
(1,219)	1:17:A:ASP:H	1:15:A:ASP:CB	7	0.25
(1,197)	1:14:A:LEU:H	1:13:A:THR:CB	7	0.25
(1,192)	1:13:A:THR:H	1:9:A:SER:C	1	0.25
(1,173)	1:12:A:ASN:H	1:8:A:GLN:CG	11	0.25
(1,161)	1:10:A:LEU:H	1:11:A:PHE:CB	7	0.25
(1,160)	1:10:A:LEU:H	1:10:A:LEU:CD2	6	0.25
(1,160)	1:10:A:LEU:H	1:10:A:LEU:CD2	12	0.25
(1,152)	1:9:A:SER:H	1:10:A:LEU:CB	9	0.25
(1,112)	1:6:A:GLU:H	1:3:A:THR:CB	10	0.25
(1,112)	1:6:A:GLU:H	1:3:A:THR:CB	12	0.25
(1,109)	1:5:A:GLN:H	1:5:A:GLN:CG	2	0.25
(1,23)	1:-12:A:HIS:H	1:-13:A:HIS:CB	1	0.25
(1,23)	1:-12:A:HIS:H	1:-13:A:HIS:CB	11	0.25
(3,82)	1:59:A:GLY:N	1:54:A:ASP:OD2	8	0.24
(3,80)	1:58:A:ASP:N	1:56:A:ASP:OD1	12	0.24
(3,76)	1:57:A:GLN:N	1:54:A:ASP:O	4	0.24
(3,76)	1:57:A:GLN:N	1:54:A:ASP:O	9	0.24
(3,67)	1:52:A:GLN:H	1:48:A:GLU:O	7	0.24
(3,67)	1:52:A:GLN:H	1:48:A:GLU:O	8	0.24
(3,60)	1:43:A:THR:N	1:38:A:SER:O	11	0.24
(3,59)	1:43:A:THR:H	1:38:A:SER:O	5	0.24
(3,55)	1:40:A:GLU:H	1:36:A:VAL:O	5	0.24
(3,53)	1:39:A:SER:H	1:35:A:ALA:O	6	0.24
(3,18)	1:14:A:LEU:N	1:10:A:LEU:O	5	0.24
(3,17)	1:14:A:LEU:H	1:10:A:LEU:O	5	0.24
(3,7)	1:9:A:SER:H	1:5:A:GLN:O	6	0.24
(1,799)	1:74:A:SER:H	1:71:A:LYS:CA	12	0.24
(1,794)	1:73:A:ALA:H	1:72:A:LYS:CD	6	0.24
(1,787)	1:72:A:LYS:H	1:73:A:ALA:CB	4	0.24
(1,758)	1:70:A:VAL:H	1:69:A:ALA:CB	3	0.24
(1,719)	1:66:A:LEU:H	1:62:A:THR:C	10	0.24
(1,718)	1:66:A:LEU:H	1:67:A:LYS:CB	12	0.24

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,698)	1:65:A:GLU:H	1:62:A:THR:CG2	4	0.24
(1,697)	1:65:A:GLU:H	1:62:A:THR:CB	12	0.24
(1,696)	1:65:A:GLU:H	1:62:A:THR:CA	1	0.24
(1,678)	1:63:A:PHE:H	1:62:A:THR:CG2	6	0.24
(1,669)	1:62:A:THR:H	1:62:A:THR:CG2	1	0.24
(1,666)	1:62:A:THR:H	1:61:A:ILE:CG2	5	0.24
(1,648)	1:60:A:SER:H	1:61:A:ILE:CG1	9	0.24
(1,633)	1:58:A:ASP:H	1:58:A:ASP:CG	10	0.24
(1,622)	1:58:A:ASP:H	1:56:A:ASP:CB	12	0.24
(1,619)	1:57:A:GLN:H	1:57:A:GLN:CB	10	0.24
(1,612)	1:56:A:ASP:H	1:57:A:GLN:CB	10	0.24
(1,605)	1:56:A:ASP:H	1:54:A:ASP:CA	10	0.24
(1,600)	1:55:A:SER:H	1:54:A:ASP:CB	9	0.24
(1,561)	1:51:A:VAL:H	1:50:A:LEU:CB	1	0.24
(1,546)	1:50:A:LEU:H	1:47:A:GLN:CA	8	0.24
(1,546)	1:50:A:LEU:H	1:47:A:GLN:CA	12	0.24
(1,530)	1:48:A:GLU:H	1:47:A:GLN:CB	11	0.24
(1,521)	1:47:A:GLN:H	1:46:A:PRO:CG	7	0.24
(1,517)	1:47:A:GLN:H	1:45:A:SER:CA	11	0.24
(1,515)	1:45:A:SER:H	1:48:A:GLU:CG	1	0.24
(1,512)	1:45:A:SER:H	1:46:A:PRO:CD	2	0.24
(1,507)	1:45:A:SER:H	1:43:A:THR:CG2	7	0.24
(1,493)	1:43:A:THR:H	1:43:A:THR:CG2	12	0.24
(1,487)	1:43:A:THR:H	1:41:A:THR:CB	4	0.24
(1,485)	1:43:A:THR:H	1:39:A:SER:CA	1	0.24
(1,483)	1:43:A:THR:H	1:38:A:SER:CA	6	0.24
(1,465)	1:41:A:THR:H	1:40:A:GLU:CB	3	0.24
(1,456)	1:40:A:GLU:H	1:41:A:THR:CG2	7	0.24
(1,430)	1:38:A:SER:H	1:35:A:ALA:CB	10	0.24
(1,422)	1:37:A:ILE:H	1:37:A:ILE:CG1	5	0.24
(1,418)	1:37:A:ILE:H	1:36:A:VAL:CG1	11	0.24
(1,415)	1:37:A:ILE:H	1:35:A:ALA:CB	6	0.24
(1,412)	1:37:A:ILE:H	1:33:A:LEU:CA	1	0.24
(1,410)	1:37:A:ILE:H	1:10:A:LEU:CD2	3	0.24
(1,409)	1:37:A:ILE:H	1:10:A:LEU:CD1	10	0.24
(1,408)	1:36:A:VAL:H	1:32:A:GLY:C	12	0.24
(1,398)	1:35:A:ALA:H	1:31:A:PRO:C	4	0.24
(1,393)	1:35:A:ALA:H	1:34:A:SER:CB	6	0.24
(1,382)	1:34:A:SER:H	1:33:A:LEU:CG	8	0.24
(1,382)	1:34:A:SER:H	1:33:A:LEU:CG	11	0.24
(1,370)	1:33:A:LEU:H	1:30:A:SER:CA	4	0.24
(1,352)	1:30:A:SER:H	1:26:A:GLU:CA	4	0.24

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,351)	1:29:A:LEU:H	1:25:A:ASN:C	5	0.24
(1,328)	1:27:A:LEU:H	1:25:A:ASN:CA	9	0.24
(1,316)	1:26:A:GLU:H	1:24:A:ILE:CA	9	0.24
(1,272)	1:22:A:ILE:H	1:21:A:LYS:CD	4	0.24
(1,266)	1:21:A:LYS:H	1:21:A:LYS:CD	5	0.24
(1,265)	1:21:A:LYS:H	1:21:A:LYS:CG	1	0.24
(1,242)	1:19:A:ASP:H	1:17:A:ASP:CB	1	0.24
(1,240)	1:19:A:ASP:H	1:15:A:ASP:CB	11	0.24
(1,231)	1:18:A:GLN:H	1:15:A:ASP:CB	3	0.24
(1,227)	1:17:A:ASP:H	1:18:A:GLN:CB	5	0.24
(1,216)	1:16:A:ARG:H	1:26:A:GLU:CB	12	0.24
(1,212)	1:16:A:ARG:H	1:15:A:ASP:CB	6	0.24
(1,171)	1:11:A:PHE:H	1:7:A:LEU:C	8	0.24
(1,167)	1:11:A:PHE:H	1:10:A:LEU:CD1	1	0.24
(1,166)	1:11:A:PHE:H	1:10:A:LEU:CG	12	0.24
(1,147)	1:9:A:SER:H	1:8:A:GLN:CA	5	0.24
(1,145)	1:9:A:SER:H	1:5:A:GLN:CA	4	0.24
(1,133)	1:8:A:GLN:H	1:4:A:GLU:CA	12	0.24
(1,124)	1:7:A:LEU:H	1:6:A:GLU:CB	5	0.24
(1,111)	1:6:A:GLU:H	1:2:A:ALA:CB	7	0.24
(1,60)	1:-3:A:ARG:H	1:-4:A:PRO:CB	10	0.24
(1,60)	1:-3:A:ARG:H	1:-4:A:PRO:CB	12	0.24
(1,34)	1:-10:A:HIS:H	1:-10:A:HIS:CB	6	0.24
(3,101)	1:70:A:VAL:H	1:66:A:LEU:O	7	0.23
(3,78)	1:58:A:ASP:N	1:54:A:ASP:OD1	2	0.23
(3,78)	1:58:A:ASP:N	1:54:A:ASP:OD1	9	0.23
(3,66)	1:51:A:VAL:N	1:47:A:GLN:O	2	0.23
(3,59)	1:43:A:THR:H	1:38:A:SER:O	6	0.23
(3,56)	1:40:A:GLU:N	1:36:A:VAL:O	5	0.23
(3,38)	1:27:A:LEU:N	1:23:A:SER:O	3	0.23
(3,32)	1:20:A:GLY:N	1:15:A:ASP:OD2	5	0.23
(3,31)	1:20:A:GLY:H	1:15:A:ASP:OD2	9	0.23
(3,27)	1:19:A:ASP:H	1:15:A:ASP:OD1	11	0.23
(3,25)	1:18:A:GLN:H	1:15:A:ASP:OD1	10	0.23
(3,8)	1:9:A:SER:N	1:5:A:GLN:O	12	0.23
(3,2)	1:6:A:GLU:N	1:3:A:THR:O	8	0.23
(3,2)	1:6:A:GLU:N	1:3:A:THR:O	9	0.23
(1,781)	1:72:A:LYS:H	1:71:A:LYS:CG	12	0.23
(1,771)	1:71:A:LYS:H	1:70:A:VAL:CG2	2	0.23
(1,763)	1:70:A:VAL:H	1:71:A:LYS:CB	4	0.23
(1,753)	1:70:A:VAL:H	1:66:A:LEU:CA	8	0.23
(1,748)	1:69:A:ALA:H	1:68:A:LYS:CB	6	0.23

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,738)	1:68:A:LYS:H	1:67:A:LYS:CD	1	0.23
(1,725)	1:67:A:LYS:H	1:66:A:LEU:CD1	10	0.23
(1,723)	1:67:A:LYS:H	1:66:A:LEU:CB	5	0.23
(1,720)	1:67:A:LYS:H	1:63:A:PHE:CA	10	0.23
(1,703)	1:65:A:GLU:H	1:64:A:GLU:CG	7	0.23
(1,684)	1:64:A:GLU:H	1:62:A:THR:CA	9	0.23
(1,665)	1:62:A:THR:H	1:61:A:ILE:CG1	6	0.23
(1,661)	1:61:A:ILE:H	1:61:A:ILE:CD1	9	0.23
(1,605)	1:56:A:ASP:H	1:54:A:ASP:CA	5	0.23
(1,603)	1:55:A:SER:H	1:65:A:GLU:CB	7	0.23
(1,602)	1:55:A:SER:H	1:55:A:SER:CB	12	0.23
(1,580)	1:52:A:GLN:H	1:53:A:TYR:CB	8	0.23
(1,577)	1:52:A:GLN:H	1:51:A:VAL:CG2	7	0.23
(1,562)	1:51:A:VAL:H	1:50:A:LEU:CG	4	0.23
(1,549)	1:50:A:LEU:H	1:49:A:LEU:CD1	6	0.23
(1,547)	1:50:A:LEU:H	1:49:A:LEU:CA	3	0.23
(1,527)	1:48:A:GLU:H	1:43:A:THR:CB	8	0.23
(1,527)	1:48:A:GLU:H	1:43:A:THR:CB	11	0.23
(1,521)	1:47:A:GLN:H	1:46:A:PRO:CG	1	0.23
(1,520)	1:47:A:GLN:H	1:46:A:PRO:CB	4	0.23
(1,513)	1:45:A:SER:H	1:48:A:GLU:CA	8	0.23
(1,477)	1:42:A:ASN:H	1:39:A:SER:CA	7	0.23
(1,470)	1:41:A:THR:H	1:42:A:ASN:CA	2	0.23
(1,465)	1:41:A:THR:H	1:40:A:GLU:CB	11	0.23
(1,459)	1:41:A:THR:H	1:37:A:ILE:CG2	5	0.23
(1,449)	1:40:A:GLU:H	1:36:A:VAL:CG1	11	0.23
(1,440)	1:39:A:SER:H	1:35:A:ALA:CA	6	0.23
(1,433)	1:38:A:SER:H	1:37:A:ILE:CG1	10	0.23
(1,428)	1:38:A:SER:H	1:34:A:SER:CA	9	0.23
(1,424)	1:37:A:ILE:H	1:37:A:ILE:CD1	11	0.23
(1,396)	1:35:A:ALA:H	1:36:A:VAL:CG2	3	0.23
(1,357)	1:30:A:SER:H	1:29:A:LEU:CB	4	0.23
(1,355)	1:30:A:SER:H	1:28:A:PHE:CB	3	0.23
(1,353)	1:30:A:SER:H	1:27:A:LEU:CA	2	0.23
(1,345)	1:29:A:LEU:H	1:25:A:ASN:CA	7	0.23
(1,344)	1:28:A:PHE:H	1:24:A:ILE:C	7	0.23
(1,340)	1:28:A:PHE:H	1:27:A:LEU:CB	11	0.23
(1,327)	1:27:A:LEU:H	1:24:A:ILE:CA	10	0.23
(1,324)	1:26:A:GLU:H	1:27:A:LEU:CG	1	0.23
(1,316)	1:26:A:GLU:H	1:24:A:ILE:CA	12	0.23
(1,297)	1:24:A:ILE:H	1:24:A:ILE:CG1	11	0.23
(1,275)	1:22:A:ILE:H	1:22:A:ILE:CG1	12	0.23

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,270)	1:22:A:ILE:H	1:21:A:LYS:CB	6	0.23
(1,261)	1:21:A:LYS:H	1:19:A:ASP:CB	6	0.23
(1,230)	1:17:A:ASP:H	1:26:A:GLU:CD	8	0.23
(1,161)	1:10:A:LEU:H	1:11:A:PHE:CB	10	0.23
(1,153)	1:9:A:SER:H	1:5:A:GLN:C	4	0.23
(1,149)	1:9:A:SER:H	1:8:A:GLN:CG	2	0.23
(1,142)	1:8:A:GLN:H	1:8:A:GLN:CG	2	0.23
(1,137)	1:8:A:GLN:H	1:7:A:LEU:CG	8	0.23
(1,125)	1:7:A:LEU:H	1:6:A:GLU:CG	5	0.23
(1,109)	1:5:A:GLN:H	1:5:A:GLN:CG	1	0.23
(1,32)	1:-10:A:HIS:H	1:-11:A:HIS:CB	5	0.23
(1,11)	1:-15:A:HIS:H	1:-16:A:SER:CB	6	0.23
(3,102)	1:70:A:VAL:N	1:66:A:LEU:O	10	0.22
(3,90)	1:63:A:PHE:N	1:20:A:GLY:O	2	0.22
(3,88)	1:62:A:THR:N	1:65:A:GLU:OE1	3	0.22
(3,68)	1:52:A:GLN:N	1:48:A:GLU:O	7	0.22
(3,63)	1:50:A:LEU:H	1:46:A:PRO:O	4	0.22
(3,61)	1:48:A:GLU:H	1:45:A:SER:OG	4	0.22
(3,58)	1:41:A:THR:N	1:37:A:ILE:O	5	0.22
(3,54)	1:39:A:SER:N	1:35:A:ALA:O	10	0.22
(3,45)	1:35:A:ALA:H	1:31:A:PRO:O	1	0.22
(3,42)	1:29:A:LEU:N	1:25:A:ASN:O	5	0.22
(3,16)	1:13:A:THR:N	1:9:A:SER:O	1	0.22
(3,16)	1:13:A:THR:N	1:9:A:SER:O	8	0.22
(3,11)	1:11:A:PHE:H	1:7:A:LEU:O	2	0.22
(3,9)	1:10:A:LEU:H	1:6:A:GLU:O	8	0.22
(3,2)	1:6:A:GLU:N	1:3:A:THR:O	11	0.22
(3,1)	1:6:A:GLU:H	1:3:A:THR:O	9	0.22
(1,797)	1:73:A:ALA:H	1:74:A:SER:CA	4	0.22
(1,796)	1:73:A:ALA:H	1:73:A:ALA:CB	2	0.22
(1,793)	1:73:A:ALA:H	1:72:A:LYS:CG	2	0.22
(1,787)	1:72:A:LYS:H	1:73:A:ALA:CB	2	0.22
(1,766)	1:71:A:LYS:H	1:68:A:LYS:CA	8	0.22
(1,764)	1:70:A:VAL:H	1:66:A:LEU:C	8	0.22
(1,731)	1:67:A:LYS:H	1:68:A:LYS:CB	6	0.22
(1,717)	1:66:A:LEU:H	1:66:A:LEU:CD2	8	0.22
(1,703)	1:65:A:GLU:H	1:64:A:GLU:CG	5	0.22
(1,665)	1:62:A:THR:H	1:61:A:ILE:CG1	8	0.22
(1,642)	1:60:A:SER:H	1:50:A:LEU:CD2	1	0.22
(1,634)	1:59:A:GLY:H	1:50:A:LEU:CD2	5	0.22
(1,631)	1:58:A:ASP:H	1:58:A:ASP:OD1	9	0.22
(1,629)	1:58:A:ASP:H	1:54:A:ASP:CG	11	0.22

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,628)	1:58:A:ASP:H	1:59:A:GLY:CA	8	0.22
(1,577)	1:52:A:GLN:H	1:51:A:VAL:CG2	3	0.22
(1,577)	1:52:A:GLN:H	1:51:A:VAL:CG2	5	0.22
(1,554)	1:50:A:LEU:H	1:46:A:PRO:C	6	0.22
(1,549)	1:50:A:LEU:H	1:49:A:LEU:CD1	5	0.22
(1,521)	1:47:A:GLN:H	1:46:A:PRO:CG	10	0.22
(1,520)	1:47:A:GLN:H	1:46:A:PRO:CB	10	0.22
(1,509)	1:45:A:SER:H	1:44:A:ASN:CB	2	0.22
(1,507)	1:45:A:SER:H	1:43:A:THR:CG2	2	0.22
(1,502)	1:44:A:ASN:H	1:45:A:SER:CB	8	0.22
(1,483)	1:43:A:THR:H	1:38:A:SER:CA	1	0.22
(1,476)	1:41:A:THR:H	1:37:A:ILE:C	6	0.22
(1,466)	1:41:A:THR:H	1:40:A:GLU:CG	2	0.22
(1,452)	1:40:A:GLU:H	1:39:A:SER:CB	11	0.22
(1,425)	1:37:A:ILE:H	1:38:A:SER:CA	4	0.22
(1,407)	1:36:A:VAL:H	1:37:A:ILE:CG1	4	0.22
(1,397)	1:35:A:ALA:H	1:38:A:SER:CB	5	0.22
(1,391)	1:35:A:ALA:H	1:33:A:LEU:CA	3	0.22
(1,387)	1:34:A:SER:H	1:35:A:ALA:CB	4	0.22
(1,381)	1:34:A:SER:H	1:33:A:LEU:CB	11	0.22
(1,377)	1:34:A:SER:H	1:30:A:SER:CB	8	0.22
(1,362)	1:30:A:SER:H	1:31:A:PRO:CG	6	0.22
(1,354)	1:30:A:SER:H	1:28:A:PHE:CA	12	0.22
(1,346)	1:29:A:LEU:H	1:26:A:GLU:CA	7	0.22
(1,331)	1:27:A:LEU:H	1:26:A:GLU:CG	2	0.22
(1,319)	1:26:A:GLU:H	1:25:A:ASN:CB	2	0.22
(1,300)	1:24:A:ILE:H	1:25:A:ASN:CB	11	0.22
(1,261)	1:21:A:LYS:H	1:19:A:ASP:CB	3	0.22
(1,250)	1:19:A:ASP:H	1:17:A:ASP:CG	10	0.22
(1,249)	1:19:A:ASP:H	1:15:A:ASP:CG	9	0.22
(1,216)	1:16:A:ARG:H	1:26:A:GLU:CB	3	0.22
(1,201)	1:14:A:LEU:H	1:15:A:ASP:CB	1	0.22
(1,194)	1:14:A:LEU:H	1:11:A:PHE:CA	3	0.22
(1,194)	1:14:A:LEU:H	1:11:A:PHE:CA	6	0.22
(1,193)	1:14:A:LEU:H	1:10:A:LEU:CA	5	0.22
(1,159)	1:10:A:LEU:H	1:10:A:LEU:CG	6	0.22
(1,159)	1:10:A:LEU:H	1:10:A:LEU:CG	9	0.22
(1,149)	1:9:A:SER:H	1:8:A:GLN:CG	11	0.22
(1,130)	1:7:A:LEU:H	1:8:A:GLN:CB	2	0.22
(1,121)	1:6:A:GLU:H	1:3:A:THR:C	6	0.22
(1,88)	1:3:A:THR:H	1:2:A:ALA:CB	5	0.22
(1,48)	1:-6:A:LEU:H	1:-6:A:LEU:CB	12	0.22

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,99)	1:69:A:ALA:H	1:65:A:GLU:O	3	0.21
(3,98)	1:68:A:LYS:N	1:64:A:GLU:O	2	0.21
(3,82)	1:59:A:GLY:N	1:54:A:ASP:OD2	9	0.21
(3,78)	1:58:A:ASP:N	1:54:A:ASP:OD1	10	0.21
(3,68)	1:52:A:GLN:N	1:48:A:GLU:O	9	0.21
(3,67)	1:52:A:GLN:H	1:48:A:GLU:O	11	0.21
(3,57)	1:41:A:THR:H	1:37:A:ILE:O	11	0.21
(3,50)	1:37:A:ILE:N	1:33:A:LEU:O	4	0.21
(3,48)	1:36:A:VAL:N	1:32:A:GLY:O	7	0.21
(3,48)	1:36:A:VAL:N	1:32:A:GLY:O	12	0.21
(3,45)	1:35:A:ALA:H	1:31:A:PRO:O	11	0.21
(3,43)	1:34:A:SER:H	1:30:A:SER:O	9	0.21
(3,27)	1:19:A:ASP:H	1:15:A:ASP:OD1	1	0.21
(3,10)	1:10:A:LEU:N	1:6:A:GLU:O	2	0.21
(3,6)	1:8:A:GLN:N	1:4:A:GLU:O	8	0.21
(1,817)	1:76:A:LEU:H	1:76:A:LEU:CD1	7	0.21
(1,771)	1:71:A:LYS:H	1:70:A:VAL:CG2	1	0.21
(1,766)	1:71:A:LYS:H	1:68:A:LYS:CA	11	0.21
(1,764)	1:70:A:VAL:H	1:66:A:LEU:C	1	0.21
(1,756)	1:70:A:VAL:H	1:68:A:LYS:CB	9	0.21
(1,745)	1:69:A:ALA:H	1:66:A:LEU:CA	9	0.21
(1,737)	1:68:A:LYS:H	1:67:A:LYS:CG	6	0.21
(1,709)	1:66:A:LEU:H	1:63:A:PHE:CA	4	0.21
(1,696)	1:65:A:GLU:H	1:62:A:THR:CA	2	0.21
(1,696)	1:65:A:GLU:H	1:62:A:THR:CA	8	0.21
(1,685)	1:64:A:GLU:H	1:62:A:THR:CB	8	0.21
(1,684)	1:64:A:GLU:H	1:62:A:THR:CA	7	0.21
(1,672)	1:62:A:THR:H	1:65:A:GLU:CD	9	0.21
(1,666)	1:62:A:THR:H	1:61:A:ILE:CG2	2	0.21
(1,661)	1:61:A:ILE:H	1:61:A:ILE:CD1	11	0.21
(1,651)	1:61:A:ILE:H	1:22:A:ILE:CB	5	0.21
(1,648)	1:60:A:SER:H	1:61:A:ILE:CG1	12	0.21
(1,600)	1:55:A:SER:H	1:54:A:ASP:CB	10	0.21
(1,600)	1:55:A:SER:H	1:54:A:ASP:CB	11	0.21
(1,580)	1:52:A:GLN:H	1:53:A:TYR:CB	5	0.21
(1,576)	1:52:A:GLN:H	1:51:A:VAL:CG1	5	0.21
(1,570)	1:51:A:VAL:H	1:47:A:GLN:C	8	0.21
(1,549)	1:50:A:LEU:H	1:49:A:LEU:CD1	2	0.21
(1,536)	1:49:A:LEU:H	1:43:A:THR:CB	9	0.21
(1,535)	1:48:A:GLU:H	1:49:A:LEU:CB	12	0.21
(1,528)	1:48:A:GLU:H	1:45:A:SER:CB	6	0.21
(1,513)	1:45:A:SER:H	1:48:A:GLU:CA	11	0.21

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,505)	1:45:A:SER:H	1:43:A:THR:CA	3	0.21
(1,503)	1:44:A:ASN:H	1:48:A:GLU:CB	4	0.21
(1,498)	1:44:A:ASN:H	1:43:A:THR:CB	12	0.21
(1,494)	1:43:A:THR:H	1:49:A:LEU:CD1	10	0.21
(1,488)	1:43:A:THR:H	1:41:A:THR:CG2	10	0.21
(1,462)	1:41:A:THR:H	1:39:A:SER:CA	8	0.21
(1,456)	1:40:A:GLU:H	1:41:A:THR:CG2	8	0.21
(1,447)	1:39:A:SER:H	1:35:A:ALA:C	6	0.21
(1,447)	1:39:A:SER:H	1:35:A:ALA:C	9	0.21
(1,438)	1:38:A:SER:H	1:39:A:SER:CB	4	0.21
(1,438)	1:38:A:SER:H	1:39:A:SER:CB	8	0.21
(1,433)	1:38:A:SER:H	1:37:A:ILE:CG1	5	0.21
(1,429)	1:38:A:SER:H	1:35:A:ALA:CA	10	0.21
(1,415)	1:37:A:ILE:H	1:35:A:ALA:CB	5	0.21
(1,412)	1:37:A:ILE:H	1:33:A:LEU:CA	8	0.21
(1,409)	1:37:A:ILE:H	1:10:A:LEU:CD1	1	0.21
(1,406)	1:36:A:VAL:H	1:36:A:VAL:CG2	5	0.21
(1,399)	1:36:A:VAL:H	1:32:A:GLY:CA	2	0.21
(1,384)	1:34:A:SER:H	1:33:A:LEU:CD2	7	0.21
(1,370)	1:33:A:LEU:H	1:30:A:SER:CA	9	0.21
(1,340)	1:28:A:PHE:H	1:27:A:LEU:CB	12	0.21
(1,336)	1:27:A:LEU:H	1:23:A:SER:C	4	0.21
(1,328)	1:27:A:LEU:H	1:25:A:ASN:CA	5	0.21
(1,316)	1:26:A:GLU:H	1:24:A:ILE:CA	11	0.21
(1,305)	1:25:A:ASN:H	1:23:A:SER:CB	12	0.21
(1,278)	1:22:A:ILE:H	1:60:A:SER:CA	6	0.21
(1,275)	1:22:A:ILE:H	1:22:A:ILE:CG1	6	0.21
(1,275)	1:22:A:ILE:H	1:22:A:ILE:CG1	9	0.21
(1,272)	1:22:A:ILE:H	1:21:A:LYS:CD	8	0.21
(1,268)	1:21:A:LYS:H	1:62:A:THR:CA	5	0.21
(1,239)	1:18:A:GLN:H	1:15:A:ASP:CG	6	0.21
(1,226)	1:17:A:ASP:H	1:18:A:GLN:CA	5	0.21
(1,222)	1:17:A:ASP:H	1:16:A:ARG:CG	2	0.21
(1,206)	1:15:A:ASP:H	1:14:A:LEU:CD1	5	0.21
(1,202)	1:14:A:LEU:H	1:10:A:LEU:C	5	0.21
(1,180)	1:13:A:THR:H	1:9:A:SER:CA	3	0.21
(1,161)	1:10:A:LEU:H	1:11:A:PHE:CB	2	0.21
(1,143)	1:8:A:GLN:H	1:9:A:SER:CB	9	0.21
(1,136)	1:8:A:GLN:H	1:7:A:LEU:CB	11	0.21
(1,132)	1:7:A:LEU:H	1:3:A:THR:C	5	0.21
(1,106)	1:5:A:GLN:H	1:4:A:GLU:CG	1	0.21
(1,103)	1:5:A:GLN:H	1:3:A:THR:CG2	4	0.21

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,101)	1:5:A:GLN:H	1:3:A:THR:CA	1	0.21
(1,52)	1:-5:A:VAL:H	1:-6:A:LEU:CG	6	0.21
(1,48)	1:-6:A:LEU:H	1:-6:A:LEU:CB	11	0.21
(1,36)	1:-9:A:SER:H	1:-10:A:HIS:CB	12	0.21
(1,23)	1:-12:A:HIS:H	1:-13:A:HIS:CB	8	0.21
(3,107)	1:73:A:ALA:H	1:69:A:ALA:O	5	0.2
(3,102)	1:70:A:VAL:N	1:66:A:LEU:O	7	0.2
(3,101)	1:70:A:VAL:H	1:66:A:LEU:O	10	0.2
(3,97)	1:68:A:LYS:H	1:64:A:GLU:O	2	0.2
(3,95)	1:67:A:LYS:H	1:63:A:PHE:O	4	0.2
(3,90)	1:63:A:PHE:N	1:20:A:GLY:O	5	0.2
(3,84)	1:60:A:SER:N	1:58:A:ASP:OD1	6	0.2
(3,78)	1:58:A:ASP:N	1:54:A:ASP:OD1	8	0.2
(3,73)	1:56:A:ASP:H	1:65:A:GLU:OE2	10	0.2
(3,68)	1:52:A:GLN:N	1:48:A:GLU:O	1	0.2
(3,62)	1:48:A:GLU:N	1:45:A:SER:OG	4	0.2
(3,60)	1:43:A:THR:N	1:38:A:SER:O	5	0.2
(3,57)	1:41:A:THR:H	1:37:A:ILE:O	1	0.2
(3,56)	1:40:A:GLU:N	1:36:A:VAL:O	4	0.2
(3,54)	1:39:A:SER:N	1:35:A:ALA:O	6	0.2
(3,44)	1:34:A:SER:N	1:30:A:SER:O	11	0.2
(3,31)	1:20:A:GLY:H	1:15:A:ASP:OD2	6	0.2
(3,21)	1:17:A:ASP:H	1:26:A:GLU:OE2	9	0.2
(3,16)	1:13:A:THR:N	1:9:A:SER:O	11	0.2
(3,12)	1:11:A:PHE:N	1:7:A:LEU:O	2	0.2
(3,11)	1:11:A:PHE:H	1:7:A:LEU:O	8	0.2
(3,11)	1:11:A:PHE:H	1:7:A:LEU:O	9	0.2
(3,10)	1:10:A:LEU:N	1:6:A:GLU:O	3	0.2
(3,9)	1:10:A:LEU:H	1:6:A:GLU:O	3	0.2
(1,815)	1:76:A:LEU:H	1:76:A:LEU:CB	5	0.2
(1,800)	1:74:A:SER:H	1:72:A:LYS:CA	3	0.2
(1,797)	1:73:A:ALA:H	1:74:A:SER:CA	10	0.2
(1,778)	1:72:A:LYS:H	1:69:A:ALA:CA	4	0.2
(1,767)	1:71:A:LYS:H	1:69:A:ALA:CB	4	0.2
(1,751)	1:69:A:ALA:H	1:69:A:ALA:CB	7	0.2
(1,736)	1:68:A:LYS:H	1:67:A:LYS:CB	8	0.2
(1,733)	1:68:A:LYS:H	1:64:A:GLU:CA	2	0.2
(1,714)	1:66:A:LEU:H	1:66:A:LEU:CB	8	0.2
(1,707)	1:65:A:GLU:H	1:66:A:LEU:CB	2	0.2
(1,697)	1:65:A:GLU:H	1:62:A:THR:CB	6	0.2
(1,695)	1:65:A:GLU:H	1:61:A:ILE:CG2	1	0.2
(1,685)	1:64:A:GLU:H	1:62:A:THR:CB	7	0.2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,678)	1:63:A:PHE:H	1:62:A:THR:CG2	7	0.2
(1,662)	1:61:A:ILE:H	1:22:A:ILE:C	6	0.2
(1,662)	1:61:A:ILE:H	1:22:A:ILE:C	7	0.2
(1,659)	1:61:A:ILE:H	1:61:A:ILE:CG1	7	0.2
(1,649)	1:60:A:SER:H	1:58:A:ASP:CG	12	0.2
(1,644)	1:60:A:SER:H	1:58:A:ASP:CB	3	0.2
(1,640)	1:60:A:SER:H	1:23:A:SER:CA	3	0.2
(1,621)	1:58:A:ASP:H	1:54:A:ASP:CB	2	0.2
(1,617)	1:57:A:GLN:H	1:56:A:ASP:CB	1	0.2
(1,613)	1:56:A:ASP:H	1:65:A:GLU:CG	4	0.2
(1,586)	1:53:A:TYR:H	1:52:A:GLN:CB	2	0.2
(1,570)	1:51:A:VAL:H	1:47:A:GLN:C	2	0.2
(1,529)	1:48:A:GLU:H	1:47:A:GLN:CA	8	0.2
(1,506)	1:45:A:SER:H	1:43:A:THR:CB	6	0.2
(1,502)	1:44:A:ASN:H	1:45:A:SER:CB	3	0.2
(1,502)	1:44:A:ASN:H	1:45:A:SER:CB	12	0.2
(1,498)	1:44:A:ASN:H	1:43:A:THR:CB	10	0.2
(1,485)	1:43:A:THR:H	1:39:A:SER:CA	10	0.2
(1,480)	1:42:A:ASN:H	1:41:A:THR:CG2	5	0.2
(1,477)	1:42:A:ASN:H	1:39:A:SER:CA	9	0.2
(1,476)	1:41:A:THR:H	1:37:A:ILE:C	5	0.2
(1,462)	1:41:A:THR:H	1:39:A:SER:CA	6	0.2
(1,457)	1:40:A:GLU:H	1:36:A:VAL:C	5	0.2
(1,449)	1:40:A:GLU:H	1:36:A:VAL:CG1	3	0.2
(1,441)	1:39:A:SER:H	1:36:A:VAL:CA	7	0.2
(1,415)	1:37:A:ILE:H	1:35:A:ALA:CB	8	0.2
(1,398)	1:35:A:ALA:H	1:31:A:PRO:C	2	0.2
(1,398)	1:35:A:ALA:H	1:31:A:PRO:C	6	0.2
(1,391)	1:35:A:ALA:H	1:33:A:LEU:CA	6	0.2
(1,390)	1:35:A:ALA:H	1:32:A:GLY:CA	6	0.2
(1,387)	1:34:A:SER:H	1:35:A:ALA:CB	11	0.2
(1,382)	1:34:A:SER:H	1:33:A:LEU:CG	1	0.2
(1,379)	1:34:A:SER:H	1:32:A:GLY:CA	11	0.2
(1,351)	1:29:A:LEU:H	1:25:A:ASN:C	12	0.2
(1,331)	1:27:A:LEU:H	1:26:A:GLU:CG	4	0.2
(1,322)	1:26:A:GLU:H	1:26:A:GLU:CG	11	0.2
(1,264)	1:21:A:LYS:H	1:21:A:LYS:CB	4	0.2
(1,250)	1:19:A:ASP:H	1:17:A:ASP:CG	3	0.2
(1,248)	1:19:A:ASP:H	1:20:A:GLY:CA	4	0.2
(1,230)	1:17:A:ASP:H	1:26:A:GLU:CD	9	0.2
(1,225)	1:17:A:ASP:H	1:17:A:ASP:CB	7	0.2
(1,215)	1:16:A:ARG:H	1:17:A:ASP:CB	7	0.2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,215)	1:16:A:ARG:H	1:17:A:ASP:CB	8	0.2
(1,188)	1:13:A:THR:H	1:13:A:THR:CB	12	0.2
(1,180)	1:13:A:THR:H	1:9:A:SER:CA	4	0.2
(1,154)	1:10:A:LEU:H	1:7:A:LEU:CA	1	0.2
(1,138)	1:8:A:GLN:H	1:7:A:LEU:CD1	5	0.2
(1,134)	1:8:A:GLN:H	1:5:A:GLN:CA	3	0.2
(1,105)	1:5:A:GLN:H	1:4:A:GLU:CB	8	0.2
(1,92)	1:3:A:THR:H	1:6:A:GLU:CB	2	0.2
(1,86)	1:2:A:ALA:H	1:70:A:VAL:CG1	8	0.2
(1,66)	1:-2:A:GLY:H	1:-3:A:ARG:CB	7	0.2
(1,53)	1:-5:A:VAL:H	1:-6:A:LEU:CD2	1	0.2
(1,42)	1:-8:A:SER:H	1:-8:A:SER:CB	6	0.2
(1,23)	1:-12:A:HIS:H	1:-13:A:HIS:CB	6	0.2
(3,102)	1:70:A:VAL:N	1:66:A:LEU:O	1	0.19
(3,83)	1:60:A:SER:H	1:58:A:ASP:OD1	6	0.19
(3,81)	1:59:A:GLY:H	1:54:A:ASP:OD2	6	0.19
(3,67)	1:52:A:GLN:H	1:48:A:GLU:O	1	0.19
(3,66)	1:51:A:VAL:N	1:47:A:GLN:O	3	0.19
(3,63)	1:50:A:LEU:H	1:46:A:PRO:O	1	0.19
(3,52)	1:38:A:SER:N	1:34:A:SER:O	4	0.19
(3,52)	1:38:A:SER:N	1:34:A:SER:O	5	0.19
(3,37)	1:27:A:LEU:H	1:23:A:SER:O	7	0.19
(3,16)	1:13:A:THR:N	1:9:A:SER:O	5	0.19
(3,15)	1:13:A:THR:H	1:9:A:SER:O	3	0.19
(3,12)	1:11:A:PHE:N	1:7:A:LEU:O	8	0.19
(3,8)	1:9:A:SER:N	1:5:A:GLN:O	4	0.19
(3,8)	1:9:A:SER:N	1:5:A:GLN:O	11	0.19
(3,7)	1:9:A:SER:H	1:5:A:GLN:O	9	0.19
(1,782)	1:72:A:LYS:H	1:71:A:LYS:CD	2	0.19
(1,771)	1:71:A:LYS:H	1:70:A:VAL:CG2	4	0.19
(1,771)	1:71:A:LYS:H	1:70:A:VAL:CG2	9	0.19
(1,752)	1:69:A:ALA:H	1:65:A:GLU:C	2	0.19
(1,748)	1:69:A:ALA:H	1:68:A:LYS:CB	5	0.19
(1,743)	1:68:A:LYS:H	1:69:A:ALA:CB	6	0.19
(1,736)	1:68:A:LYS:H	1:67:A:LYS:CB	12	0.19
(1,733)	1:68:A:LYS:H	1:64:A:GLU:CA	7	0.19
(1,730)	1:67:A:LYS:H	1:67:A:LYS:CD	6	0.19
(1,725)	1:67:A:LYS:H	1:66:A:LEU:CD1	8	0.19
(1,720)	1:67:A:LYS:H	1:63:A:PHE:CA	4	0.19
(1,720)	1:67:A:LYS:H	1:63:A:PHE:CA	12	0.19
(1,706)	1:65:A:GLU:H	1:65:A:GLU:CG	7	0.19
(1,700)	1:65:A:GLU:H	1:63:A:PHE:CB	10	0.19

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,699)	1:65:A:GLU:H	1:63:A:PHE:CA	12	0.19
(1,682)	1:63:A:PHE:H	1:66:A:LEU:CB	3	0.19
(1,678)	1:63:A:PHE:H	1:62:A:THR:CG2	9	0.19
(1,677)	1:63:A:PHE:H	1:62:A:THR:CB	3	0.19
(1,677)	1:63:A:PHE:H	1:62:A:THR:CB	5	0.19
(1,671)	1:62:A:THR:H	1:65:A:GLU:CG	3	0.19
(1,652)	1:61:A:ILE:H	1:22:A:ILE:CG1	9	0.19
(1,648)	1:60:A:SER:H	1:61:A:ILE:CG1	8	0.19
(1,633)	1:58:A:ASP:H	1:58:A:ASP:CG	7	0.19
(1,632)	1:58:A:ASP:N	1:58:A:ASP:OD1	7	0.19
(1,619)	1:57:A:GLN:H	1:57:A:GLN:CB	12	0.19
(1,615)	1:57:A:GLN:H	1:54:A:ASP:CB	12	0.19
(1,605)	1:56:A:ASP:H	1:54:A:ASP:CA	9	0.19
(1,600)	1:55:A:SER:H	1:54:A:ASP:CB	5	0.19
(1,600)	1:55:A:SER:H	1:54:A:ASP:CB	6	0.19
(1,592)	1:54:A:ASP:H	1:50:A:LEU:CA	1	0.19
(1,575)	1:52:A:GLN:H	1:51:A:VAL:CB	7	0.19
(1,556)	1:51:A:VAL:H	1:47:A:GLN:CG	2	0.19
(1,548)	1:50:A:LEU:H	1:49:A:LEU:CB	4	0.19
(1,537)	1:49:A:LEU:H	1:46:A:PRO:CA	9	0.19
(1,530)	1:48:A:GLU:H	1:47:A:GLN:CB	8	0.19
(1,521)	1:47:A:GLN:H	1:46:A:PRO:CG	8	0.19
(1,515)	1:45:A:SER:H	1:48:A:GLU:CG	5	0.19
(1,515)	1:45:A:SER:H	1:48:A:GLU:CG	9	0.19
(1,514)	1:45:A:SER:H	1:48:A:GLU:CB	7	0.19
(1,512)	1:45:A:SER:H	1:46:A:PRO:CD	5	0.19
(1,493)	1:43:A:THR:H	1:43:A:THR:CG2	5	0.19
(1,487)	1:43:A:THR:H	1:41:A:THR:CB	1	0.19
(1,487)	1:43:A:THR:H	1:41:A:THR:CB	2	0.19
(1,486)	1:43:A:THR:H	1:41:A:THR:CA	5	0.19
(1,462)	1:41:A:THR:H	1:39:A:SER:CA	9	0.19
(1,461)	1:41:A:THR:H	1:38:A:SER:CB	8	0.19
(1,458)	1:41:A:THR:H	1:37:A:ILE:CA	5	0.19
(1,456)	1:40:A:GLU:H	1:41:A:THR:CG2	2	0.19
(1,454)	1:40:A:GLU:H	1:40:A:GLU:CB	12	0.19
(1,450)	1:40:A:GLU:H	1:37:A:ILE:CA	1	0.19
(1,446)	1:39:A:SER:H	1:40:A:GLU:CB	8	0.19
(1,426)	1:37:A:ILE:H	1:38:A:SER:CB	12	0.19
(1,418)	1:37:A:ILE:H	1:36:A:VAL:CG1	7	0.19
(1,390)	1:35:A:ALA:H	1:32:A:GLY:CA	11	0.19
(1,378)	1:34:A:SER:H	1:31:A:PRO:CA	5	0.19
(1,355)	1:30:A:SER:H	1:28:A:PHE:CB	10	0.19

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,344)	1:28:A:PHE:H	1:24:A:ILE:C	6	0.19
(1,335)	1:27:A:LEU:H	1:28:A:PHE:CB	8	0.19
(1,330)	1:27:A:LEU:H	1:26:A:GLU:CB	4	0.19
(1,328)	1:27:A:LEU:H	1:25:A:ASN:CA	7	0.19
(1,327)	1:27:A:LEU:H	1:24:A:ILE:CA	7	0.19
(1,327)	1:27:A:LEU:H	1:24:A:ILE:CA	11	0.19
(1,313)	1:26:A:GLU:H	1:22:A:ILE:CA	1	0.19
(1,255)	1:20:A:GLY:H	1:18:A:GLN:CA	7	0.19
(1,252)	1:19:A:ASP:N	1:19:A:ASP:OD1	11	0.19
(1,214)	1:16:A:ARG:H	1:16:A:ARG:CB	1	0.19
(1,212)	1:16:A:ARG:H	1:15:A:ASP:CB	10	0.19
(1,192)	1:13:A:THR:H	1:9:A:SER:C	3	0.19
(1,171)	1:11:A:PHE:H	1:7:A:LEU:C	5	0.19
(1,162)	1:10:A:LEU:H	1:6:A:GLU:C	6	0.19
(1,161)	1:10:A:LEU:H	1:11:A:PHE:CB	3	0.19
(1,148)	1:9:A:SER:H	1:8:A:GLN:CB	1	0.19
(1,144)	1:8:A:GLN:H	1:4:A:GLU:C	8	0.19
(1,119)	1:6:A:GLU:H	1:6:A:GLU:CG	5	0.19
(1,106)	1:5:A:GLN:H	1:4:A:GLU:CG	3	0.19
(1,86)	1:2:A:ALA:H	1:70:A:VAL:CG1	7	0.19
(1,66)	1:-2:A:GLY:H	1:-3:A:ARG:CB	11	0.19
(1,51)	1:-5:A:VAL:H	1:-6:A:LEU:CB	12	0.19
(1,38)	1:-9:A:SER:H	1:-9:A:SER:CB	12	0.19
(1,23)	1:-12:A:HIS:H	1:-13:A:HIS:CB	7	0.19
(3,84)	1:60:A:SER:N	1:58:A:ASP:OD1	8	0.18
(3,83)	1:60:A:SER:H	1:58:A:ASP:OD1	1	0.18
(3,79)	1:58:A:ASP:H	1:56:A:ASP:OD1	9	0.18
(3,78)	1:58:A:ASP:N	1:54:A:ASP:OD1	3	0.18
(3,73)	1:56:A:ASP:H	1:65:A:GLU:OE2	4	0.18
(3,71)	1:54:A:ASP:H	1:50:A:LEU:O	11	0.18
(3,68)	1:52:A:GLN:N	1:48:A:GLU:O	8	0.18
(3,68)	1:52:A:GLN:N	1:48:A:GLU:O	11	0.18
(3,66)	1:51:A:VAL:N	1:47:A:GLN:O	8	0.18
(3,53)	1:39:A:SER:H	1:35:A:ALA:O	2	0.18
(3,51)	1:38:A:SER:H	1:34:A:SER:O	3	0.18
(3,47)	1:36:A:VAL:H	1:32:A:GLY:O	7	0.18
(3,40)	1:28:A:PHE:N	1:24:A:ILE:O	6	0.18
(3,34)	1:22:A:ILE:N	1:61:A:ILE:O	11	0.18
(3,31)	1:20:A:GLY:H	1:15:A:ASP:OD2	11	0.18
(3,28)	1:19:A:ASP:N	1:15:A:ASP:OD1	12	0.18
(3,16)	1:13:A:THR:N	1:9:A:SER:O	3	0.18
(3,14)	1:12:A:ASN:N	1:8:A:GLN:O	7	0.18

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,10)	1:10:A:LEU:N	1:6:A:GLU:O	8	0.18
(3,9)	1:10:A:LEU:H	1:6:A:GLU:O	7	0.18
(3,7)	1:9:A:SER:H	1:5:A:GLN:O	4	0.18
(1,769)	1:71:A:LYS:H	1:70:A:VAL:CB	8	0.18
(1,748)	1:69:A:ALA:H	1:68:A:LYS:CB	7	0.18
(1,731)	1:67:A:LYS:H	1:68:A:LYS:CB	12	0.18
(1,729)	1:67:A:LYS:H	1:67:A:LYS:CG	2	0.18
(1,718)	1:66:A:LEU:H	1:67:A:LYS:CB	9	0.18
(1,717)	1:66:A:LEU:H	1:66:A:LEU:CD2	12	0.18
(1,712)	1:66:A:LEU:H	1:65:A:GLU:CG	8	0.18
(1,696)	1:65:A:GLU:H	1:62:A:THR:CA	7	0.18
(1,686)	1:64:A:GLU:H	1:62:A:THR:CG2	7	0.18
(1,682)	1:63:A:PHE:H	1:66:A:LEU:CB	11	0.18
(1,656)	1:61:A:ILE:H	1:60:A:SER:CB	2	0.18
(1,643)	1:60:A:SER:H	1:58:A:ASP:CA	2	0.18
(1,633)	1:58:A:ASP:H	1:58:A:ASP:CG	5	0.18
(1,632)	1:58:A:ASP:N	1:58:A:ASP:OD1	9	0.18
(1,619)	1:57:A:GLN:H	1:57:A:GLN:CB	5	0.18
(1,613)	1:56:A:ASP:H	1:65:A:GLU:CG	10	0.18
(1,610)	1:56:A:ASP:H	1:56:A:ASP:CB	10	0.18
(1,576)	1:52:A:GLN:H	1:51:A:VAL:CG1	1	0.18
(1,555)	1:51:A:VAL:H	1:47:A:GLN:CA	7	0.18
(1,549)	1:50:A:LEU:H	1:49:A:LEU:CD1	12	0.18
(1,527)	1:48:A:GLU:H	1:43:A:THR:CB	10	0.18
(1,522)	1:47:A:GLN:H	1:46:A:PRO:CD	6	0.18
(1,517)	1:47:A:GLN:H	1:45:A:SER:CA	4	0.18
(1,515)	1:45:A:SER:H	1:48:A:GLU:CG	6	0.18
(1,509)	1:45:A:SER:H	1:44:A:ASN:CB	10	0.18
(1,506)	1:45:A:SER:H	1:43:A:THR:CB	10	0.18
(1,495)	1:43:A:THR:H	1:49:A:LEU:CD2	8	0.18
(1,493)	1:43:A:THR:H	1:43:A:THR:CG2	8	0.18
(1,478)	1:42:A:ASN:H	1:40:A:GLU:CA	11	0.18
(1,464)	1:41:A:THR:H	1:40:A:GLU:CA	8	0.18
(1,462)	1:41:A:THR:H	1:39:A:SER:CA	12	0.18
(1,456)	1:40:A:GLU:H	1:41:A:THR:CG2	9	0.18
(1,433)	1:38:A:SER:H	1:37:A:ILE:CG1	8	0.18
(1,415)	1:37:A:ILE:H	1:35:A:ALA:CB	2	0.18
(1,414)	1:37:A:ILE:H	1:35:A:ALA:CA	5	0.18
(1,414)	1:37:A:ILE:H	1:35:A:ALA:CA	6	0.18
(1,407)	1:36:A:VAL:H	1:37:A:ILE:CG1	12	0.18
(1,400)	1:36:A:VAL:H	1:33:A:LEU:CA	6	0.18
(1,383)	1:34:A:SER:H	1:33:A:LEU:CD1	3	0.18

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,381)	1:34:A:SER:H	1:33:A:LEU:CB	1	0.18
(1,348)	1:29:A:LEU:H	1:28:A:PHE:CB	7	0.18
(1,346)	1:29:A:LEU:H	1:26:A:GLU:CA	5	0.18
(1,338)	1:28:A:PHE:H	1:25:A:ASN:CA	1	0.18
(1,323)	1:26:A:GLU:H	1:27:A:LEU:CB	12	0.18
(1,322)	1:26:A:GLU:H	1:26:A:GLU:CG	1	0.18
(1,312)	1:25:A:ASN:H	1:26:A:GLU:CG	1	0.18
(1,300)	1:24:A:ILE:H	1:25:A:ASN:CB	6	0.18
(1,297)	1:24:A:ILE:H	1:24:A:ILE:CG1	7	0.18
(1,275)	1:22:A:ILE:H	1:22:A:ILE:CG1	4	0.18
(1,252)	1:19:A:ASP:N	1:19:A:ASP:OD1	5	0.18
(1,231)	1:18:A:GLN:H	1:15:A:ASP:CB	1	0.18
(1,229)	1:17:A:ASP:H	1:26:A:GLU:CG	3	0.18
(1,225)	1:17:A:ASP:H	1:17:A:ASP:CB	6	0.18
(1,212)	1:16:A:ARG:H	1:15:A:ASP:CB	2	0.18
(1,172)	1:12:A:ASN:H	1:8:A:GLN:CA	5	0.18
(1,161)	1:10:A:LEU:H	1:11:A:PHE:CB	6	0.18
(1,159)	1:10:A:LEU:H	1:10:A:LEU:CG	10	0.18
(1,153)	1:9:A:SER:H	1:5:A:GLN:C	9	0.18
(1,146)	1:9:A:SER:H	1:6:A:GLU:CA	8	0.18
(1,120)	1:6:A:GLU:H	1:7:A:LEU:CB	1	0.18
(1,120)	1:6:A:GLU:H	1:7:A:LEU:CB	5	0.18
(1,106)	1:5:A:GLN:H	1:4:A:GLU:CG	11	0.18
(1,79)	1:1:A:MET:H	1:1:A:MET:CG	12	0.18
(1,66)	1:-2:A:GLY:H	1:-3:A:ARG:CB	1	0.18
(1,63)	1:-3:A:ARG:H	1:-3:A:ARG:CG	12	0.18
(1,48)	1:-6:A:LEU:H	1:-6:A:LEU:CB	4	0.18
(1,38)	1:-9:A:SER:H	1:-9:A:SER:CB	2	0.18
(3,93)	1:66:A:LEU:H	1:62:A:THR:O	1	0.17
(3,82)	1:59:A:GLY:N	1:54:A:ASP:OD2	11	0.17
(3,81)	1:59:A:GLY:H	1:54:A:ASP:OD2	7	0.17
(3,69)	1:53:A:TYR:H	1:49:A:LEU:O	6	0.17
(3,65)	1:51:A:VAL:H	1:47:A:GLN:O	7	0.17
(3,54)	1:39:A:SER:N	1:35:A:ALA:O	9	0.17
(3,31)	1:20:A:GLY:H	1:15:A:ASP:OD2	1	0.17
(3,29)	1:19:A:ASP:H	1:17:A:ASP:OD1	3	0.17
(3,23)	1:18:A:GLN:H	1:15:A:ASP:O	11	0.17
(3,22)	1:17:A:ASP:N	1:26:A:GLU:OE2	9	0.17
(3,15)	1:13:A:THR:H	1:9:A:SER:O	11	0.17
(3,12)	1:11:A:PHE:N	1:7:A:LEU:O	9	0.17
(3,8)	1:9:A:SER:N	1:5:A:GLN:O	6	0.17
(3,7)	1:9:A:SER:H	1:5:A:GLN:O	12	0.17

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,5)	1:8:A:GLN:H	1:4:A:GLU:O	8	0.17
(1,793)	1:73:A:ALA:H	1:72:A:LYS:CG	6	0.17
(1,789)	1:73:A:ALA:H	1:69:A:ALA:CA	12	0.17
(1,760)	1:70:A:VAL:H	1:70:A:VAL:CB	8	0.17
(1,754)	1:70:A:VAL:H	1:66:A:LEU:CD1	1	0.17
(1,753)	1:70:A:VAL:H	1:66:A:LEU:CA	4	0.17
(1,753)	1:70:A:VAL:H	1:66:A:LEU:CA	7	0.17
(1,745)	1:69:A:ALA:H	1:66:A:LEU:CA	1	0.17
(1,736)	1:68:A:LYS:H	1:67:A:LYS:CB	2	0.17
(1,724)	1:67:A:LYS:H	1:66:A:LEU:CG	7	0.17
(1,721)	1:67:A:LYS:H	1:64:A:GLU:CA	12	0.17
(1,717)	1:66:A:LEU:H	1:66:A:LEU:CD2	5	0.17
(1,715)	1:66:A:LEU:H	1:66:A:LEU:CG	3	0.17
(1,707)	1:65:A:GLU:H	1:66:A:LEU:CB	10	0.17
(1,700)	1:65:A:GLU:H	1:63:A:PHE:CB	7	0.17
(1,699)	1:65:A:GLU:H	1:63:A:PHE:CA	6	0.17
(1,695)	1:65:A:GLU:H	1:61:A:ILE:CG2	4	0.17
(1,695)	1:65:A:GLU:H	1:61:A:ILE:CG2	8	0.17
(1,688)	1:64:A:GLU:H	1:63:A:PHE:CB	5	0.17
(1,678)	1:63:A:PHE:H	1:62:A:THR:CG2	2	0.17
(1,677)	1:63:A:PHE:H	1:62:A:THR:CB	4	0.17
(1,661)	1:61:A:ILE:H	1:61:A:ILE:CD1	8	0.17
(1,644)	1:60:A:SER:H	1:58:A:ASP:CB	2	0.17
(1,611)	1:56:A:ASP:H	1:57:A:GLN:CA	12	0.17
(1,585)	1:53:A:TYR:H	1:52:A:GLN:CA	8	0.17
(1,581)	1:52:A:GLN:H	1:48:A:GLU:C	1	0.17
(1,575)	1:52:A:GLN:H	1:51:A:VAL:CB	8	0.17
(1,571)	1:52:A:GLN:H	1:48:A:GLU:CA	2	0.17
(1,568)	1:51:A:VAL:H	1:51:A:VAL:CG2	1	0.17
(1,564)	1:51:A:VAL:H	1:50:A:LEU:CD2	6	0.17
(1,563)	1:51:A:VAL:H	1:50:A:LEU:CD1	4	0.17
(1,554)	1:50:A:LEU:H	1:46:A:PRO:C	8	0.17
(1,539)	1:49:A:LEU:H	1:48:A:GLU:CB	12	0.17
(1,528)	1:48:A:GLU:H	1:45:A:SER:CB	9	0.17
(1,512)	1:45:A:SER:H	1:46:A:PRO:CD	10	0.17
(1,506)	1:45:A:SER:H	1:43:A:THR:CB	7	0.17
(1,503)	1:44:A:ASN:H	1:48:A:GLU:CB	5	0.17
(1,488)	1:43:A:THR:H	1:41:A:THR:CG2	8	0.17
(1,487)	1:43:A:THR:H	1:41:A:THR:CB	10	0.17
(1,485)	1:43:A:THR:H	1:39:A:SER:CA	4	0.17
(1,485)	1:43:A:THR:H	1:39:A:SER:CA	9	0.17
(1,482)	1:42:A:ASN:H	1:42:A:ASN:CB	7	0.17

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,470)	1:41:A:THR:H	1:42:A:ASN:CA	8	0.17
(1,459)	1:41:A:THR:H	1:37:A:ILE:CG2	1	0.17
(1,459)	1:41:A:THR:H	1:37:A:ILE:CG2	12	0.17
(1,449)	1:40:A:GLU:H	1:36:A:VAL:CG1	5	0.17
(1,443)	1:39:A:SER:H	1:38:A:SER:CB	2	0.17
(1,443)	1:39:A:SER:H	1:38:A:SER:CB	5	0.17
(1,440)	1:39:A:SER:H	1:35:A:ALA:CA	12	0.17
(1,438)	1:38:A:SER:H	1:39:A:SER:CB	9	0.17
(1,419)	1:37:A:ILE:H	1:36:A:VAL:CG2	2	0.17
(1,414)	1:37:A:ILE:H	1:35:A:ALA:CA	12	0.17
(1,408)	1:36:A:VAL:H	1:32:A:GLY:C	3	0.17
(1,406)	1:36:A:VAL:H	1:36:A:VAL:CG2	8	0.17
(1,400)	1:36:A:VAL:H	1:33:A:LEU:CA	9	0.17
(1,399)	1:36:A:VAL:H	1:32:A:GLY:CA	1	0.17
(1,393)	1:35:A:ALA:H	1:34:A:SER:CB	11	0.17
(1,390)	1:35:A:ALA:H	1:32:A:GLY:CA	3	0.17
(1,389)	1:35:A:ALA:H	1:31:A:PRO:CA	2	0.17
(1,381)	1:34:A:SER:H	1:33:A:LEU:CB	6	0.17
(1,379)	1:34:A:SER:H	1:32:A:GLY:CA	1	0.17
(1,379)	1:34:A:SER:H	1:32:A:GLY:CA	7	0.17
(1,354)	1:30:A:SER:H	1:28:A:PHE:CA	2	0.17
(1,340)	1:28:A:PHE:H	1:27:A:LEU:CB	6	0.17
(1,337)	1:28:A:PHE:H	1:24:A:ILE:CA	6	0.17
(1,308)	1:25:A:ASN:H	1:24:A:ILE:CG1	5	0.17
(1,255)	1:20:A:GLY:H	1:18:A:GLN:CA	8	0.17
(1,252)	1:19:A:ASP:N	1:19:A:ASP:OD1	4	0.17
(1,251)	1:19:A:ASP:H	1:19:A:ASP:OD1	7	0.17
(1,249)	1:19:A:ASP:H	1:15:A:ASP:CG	5	0.17
(1,241)	1:19:A:ASP:H	1:17:A:ASP:CA	11	0.17
(1,238)	1:18:A:GLN:H	1:15:A:ASP:C	12	0.17
(1,225)	1:17:A:ASP:H	1:17:A:ASP:CB	3	0.17
(1,225)	1:17:A:ASP:H	1:17:A:ASP:CB	5	0.17
(1,221)	1:17:A:ASP:H	1:16:A:ARG:CB	2	0.17
(1,214)	1:16:A:ARG:H	1:16:A:ARG:CB	2	0.17
(1,198)	1:14:A:LEU:H	1:13:A:THR:CG2	1	0.17
(1,180)	1:13:A:THR:H	1:9:A:SER:CA	1	0.17
(1,176)	1:12:A:ASN:H	1:11:A:PHE:CB	1	0.17
(1,172)	1:12:A:ASN:H	1:8:A:GLN:CA	1	0.17
(1,171)	1:11:A:PHE:H	1:7:A:LEU:C	1	0.17
(1,161)	1:10:A:LEU:H	1:11:A:PHE:CB	5	0.17
(1,154)	1:10:A:LEU:H	1:7:A:LEU:CA	2	0.17
(1,143)	1:8:A:GLN:H	1:9:A:SER:CB	2	0.17

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,137)	1:8:A:GLN:H	1:7:A:LEU:CG	11	0.17
(1,133)	1:8:A:GLN:H	1:4:A:GLU:CA	4	0.17
(1,118)	1:6:A:GLU:H	1:6:A:GLU:CB	4	0.17
(1,106)	1:5:A:GLN:H	1:4:A:GLU:CG	4	0.17
(1,106)	1:5:A:GLN:H	1:4:A:GLU:CG	12	0.17
(1,105)	1:5:A:GLN:H	1:4:A:GLU:CB	12	0.17
(1,90)	1:3:A:THR:H	1:3:A:THR:CB	8	0.17
(1,64)	1:-3:A:ARG:H	1:-3:A:ARG:CD	7	0.17
(1,42)	1:-8:A:SER:H	1:-8:A:SER:CB	5	0.17
(1,11)	1:-15:A:HIS:H	1:-16:A:SER:CB	1	0.17
(1,11)	1:-15:A:HIS:H	1:-16:A:SER:CB	3	0.17
(1,9)	1:-16:A:SER:H	1:-16:A:SER:CB	9	0.17
(3,108)	1:73:A:ALA:N	1:69:A:ALA:O	5	0.16
(3,97)	1:68:A:LYS:H	1:64:A:GLU:O	10	0.16
(3,94)	1:66:A:LEU:N	1:62:A:THR:O	1	0.16
(3,84)	1:60:A:SER:N	1:58:A:ASP:OD1	5	0.16
(3,77)	1:58:A:ASP:H	1:54:A:ASP:OD1	6	0.16
(3,68)	1:52:A:GLN:N	1:48:A:GLU:O	2	0.16
(3,56)	1:40:A:GLU:N	1:36:A:VAL:O	8	0.16
(3,54)	1:39:A:SER:N	1:35:A:ALA:O	2	0.16
(3,53)	1:39:A:SER:H	1:35:A:ALA:O	9	0.16
(3,49)	1:37:A:ILE:H	1:33:A:LEU:O	4	0.16
(3,47)	1:36:A:VAL:H	1:32:A:GLY:O	4	0.16
(3,9)	1:10:A:LEU:H	1:6:A:GLU:O	10	0.16
(3,8)	1:9:A:SER:N	1:5:A:GLN:O	9	0.16
(1,815)	1:76:A:LEU:H	1:76:A:LEU:CB	4	0.16
(1,781)	1:72:A:LYS:H	1:71:A:LYS:CG	1	0.16
(1,780)	1:72:A:LYS:H	1:71:A:LYS:CB	8	0.16
(1,764)	1:70:A:VAL:H	1:66:A:LEU:C	10	0.16
(1,758)	1:70:A:VAL:H	1:69:A:ALA:CB	8	0.16
(1,756)	1:70:A:VAL:H	1:68:A:LYS:CB	3	0.16
(1,754)	1:70:A:VAL:H	1:66:A:LEU:CD1	12	0.16
(1,724)	1:67:A:LYS:H	1:66:A:LEU:CG	4	0.16
(1,722)	1:67:A:LYS:H	1:66:A:LEU:CA	4	0.16
(1,721)	1:67:A:LYS:H	1:64:A:GLU:CA	5	0.16
(1,720)	1:67:A:LYS:H	1:63:A:PHE:CA	7	0.16
(1,715)	1:66:A:LEU:H	1:66:A:LEU:CG	8	0.16
(1,706)	1:65:A:GLU:H	1:65:A:GLU:CG	1	0.16
(1,693)	1:64:A:GLU:H	1:65:A:GLU:CG	11	0.16
(1,682)	1:63:A:PHE:H	1:66:A:LEU:CB	2	0.16
(1,665)	1:62:A:THR:H	1:61:A:ILE:CG1	5	0.16
(1,659)	1:61:A:ILE:H	1:61:A:ILE:CG1	8	0.16

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,650)	1:61:A:ILE:H	1:21:A:LYS:CA	2	0.16
(1,648)	1:60:A:SER:H	1:61:A:ILE:CG1	2	0.16
(1,637)	1:59:A:GLY:H	1:58:A:ASP:CB	6	0.16
(1,633)	1:58:A:ASP:H	1:58:A:ASP:CG	8	0.16
(1,617)	1:57:A:GLN:H	1:56:A:ASP:CB	2	0.16
(1,612)	1:56:A:ASP:H	1:57:A:GLN:CB	4	0.16
(1,594)	1:54:A:ASP:H	1:53:A:TYR:CA	5	0.16
(1,592)	1:54:A:ASP:H	1:50:A:LEU:CA	11	0.16
(1,582)	1:53:A:TYR:H	1:49:A:LEU:CA	6	0.16
(1,570)	1:51:A:VAL:H	1:47:A:GLN:C	3	0.16
(1,569)	1:51:A:VAL:H	1:52:A:GLN:CB	3	0.16
(1,530)	1:48:A:GLU:H	1:47:A:GLN:CB	2	0.16
(1,527)	1:48:A:GLU:H	1:43:A:THR:CB	2	0.16
(1,512)	1:45:A:SER:H	1:46:A:PRO:CD	4	0.16
(1,503)	1:44:A:ASN:H	1:48:A:GLU:CB	10	0.16
(1,502)	1:44:A:ASN:H	1:45:A:SER:CB	2	0.16
(1,488)	1:43:A:THR:H	1:41:A:THR:CG2	2	0.16
(1,486)	1:43:A:THR:H	1:41:A:THR:CA	4	0.16
(1,483)	1:43:A:THR:H	1:38:A:SER:CA	8	0.16
(1,477)	1:42:A:ASN:H	1:39:A:SER:CA	8	0.16
(1,460)	1:41:A:THR:H	1:38:A:SER:CA	9	0.16
(1,458)	1:41:A:THR:H	1:37:A:ILE:CA	2	0.16
(1,448)	1:40:A:GLU:H	1:36:A:VAL:CA	4	0.16
(1,447)	1:39:A:SER:H	1:35:A:ALA:C	1	0.16
(1,446)	1:39:A:SER:H	1:40:A:GLU:CB	4	0.16
(1,440)	1:39:A:SER:H	1:35:A:ALA:CA	2	0.16
(1,432)	1:38:A:SER:H	1:37:A:ILE:CB	6	0.16
(1,428)	1:38:A:SER:H	1:34:A:SER:CA	1	0.16
(1,426)	1:37:A:ILE:H	1:38:A:SER:CB	7	0.16
(1,425)	1:37:A:ILE:H	1:38:A:SER:CA	6	0.16
(1,415)	1:37:A:ILE:H	1:35:A:ALA:CB	7	0.16
(1,407)	1:36:A:VAL:H	1:37:A:ILE:CG1	5	0.16
(1,406)	1:36:A:VAL:H	1:36:A:VAL:CG2	9	0.16
(1,399)	1:36:A:VAL:H	1:32:A:GLY:CA	4	0.16
(1,396)	1:35:A:ALA:H	1:36:A:VAL:CG2	5	0.16
(1,354)	1:30:A:SER:H	1:28:A:PHE:CA	1	0.16
(1,339)	1:28:A:PHE:H	1:27:A:LEU:CA	4	0.16
(1,322)	1:26:A:GLU:H	1:26:A:GLU:CG	2	0.16
(1,316)	1:26:A:GLU:H	1:24:A:ILE:CA	2	0.16
(1,284)	1:22:A:ILE:H	1:61:A:ILE:C	2	0.16
(1,284)	1:22:A:ILE:H	1:61:A:ILE:C	4	0.16
(1,284)	1:22:A:ILE:H	1:61:A:ILE:C	5	0.16

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,268)	1:21:A:LYS:H	1:62:A:THR:CA	9	0.16
(1,192)	1:13:A:THR:H	1:9:A:SER:C	10	0.16
(1,190)	1:13:A:THR:H	1:14:A:LEU:CA	6	0.16
(1,189)	1:13:A:THR:H	1:13:A:THR:CG2	12	0.16
(1,176)	1:12:A:ASN:H	1:11:A:PHE:CB	8	0.16
(1,173)	1:12:A:ASN:H	1:8:A:GLN:CG	5	0.16
(1,171)	1:11:A:PHE:H	1:7:A:LEU:C	9	0.16
(1,168)	1:11:A:PHE:H	1:10:A:LEU:CD2	7	0.16
(1,167)	1:11:A:PHE:H	1:10:A:LEU:CD1	7	0.16
(1,166)	1:11:A:PHE:H	1:10:A:LEU:CG	10	0.16
(1,163)	1:11:A:PHE:H	1:8:A:GLN:CA	7	0.16
(1,162)	1:10:A:LEU:H	1:6:A:GLU:C	2	0.16
(1,162)	1:10:A:LEU:H	1:6:A:GLU:C	8	0.16
(1,161)	1:10:A:LEU:H	1:11:A:PHE:CB	8	0.16
(1,159)	1:10:A:LEU:H	1:10:A:LEU:CG	5	0.16
(1,152)	1:9:A:SER:H	1:10:A:LEU:CB	6	0.16
(1,146)	1:9:A:SER:H	1:6:A:GLU:CA	6	0.16
(1,127)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:CB	2	0.16
(1,111)	1:6:A:GLU:H	1:2:A:ALA:CB	8	0.16
(1,91)	1:3:A:THR:H	1:3:A:THR:CG2	1	0.16
(1,88)	1:3:A:THR:H	1:2:A:ALA:CB	12	0.16
(1,83)	1:2:A:ALA:H	1:2:A:ALA:CB	7	0.16
(1,76)	1:1:A:MET:H	1:0:A:HIS:CA	7	0.16
(1,67)	1:-2:A:GLY:H	1:-3:A:ARG:CG	7	0.16
(1,60)	1:-3:A:ARG:H	1:-4:A:PRO:CB	6	0.16
(1,44)	1:-7:A:GLY:H	1:-8:A:SER:CB	4	0.16
(1,11)	1:-15:A:HIS:H	1:-16:A:SER:CB	12	0.16
(1,7)	1:-16:A:SER:H	1:-17:A:SER:CB	6	0.16
(3,93)	1:66:A:LEU:H	1:62:A:THR:O	2	0.15
(3,87)	1:62:A:THR:H	1:65:A:GLU:OE1	1	0.15
(3,87)	1:62:A:THR:H	1:65:A:GLU:OE1	2	0.15
(3,85)	1:61:A:ILE:H	1:22:A:ILE:O	3	0.15
(3,76)	1:57:A:GLN:N	1:54:A:ASP:O	7	0.15
(3,67)	1:52:A:GLN:H	1:48:A:GLU:O	2	0.15
(3,65)	1:51:A:VAL:H	1:47:A:GLN:O	3	0.15
(3,64)	1:50:A:LEU:N	1:46:A:PRO:O	1	0.15
(3,55)	1:40:A:GLU:H	1:36:A:VAL:O	8	0.15
(3,52)	1:38:A:SER:N	1:34:A:SER:O	3	0.15
(3,48)	1:36:A:VAL:N	1:32:A:GLY:O	4	0.15
(3,39)	1:28:A:PHE:H	1:24:A:ILE:O	6	0.15
(3,38)	1:27:A:LEU:N	1:23:A:SER:O	7	0.15
(3,12)	1:11:A:PHE:N	1:7:A:LEU:O	5	0.15

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,11)	1:11:A:PHE:H	1:7:A:LEU:O	5	0.15
(3,6)	1:8:A:GLN:N	1:4:A:GLU:O	11	0.15
(1,800)	1:74:A:SER:H	1:72:A:LYS:CA	5	0.15
(1,796)	1:73:A:ALA:H	1:73:A:ALA:CB	8	0.15
(1,782)	1:72:A:LYS:H	1:71:A:LYS:CD	12	0.15
(1,771)	1:71:A:LYS:H	1:70:A:VAL:CG2	8	0.15
(1,769)	1:71:A:LYS:H	1:70:A:VAL:CB	9	0.15
(1,766)	1:71:A:LYS:H	1:68:A:LYS:CA	4	0.15
(1,762)	1:70:A:VAL:H	1:70:A:VAL:CG2	5	0.15
(1,745)	1:69:A:ALA:H	1:66:A:LEU:CA	3	0.15
(1,735)	1:68:A:LYS:H	1:67:A:LYS:CA	9	0.15
(1,734)	1:68:A:LYS:H	1:65:A:GLU:CA	8	0.15
(1,733)	1:68:A:LYS:H	1:64:A:GLU:CA	12	0.15
(1,731)	1:67:A:LYS:H	1:68:A:LYS:CB	3	0.15
(1,725)	1:67:A:LYS:H	1:66:A:LEU:CD1	2	0.15
(1,725)	1:67:A:LYS:H	1:66:A:LEU:CD1	7	0.15
(1,724)	1:67:A:LYS:H	1:66:A:LEU:CG	12	0.15
(1,720)	1:67:A:LYS:H	1:63:A:PHE:CA	5	0.15
(1,716)	1:66:A:LEU:H	1:66:A:LEU:CD1	5	0.15
(1,703)	1:65:A:GLU:H	1:64:A:GLU:CG	6	0.15
(1,700)	1:65:A:GLU:H	1:63:A:PHE:CB	8	0.15
(1,699)	1:65:A:GLU:H	1:63:A:PHE:CA	5	0.15
(1,698)	1:65:A:GLU:H	1:62:A:THR:CG2	5	0.15
(1,697)	1:65:A:GLU:H	1:62:A:THR:CB	1	0.15
(1,695)	1:65:A:GLU:H	1:61:A:ILE:CG2	7	0.15
(1,678)	1:63:A:PHE:H	1:62:A:THR:CG2	11	0.15
(1,665)	1:62:A:THR:H	1:61:A:ILE:CG1	1	0.15
(1,662)	1:61:A:ILE:H	1:22:A:ILE:C	2	0.15
(1,656)	1:61:A:ILE:H	1:60:A:SER:CB	12	0.15
(1,654)	1:61:A:ILE:H	1:23:A:SER:CA	2	0.15
(1,652)	1:61:A:ILE:H	1:22:A:ILE:CG1	12	0.15
(1,649)	1:60:A:SER:H	1:58:A:ASP:CG	2	0.15
(1,643)	1:60:A:SER:H	1:58:A:ASP:CA	3	0.15
(1,636)	1:59:A:GLY:H	1:58:A:ASP:CA	11	0.15
(1,628)	1:58:A:ASP:H	1:59:A:GLY:CA	10	0.15
(1,625)	1:58:A:ASP:H	1:57:A:GLN:CG	9	0.15
(1,624)	1:58:A:ASP:H	1:57:A:GLN:CB	1	0.15
(1,617)	1:57:A:GLN:H	1:56:A:ASP:CB	10	0.15
(1,613)	1:56:A:ASP:H	1:65:A:GLU:CG	2	0.15
(1,613)	1:56:A:ASP:H	1:65:A:GLU:CG	5	0.15
(1,606)	1:56:A:ASP:H	1:54:A:ASP:CB	6	0.15
(1,602)	1:55:A:SER:H	1:55:A:SER:CB	5	0.15

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,602)	1:55:A:SER:H	1:55:A:SER:CB	10	0.15
(1,600)	1:55:A:SER:H	1:54:A:ASP:CB	8	0.15
(1,598)	1:54:A:ASP:H	1:50:A:LEU:C	11	0.15
(1,590)	1:53:A:TYR:H	1:54:A:ASP:CB	7	0.15
(1,587)	1:53:A:TYR:H	1:52:A:GLN:CG	7	0.15
(1,584)	1:53:A:TYR:H	1:50:A:LEU:CD1	1	0.15
(1,582)	1:53:A:TYR:H	1:49:A:LEU:CA	9	0.15
(1,577)	1:52:A:GLN:H	1:51:A:VAL:CG2	11	0.15
(1,576)	1:52:A:GLN:H	1:51:A:VAL:CG1	4	0.15
(1,559)	1:51:A:VAL:H	1:49:A:LEU:CB	2	0.15
(1,554)	1:50:A:LEU:H	1:46:A:PRO:C	2	0.15
(1,553)	1:50:A:LEU:H	1:51:A:VAL:CG2	2	0.15
(1,527)	1:48:A:GLU:H	1:43:A:THR:CB	9	0.15
(1,521)	1:47:A:GLN:H	1:46:A:PRO:CG	12	0.15
(1,515)	1:45:A:SER:H	1:48:A:GLU:CG	2	0.15
(1,514)	1:45:A:SER:H	1:48:A:GLU:CB	3	0.15
(1,514)	1:45:A:SER:H	1:48:A:GLU:CB	8	0.15
(1,514)	1:45:A:SER:H	1:48:A:GLU:CB	11	0.15
(1,509)	1:45:A:SER:H	1:44:A:ASN:CB	5	0.15
(1,507)	1:45:A:SER:H	1:43:A:THR:CG2	11	0.15
(1,498)	1:44:A:ASN:H	1:43:A:THR:CB	7	0.15
(1,494)	1:43:A:THR:H	1:49:A:LEU:CD1	11	0.15
(1,486)	1:43:A:THR:H	1:41:A:THR:CA	2	0.15
(1,480)	1:42:A:ASN:H	1:41:A:THR:CG2	3	0.15
(1,471)	1:41:A:THR:H	1:42:A:ASN:CB	8	0.15
(1,471)	1:41:A:THR:H	1:42:A:ASN:CB	9	0.15
(1,457)	1:40:A:GLU:H	1:36:A:VAL:C	4	0.15
(1,446)	1:39:A:SER:H	1:40:A:GLU:CB	5	0.15
(1,443)	1:39:A:SER:H	1:38:A:SER:CB	4	0.15
(1,440)	1:39:A:SER:H	1:35:A:ALA:CA	3	0.15
(1,435)	1:38:A:SER:H	1:37:A:ILE:CD1	11	0.15
(1,434)	1:38:A:SER:H	1:37:A:ILE:CG2	10	0.15
(1,430)	1:38:A:SER:H	1:35:A:ALA:CB	6	0.15
(1,428)	1:38:A:SER:H	1:34:A:SER:CA	4	0.15
(1,425)	1:37:A:ILE:H	1:38:A:SER:CA	8	0.15
(1,425)	1:37:A:ILE:H	1:38:A:SER:CA	10	0.15
(1,424)	1:37:A:ILE:H	1:37:A:ILE:CD1	2	0.15
(1,419)	1:37:A:ILE:H	1:36:A:VAL:CG2	9	0.15
(1,387)	1:34:A:SER:H	1:35:A:ALA:CB	1	0.15
(1,346)	1:29:A:LEU:H	1:26:A:GLU:CA	11	0.15
(1,345)	1:29:A:LEU:H	1:25:A:ASN:CA	11	0.15
(1,333)	1:27:A:LEU:H	1:27:A:LEU:CB	1	0.15

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,328)	1:27:A:LEU:H	1:25:A:ASN:CA	4	0.15
(1,327)	1:27:A:LEU:H	1:24:A:ILE:CA	9	0.15
(1,325)	1:26:A:GLU:H	1:28:A:PHE:CB	5	0.15
(1,307)	1:25:A:ASN:H	1:24:A:ILE:CB	8	0.15
(1,297)	1:24:A:ILE:H	1:24:A:ILE:CG1	8	0.15
(1,292)	1:23:A:SER:H	1:26:A:GLU:CG	9	0.15
(1,284)	1:22:A:ILE:H	1:61:A:ILE:C	1	0.15
(1,275)	1:22:A:ILE:H	1:22:A:ILE:CG1	8	0.15
(1,272)	1:22:A:ILE:H	1:21:A:LYS:CD	7	0.15
(1,257)	1:20:A:GLY:H	1:19:A:ASP:CB	11	0.15
(1,249)	1:19:A:ASP:H	1:15:A:ASP:CG	4	0.15
(1,247)	1:19:A:ASP:H	1:19:A:ASP:CB	12	0.15
(1,240)	1:19:A:ASP:H	1:15:A:ASP:CB	2	0.15
(1,231)	1:18:A:GLN:H	1:15:A:ASP:CB	2	0.15
(1,229)	1:17:A:ASP:H	1:26:A:GLU:CG	5	0.15
(1,201)	1:14:A:LEU:H	1:15:A:ASP:CB	5	0.15
(1,183)	1:13:A:THR:H	1:11:A:PHE:CA	4	0.15
(1,180)	1:13:A:THR:H	1:9:A:SER:CA	10	0.15
(1,176)	1:12:A:ASN:H	1:11:A:PHE:CB	3	0.15
(1,172)	1:12:A:ASN:H	1:8:A:GLN:CA	4	0.15
(1,167)	1:11:A:PHE:H	1:10:A:LEU:CD1	12	0.15
(1,161)	1:10:A:LEU:H	1:11:A:PHE:CB	11	0.15
(1,154)	1:10:A:LEU:H	1:7:A:LEU:CA	6	0.15
(1,153)	1:9:A:SER:H	1:5:A:GLN:C	12	0.15
(1,152)	1:9:A:SER:H	1:10:A:LEU:CB	2	0.15
(1,151)	1:9:A:SER:H	1:9:A:SER:CB	2	0.15
(1,145)	1:9:A:SER:H	1:5:A:GLN:CA	9	0.15
(1,139)	1:8:A:GLN:H	1:7:A:LEU:CD2	8	0.15
(1,137)	1:8:A:GLN:H	1:7:A:LEU:CG	2	0.15
(1,134)	1:8:A:GLN:H	1:5:A:GLN:CA	2	0.15
(1,130)	1:7:A:LEU:H	1:8:A:GLN:CB	11	0.15
(1,96)	1:4:A:GLU:H	1:3:A:THR:CG2	11	0.15
(1,88)	1:3:A:THR:H	1:2:A:ALA:CB	4	0.15
(1,88)	1:3:A:THR:H	1:2:A:ALA:CB	7	0.15
(1,73)	1:0:A:HIS:H	1:-1:A:SER:CB	6	0.15
(1,64)	1:-3:A:ARG:H	1:-3:A:ARG:CD	2	0.15
(1,53)	1:-5:A:VAL:H	1:-6:A:LEU:CD2	7	0.15
(1,48)	1:-6:A:LEU:H	1:-6:A:LEU:CB	9	0.15
(1,42)	1:-8:A:SER:H	1:-8:A:SER:CB	7	0.15
(1,34)	1:-10:A:HIS:H	1:-10:A:HIS:CB	8	0.15
(1,32)	1:-10:A:HIS:H	1:-11:A:HIS:CB	3	0.15
(1,32)	1:-10:A:HIS:H	1:-11:A:HIS:CB	10	0.15

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,23)	1:-12:A:HIS:H	1:-13:A:HIS:CB	10	0.15
(1,7)	1:-16:A:SER:H	1:-17:A:SER:CB	8	0.15
(3,82)	1:59:A:GLY:N	1:54:A:ASP:OD2	7	0.14
(3,66)	1:51:A:VAL:N	1:47:A:GLN:O	1	0.14
(3,64)	1:50:A:LEU:N	1:46:A:PRO:O	8	0.14
(3,60)	1:43:A:THR:N	1:38:A:SER:O	12	0.14
(3,58)	1:41:A:THR:N	1:37:A:ILE:O	1	0.14
(3,44)	1:34:A:SER:N	1:30:A:SER:O	7	0.14
(3,44)	1:34:A:SER:N	1:30:A:SER:O	8	0.14
(3,31)	1:20:A:GLY:H	1:15:A:ASP:OD2	10	0.14
(3,14)	1:12:A:ASN:N	1:8:A:GLN:O	2	0.14
(3,11)	1:11:A:PHE:H	1:7:A:LEU:O	1	0.14
(3,7)	1:9:A:SER:H	1:5:A:GLN:O	11	0.14
(3,3)	1:7:A:LEU:H	1:3:A:THR:O	5	0.14
(1,812)	1:76:A:LEU:H	1:75:A:ASN:CA	4	0.14
(1,800)	1:74:A:SER:H	1:72:A:LYS:CA	1	0.14
(1,781)	1:72:A:LYS:H	1:71:A:LYS:CG	4	0.14
(1,780)	1:72:A:LYS:H	1:71:A:LYS:CB	12	0.14
(1,753)	1:70:A:VAL:H	1:66:A:LEU:CA	2	0.14
(1,749)	1:69:A:ALA:H	1:68:A:LYS:CG	3	0.14
(1,749)	1:69:A:ALA:H	1:68:A:LYS:CG	11	0.14
(1,748)	1:69:A:ALA:H	1:68:A:LYS:CB	10	0.14
(1,722)	1:67:A:LYS:H	1:66:A:LEU:CA	1	0.14
(1,716)	1:66:A:LEU:H	1:66:A:LEU:CD1	3	0.14
(1,716)	1:66:A:LEU:H	1:66:A:LEU:CD1	12	0.14
(1,706)	1:65:A:GLU:H	1:65:A:GLU:CG	2	0.14
(1,706)	1:65:A:GLU:H	1:65:A:GLU:CG	5	0.14
(1,702)	1:65:A:GLU:H	1:64:A:GLU:CB	2	0.14
(1,694)	1:65:A:GLU:H	1:61:A:ILE:CA	2	0.14
(1,685)	1:64:A:GLU:H	1:62:A:THR:CB	9	0.14
(1,671)	1:62:A:THR:H	1:65:A:GLU:CG	8	0.14
(1,661)	1:61:A:ILE:H	1:61:A:ILE:CD1	4	0.14
(1,656)	1:61:A:ILE:H	1:60:A:SER:CB	7	0.14
(1,644)	1:60:A:SER:H	1:58:A:ASP:CB	12	0.14
(1,639)	1:59:A:GLY:H	1:54:A:ASP:CG	9	0.14
(1,614)	1:56:A:ASP:H	1:65:A:GLU:CD	1	0.14
(1,612)	1:56:A:ASP:H	1:57:A:GLN:CB	12	0.14
(1,610)	1:56:A:ASP:H	1:56:A:ASP:CB	2	0.14
(1,575)	1:52:A:GLN:H	1:51:A:VAL:CB	3	0.14
(1,574)	1:52:A:GLN:H	1:51:A:VAL:CA	6	0.14
(1,567)	1:51:A:VAL:H	1:51:A:VAL:CG1	2	0.14
(1,557)	1:51:A:VAL:H	1:48:A:GLU:CA	3	0.14

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,557)	1:51:A:VAL:H	1:48:A:GLU:CA	6	0.14
(1,554)	1:50:A:LEU:H	1:46:A:PRO:C	4	0.14
(1,554)	1:50:A:LEU:H	1:46:A:PRO:C	11	0.14
(1,548)	1:50:A:LEU:H	1:49:A:LEU:CB	11	0.14
(1,546)	1:50:A:LEU:H	1:47:A:GLN:CA	1	0.14
(1,535)	1:48:A:GLU:H	1:49:A:LEU:CB	7	0.14
(1,531)	1:48:A:GLU:H	1:47:A:GLN:CG	6	0.14
(1,520)	1:47:A:GLN:H	1:46:A:PRO:CB	6	0.14
(1,514)	1:45:A:SER:H	1:48:A:GLU:CB	2	0.14
(1,496)	1:43:A:THR:H	1:38:A:SER:C	5	0.14
(1,486)	1:43:A:THR:H	1:41:A:THR:CA	7	0.14
(1,482)	1:42:A:ASN:H	1:42:A:ASN:CB	9	0.14
(1,470)	1:41:A:THR:H	1:42:A:ASN:CA	9	0.14
(1,465)	1:41:A:THR:H	1:40:A:GLU:CB	9	0.14
(1,465)	1:41:A:THR:H	1:40:A:GLU:CB	10	0.14
(1,449)	1:40:A:GLU:H	1:36:A:VAL:CG1	8	0.14
(1,448)	1:40:A:GLU:H	1:36:A:VAL:CA	8	0.14
(1,440)	1:39:A:SER:H	1:35:A:ALA:CA	9	0.14
(1,437)	1:38:A:SER:H	1:38:A:SER:CB	9	0.14
(1,433)	1:38:A:SER:H	1:37:A:ILE:CG1	1	0.14
(1,417)	1:37:A:ILE:H	1:36:A:VAL:CB	9	0.14
(1,402)	1:36:A:VAL:H	1:35:A:ALA:CB	5	0.14
(1,401)	1:36:A:VAL:H	1:35:A:ALA:CA	2	0.14
(1,396)	1:35:A:ALA:H	1:36:A:VAL:CG2	4	0.14
(1,395)	1:35:A:ALA:H	1:35:A:ALA:CB	9	0.14
(1,384)	1:34:A:SER:H	1:33:A:LEU:CD2	3	0.14
(1,382)	1:34:A:SER:H	1:33:A:LEU:CG	12	0.14
(1,379)	1:34:A:SER:H	1:32:A:GLY:CA	4	0.14
(1,378)	1:34:A:SER:H	1:31:A:PRO:CA	7	0.14
(1,378)	1:34:A:SER:H	1:31:A:PRO:CA	8	0.14
(1,355)	1:30:A:SER:H	1:28:A:PHE:CB	5	0.14
(1,328)	1:27:A:LEU:H	1:25:A:ASN:CA	10	0.14
(1,325)	1:26:A:GLU:H	1:28:A:PHE:CB	7	0.14
(1,322)	1:26:A:GLU:H	1:26:A:GLU:CG	8	0.14
(1,319)	1:26:A:GLU:H	1:25:A:ASN:CB	4	0.14
(1,307)	1:25:A:ASN:H	1:24:A:ILE:CB	9	0.14
(1,304)	1:25:A:ASN:H	1:23:A:SER:CA	7	0.14
(1,299)	1:24:A:ILE:H	1:24:A:ILE:CD1	8	0.14
(1,284)	1:22:A:ILE:H	1:61:A:ILE:C	8	0.14
(1,277)	1:22:A:ILE:H	1:22:A:ILE:CD1	6	0.14
(1,275)	1:22:A:ILE:H	1:22:A:ILE:CG1	1	0.14
(1,270)	1:22:A:ILE:H	1:21:A:LYS:CB	8	0.14

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,270)	1:22:A:ILE:H	1:21:A:LYS:CB	11	0.14
(1,252)	1:19:A:ASP:N	1:19:A:ASP:OD1	8	0.14
(1,231)	1:18:A:GLN:H	1:15:A:ASP:CB	9	0.14
(1,230)	1:17:A:ASP:H	1:26:A:GLU:CD	12	0.14
(1,229)	1:17:A:ASP:H	1:26:A:GLU:CG	6	0.14
(1,203)	1:15:A:ASP:H	1:12:A:ASN:CA	10	0.14
(1,201)	1:14:A:LEU:H	1:15:A:ASP:CB	2	0.14
(1,186)	1:13:A:THR:H	1:12:A:ASN:CB	3	0.14
(1,175)	1:12:A:ASN:H	1:11:A:PHE:CA	8	0.14
(1,166)	1:11:A:PHE:H	1:10:A:LEU:CG	1	0.14
(1,162)	1:10:A:LEU:H	1:6:A:GLU:C	3	0.14
(1,149)	1:9:A:SER:H	1:8:A:GLN:CG	5	0.14
(1,148)	1:9:A:SER:H	1:8:A:GLN:CB	9	0.14
(1,139)	1:8:A:GLN:H	1:7:A:LEU:CD2	2	0.14
(1,138)	1:8:A:GLN:H	1:7:A:LEU:CD1	8	0.14
(1,134)	1:8:A:GLN:H	1:5:A:GLN:CA	1	0.14
(1,134)	1:8:A:GLN:H	1:5:A:GLN:CA	10	0.14
(1,120)	1:6:A:GLU:H	1:7:A:LEU:CB	12	0.14
(1,119)	1:6:A:GLU:H	1:6:A:GLU:CG	4	0.14
(1,115)	1:6:A:GLU:H	1:5:A:GLN:CB	3	0.14
(1,104)	1:5:A:GLN:H	1:4:A:GLU:CA	4	0.14
(1,102)	1:5:A:GLN:H	1:3:A:THR:CB	7	0.14
(1,100)	1:4:A:GLU:H	1:5:A:GLN:CB	12	0.14
(1,95)	1:4:A:GLU:H	1:3:A:THR:CB	11	0.14
(1,48)	1:-6:A:LEU:H	1:-6:A:LEU:CB	1	0.14
(1,42)	1:-8:A:SER:H	1:-8:A:SER:CB	12	0.14
(1,40)	1:-8:A:SER:H	1:-9:A:SER:CB	12	0.14
(1,38)	1:-9:A:SER:H	1:-9:A:SER:CB	10	0.14
(1,16)	1:-14:A:HIS:H	1:-14:A:HIS:CB	12	0.14
(1,4)	1:-17:A:SER:H	1:-16:A:SER:CB	3	0.14
(3,104)	1:71:A:LYS:N	1:67:A:LYS:O	10	0.13
(3,104)	1:71:A:LYS:N	1:67:A:LYS:O	12	0.13
(3,100)	1:69:A:ALA:N	1:65:A:GLU:O	4	0.13
(3,99)	1:69:A:ALA:H	1:65:A:GLU:O	1	0.13
(3,94)	1:66:A:LEU:N	1:62:A:THR:O	2	0.13
(3,93)	1:66:A:LEU:H	1:62:A:THR:O	8	0.13
(3,91)	1:65:A:GLU:H	1:62:A:THR:OG1	3	0.13
(3,90)	1:63:A:PHE:N	1:20:A:GLY:O	6	0.13
(3,88)	1:62:A:THR:N	1:65:A:GLU:OE1	2	0.13
(3,86)	1:61:A:ILE:N	1:22:A:ILE:O	2	0.13
(3,85)	1:61:A:ILE:H	1:22:A:ILE:O	2	0.13
(3,80)	1:58:A:ASP:N	1:56:A:ASP:OD1	9	0.13

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,75)	1:57:A:GLN:H	1:54:A:ASP:O	7	0.13
(3,59)	1:43:A:THR:H	1:38:A:SER:O	12	0.13
(3,54)	1:39:A:SER:N	1:35:A:ALA:O	8	0.13
(3,45)	1:35:A:ALA:H	1:31:A:PRO:O	10	0.13
(3,44)	1:34:A:SER:N	1:30:A:SER:O	6	0.13
(3,43)	1:34:A:SER:H	1:30:A:SER:O	11	0.13
(3,37)	1:27:A:LEU:H	1:23:A:SER:O	1	0.13
(3,33)	1:22:A:ILE:H	1:61:A:ILE:O	11	0.13
(3,32)	1:20:A:GLY:N	1:15:A:ASP:OD2	4	0.13
(3,31)	1:20:A:GLY:H	1:15:A:ASP:OD2	7	0.13
(3,10)	1:10:A:LEU:N	1:6:A:GLU:O	7	0.13
(3,10)	1:10:A:LEU:N	1:6:A:GLU:O	10	0.13
(3,4)	1:7:A:LEU:N	1:3:A:THR:O	5	0.13
(1,809)	1:75:A:ASN:H	1:75:A:ASN:CB	5	0.13
(1,790)	1:73:A:ALA:H	1:70:A:VAL:CA	2	0.13
(1,787)	1:72:A:LYS:H	1:73:A:ALA:CB	10	0.13
(1,781)	1:72:A:LYS:H	1:71:A:LYS:CG	3	0.13
(1,771)	1:71:A:LYS:H	1:70:A:VAL:CG2	7	0.13
(1,770)	1:71:A:LYS:H	1:70:A:VAL:CG1	12	0.13
(1,761)	1:70:A:VAL:H	1:70:A:VAL:CG1	8	0.13
(1,756)	1:70:A:VAL:H	1:68:A:LYS:CB	1	0.13
(1,756)	1:70:A:VAL:H	1:68:A:LYS:CB	4	0.13
(1,749)	1:69:A:ALA:H	1:68:A:LYS:CG	1	0.13
(1,737)	1:68:A:LYS:H	1:67:A:LYS:CG	1	0.13
(1,737)	1:68:A:LYS:H	1:67:A:LYS:CG	11	0.13
(1,733)	1:68:A:LYS:H	1:64:A:GLU:CA	6	0.13
(1,728)	1:67:A:LYS:H	1:67:A:LYS:CB	1	0.13
(1,717)	1:66:A:LEU:H	1:66:A:LEU:CD2	4	0.13
(1,717)	1:66:A:LEU:H	1:66:A:LEU:CD2	7	0.13
(1,716)	1:66:A:LEU:H	1:66:A:LEU:CD1	11	0.13
(1,715)	1:66:A:LEU:H	1:66:A:LEU:CG	5	0.13
(1,714)	1:66:A:LEU:H	1:66:A:LEU:CB	3	0.13
(1,714)	1:66:A:LEU:H	1:66:A:LEU:CB	5	0.13
(1,702)	1:65:A:GLU:H	1:64:A:GLU:CB	6	0.13
(1,680)	1:63:A:PHE:H	1:63:A:PHE:CB	8	0.13
(1,677)	1:63:A:PHE:H	1:62:A:THR:CB	11	0.13
(1,674)	1:63:A:PHE:H	1:21:A:LYS:CB	5	0.13
(1,669)	1:62:A:THR:H	1:62:A:THR:CG2	3	0.13
(1,668)	1:62:A:THR:H	1:62:A:THR:CB	7	0.13
(1,656)	1:61:A:ILE:H	1:60:A:SER:CB	3	0.13
(1,656)	1:61:A:ILE:H	1:60:A:SER:CB	4	0.13
(1,654)	1:61:A:ILE:H	1:23:A:SER:CA	9	0.13

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,652)	1:61:A:ILE:H	1:22:A:ILE:CG1	10	0.13
(1,643)	1:60:A:SER:H	1:58:A:ASP:CA	4	0.13
(1,629)	1:58:A:ASP:H	1:54:A:ASP:CG	2	0.13
(1,625)	1:58:A:ASP:H	1:57:A:GLN:CG	1	0.13
(1,625)	1:58:A:ASP:H	1:57:A:GLN:CG	3	0.13
(1,624)	1:58:A:ASP:H	1:57:A:GLN:CB	3	0.13
(1,600)	1:55:A:SER:H	1:54:A:ASP:CB	3	0.13
(1,598)	1:54:A:ASP:H	1:50:A:LEU:C	9	0.13
(1,594)	1:54:A:ASP:H	1:53:A:TYR:CA	11	0.13
(1,593)	1:54:A:ASP:H	1:52:A:GLN:CB	3	0.13
(1,593)	1:54:A:ASP:H	1:52:A:GLN:CB	5	0.13
(1,593)	1:54:A:ASP:H	1:52:A:GLN:CB	6	0.13
(1,592)	1:54:A:ASP:H	1:50:A:LEU:CA	8	0.13
(1,580)	1:52:A:GLN:H	1:53:A:TYR:CB	3	0.13
(1,577)	1:52:A:GLN:H	1:51:A:VAL:CG2	2	0.13
(1,576)	1:52:A:GLN:H	1:51:A:VAL:CG1	6	0.13
(1,576)	1:52:A:GLN:H	1:51:A:VAL:CG1	9	0.13
(1,564)	1:51:A:VAL:H	1:50:A:LEU:CD2	2	0.13
(1,562)	1:51:A:VAL:H	1:50:A:LEU:CG	5	0.13
(1,560)	1:51:A:VAL:H	1:50:A:LEU:CA	3	0.13
(1,548)	1:50:A:LEU:H	1:49:A:LEU:CB	5	0.13
(1,548)	1:50:A:LEU:H	1:49:A:LEU:CB	7	0.13
(1,546)	1:50:A:LEU:H	1:47:A:GLN:CA	5	0.13
(1,545)	1:50:A:LEU:H	1:46:A:PRO:CA	8	0.13
(1,531)	1:48:A:GLU:H	1:47:A:GLN:CG	3	0.13
(1,530)	1:48:A:GLU:H	1:47:A:GLN:CB	5	0.13
(1,529)	1:48:A:GLU:H	1:47:A:GLN:CA	11	0.13
(1,528)	1:48:A:GLU:H	1:45:A:SER:CB	2	0.13
(1,522)	1:47:A:GLN:H	1:46:A:PRO:CD	8	0.13
(1,521)	1:47:A:GLN:H	1:46:A:PRO:CG	6	0.13
(1,519)	1:47:A:GLN:H	1:46:A:PRO:CA	1	0.13
(1,513)	1:45:A:SER:H	1:48:A:GLU:CA	7	0.13
(1,508)	1:45:A:SER:H	1:44:A:ASN:CA	6	0.13
(1,494)	1:43:A:THR:H	1:49:A:LEU:CD1	4	0.13
(1,485)	1:43:A:THR:H	1:39:A:SER:CA	3	0.13
(1,480)	1:42:A:ASN:H	1:41:A:THR:CG2	8	0.13
(1,466)	1:41:A:THR:H	1:40:A:GLU:CG	11	0.13
(1,461)	1:41:A:THR:H	1:38:A:SER:CB	12	0.13
(1,460)	1:41:A:THR:H	1:38:A:SER:CA	8	0.13
(1,457)	1:40:A:GLU:H	1:36:A:VAL:C	1	0.13
(1,457)	1:40:A:GLU:H	1:36:A:VAL:C	8	0.13
(1,452)	1:40:A:GLU:H	1:39:A:SER:CB	7	0.13

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,432)	1:38:A:SER:H	1:37:A:ILE:CB	4	0.13
(1,428)	1:38:A:SER:H	1:34:A:SER:CA	2	0.13
(1,427)	1:37:A:ILE:H	1:33:A:LEU:C	1	0.13
(1,426)	1:37:A:ILE:H	1:38:A:SER:CB	1	0.13
(1,418)	1:37:A:ILE:H	1:36:A:VAL:CG1	9	0.13
(1,415)	1:37:A:ILE:H	1:35:A:ALA:CB	11	0.13
(1,414)	1:37:A:ILE:H	1:35:A:ALA:CA	2	0.13
(1,412)	1:37:A:ILE:H	1:33:A:LEU:CA	3	0.13
(1,409)	1:37:A:ILE:H	1:10:A:LEU:CD1	4	0.13
(1,406)	1:36:A:VAL:H	1:36:A:VAL:CG2	12	0.13
(1,396)	1:35:A:ALA:H	1:36:A:VAL:CG2	7	0.13
(1,388)	1:34:A:SER:H	1:30:A:SER:C	9	0.13
(1,381)	1:34:A:SER:H	1:33:A:LEU:CB	12	0.13
(1,377)	1:34:A:SER:H	1:30:A:SER:CB	9	0.13
(1,371)	1:33:A:LEU:H	1:30:A:SER:CB	8	0.13
(1,370)	1:33:A:LEU:H	1:30:A:SER:CA	7	0.13
(1,356)	1:30:A:SER:H	1:29:A:LEU:CA	6	0.13
(1,356)	1:30:A:SER:H	1:29:A:LEU:CA	12	0.13
(1,354)	1:30:A:SER:H	1:28:A:PHE:CA	6	0.13
(1,345)	1:29:A:LEU:H	1:25:A:ASN:CA	5	0.13
(1,335)	1:27:A:LEU:H	1:28:A:PHE:CB	9	0.13
(1,330)	1:27:A:LEU:H	1:26:A:GLU:CB	2	0.13
(1,323)	1:26:A:GLU:H	1:27:A:LEU:CB	9	0.13
(1,314)	1:26:A:GLU:H	1:22:A:ILE:CG2	5	0.13
(1,308)	1:25:A:ASN:H	1:24:A:ILE:CG1	8	0.13
(1,307)	1:25:A:ASN:H	1:24:A:ILE:CB	3	0.13
(1,298)	1:24:A:ILE:H	1:24:A:ILE:CG2	10	0.13
(1,291)	1:23:A:SER:H	1:26:A:GLU:CB	2	0.13
(1,283)	1:22:A:ILE:H	1:62:A:THR:CA	9	0.13
(1,268)	1:21:A:LYS:H	1:62:A:THR:CA	7	0.13
(1,266)	1:21:A:LYS:H	1:21:A:LYS:CD	6	0.13
(1,230)	1:17:A:ASP:H	1:26:A:GLU:CD	4	0.13
(1,229)	1:17:A:ASP:H	1:26:A:GLU:CG	12	0.13
(1,222)	1:17:A:ASP:H	1:16:A:ARG:CG	8	0.13
(1,219)	1:17:A:ASP:H	1:15:A:ASP:CB	2	0.13
(1,218)	1:17:A:ASP:H	1:15:A:ASP:CA	1	0.13
(1,218)	1:17:A:ASP:H	1:15:A:ASP:CA	11	0.13
(1,183)	1:13:A:THR:H	1:11:A:PHE:CA	1	0.13
(1,180)	1:13:A:THR:H	1:9:A:SER:CA	9	0.13
(1,178)	1:12:A:ASN:H	1:12:A:ASN:CB	8	0.13
(1,176)	1:12:A:ASN:H	1:11:A:PHE:CB	6	0.13
(1,165)	1:11:A:PHE:H	1:10:A:LEU:CB	4	0.13

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,161)	1:10:A:LEU:H	1:11:A:PHE:CB	1	0.13
(1,139)	1:8:A:GLN:H	1:7:A:LEU:CD2	3	0.13
(1,127)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:CB	11	0.13
(1,85)	1:2:A:ALA:H	1:40:A:GLU:CG	3	0.13
(1,78)	1:1:A:MET:H	1:1:A:MET:CB	6	0.13
(1,73)	1:0:A:HIS:H	1:-1:A:SER:CB	12	0.13
(1,52)	1:-5:A:VAL:H	1:-6:A:LEU:CG	3	0.13
(1,51)	1:-5:A:VAL:H	1:-6:A:LEU:CB	2	0.13
(1,48)	1:-6:A:LEU:H	1:-6:A:LEU:CB	6	0.13
(1,44)	1:-7:A:GLY:H	1:-8:A:SER:CB	5	0.13
(1,32)	1:-10:A:HIS:H	1:-11:A:HIS:CB	12	0.13
(1,27)	1:-11:A:HIS:H	1:-12:A:HIS:CB	6	0.13
(1,11)	1:-15:A:HIS:H	1:-16:A:SER:CB	2	0.13
(1,9)	1:-16:A:SER:H	1:-16:A:SER:CB	5	0.13
(1,4)	1:-17:A:SER:H	1:-16:A:SER:CB	2	0.13
(1,1)	1:-17:A:SER:H	1:-18:A:GLY:CA	6	0.13
(3,97)	1:68:A:LYS:H	1:64:A:GLU:O	1	0.12
(3,93)	1:66:A:LEU:H	1:62:A:THR:O	7	0.12
(3,87)	1:62:A:THR:H	1:65:A:GLU:OE1	7	0.12
(3,83)	1:60:A:SER:H	1:58:A:ASP:OD1	3	0.12
(3,81)	1:59:A:GLY:H	1:54:A:ASP:OD2	5	0.12
(3,80)	1:58:A:ASP:N	1:56:A:ASP:OD1	10	0.12
(3,70)	1:53:A:TYR:N	1:49:A:LEU:O	6	0.12
(3,63)	1:50:A:LEU:H	1:46:A:PRO:O	8	0.12
(3,55)	1:40:A:GLU:H	1:36:A:VAL:O	4	0.12
(3,53)	1:39:A:SER:H	1:35:A:ALA:O	11	0.12
(3,45)	1:35:A:ALA:H	1:31:A:PRO:O	4	0.12
(3,32)	1:20:A:GLY:N	1:15:A:ASP:OD2	11	0.12
(3,15)	1:13:A:THR:H	1:9:A:SER:O	6	0.12
(3,9)	1:10:A:LEU:H	1:6:A:GLU:O	4	0.12
(1,817)	1:76:A:LEU:H	1:76:A:LEU:CD1	9	0.12
(1,800)	1:74:A:SER:H	1:72:A:LYS:CA	7	0.12
(1,798)	1:73:A:ALA:H	1:69:A:ALA:C	12	0.12
(1,793)	1:73:A:ALA:H	1:72:A:LYS:CG	5	0.12
(1,792)	1:73:A:ALA:H	1:72:A:LYS:CB	2	0.12
(1,789)	1:73:A:ALA:H	1:69:A:ALA:CA	5	0.12
(1,775)	1:71:A:LYS:H	1:72:A:LYS:CB	12	0.12
(1,763)	1:70:A:VAL:H	1:71:A:LYS:CB	1	0.12
(1,753)	1:70:A:VAL:H	1:66:A:LEU:CA	10	0.12
(1,752)	1:69:A:ALA:H	1:65:A:GLU:C	4	0.12
(1,747)	1:69:A:ALA:H	1:68:A:LYS:CA	12	0.12
(1,744)	1:68:A:LYS:H	1:64:A:GLU:C	2	0.12

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,737)	1:68:A:LYS:H	1:67:A:LYS:CG	7	0.12
(1,737)	1:68:A:LYS:H	1:67:A:LYS:CG	9	0.12
(1,736)	1:68:A:LYS:H	1:67:A:LYS:CB	4	0.12
(1,736)	1:68:A:LYS:H	1:67:A:LYS:CB	10	0.12
(1,735)	1:68:A:LYS:H	1:67:A:LYS:CA	6	0.12
(1,725)	1:67:A:LYS:H	1:66:A:LEU:CD1	6	0.12
(1,721)	1:67:A:LYS:H	1:64:A:GLU:CA	7	0.12
(1,719)	1:66:A:LEU:H	1:62:A:THR:C	1	0.12
(1,697)	1:65:A:GLU:H	1:62:A:THR:CB	2	0.12
(1,688)	1:64:A:GLU:H	1:63:A:PHE:CB	6	0.12
(1,684)	1:64:A:GLU:H	1:62:A:THR:CA	8	0.12
(1,676)	1:63:A:PHE:H	1:62:A:THR:CA	1	0.12
(1,671)	1:62:A:THR:H	1:65:A:GLU:CG	11	0.12
(1,670)	1:62:A:THR:H	1:65:A:GLU:CB	11	0.12
(1,661)	1:61:A:ILE:H	1:61:A:ILE:CD1	10	0.12
(1,653)	1:61:A:ILE:H	1:22:A:ILE:CD1	6	0.12
(1,653)	1:61:A:ILE:H	1:22:A:ILE:CD1	12	0.12
(1,644)	1:60:A:SER:H	1:58:A:ASP:CB	11	0.12
(1,636)	1:59:A:GLY:H	1:58:A:ASP:CA	4	0.12
(1,623)	1:58:A:ASP:H	1:57:A:GLN:CA	12	0.12
(1,622)	1:58:A:ASP:H	1:56:A:ASP:CB	10	0.12
(1,620)	1:57:A:GLN:H	1:54:A:ASP:C	4	0.12
(1,610)	1:56:A:ASP:H	1:56:A:ASP:CB	1	0.12
(1,600)	1:55:A:SER:H	1:54:A:ASP:CB	4	0.12
(1,596)	1:54:A:ASP:H	1:54:A:ASP:CB	4	0.12
(1,593)	1:54:A:ASP:H	1:52:A:GLN:CB	10	0.12
(1,583)	1:53:A:TYR:H	1:50:A:LEU:CA	1	0.12
(1,577)	1:52:A:GLN:H	1:51:A:VAL:CG2	10	0.12
(1,576)	1:52:A:GLN:H	1:51:A:VAL:CG1	2	0.12
(1,575)	1:52:A:GLN:H	1:51:A:VAL:CB	2	0.12
(1,548)	1:50:A:LEU:H	1:49:A:LEU:CB	2	0.12
(1,534)	1:48:A:GLU:H	1:48:A:GLU:CG	2	0.12
(1,530)	1:48:A:GLU:H	1:47:A:GLN:CB	12	0.12
(1,520)	1:47:A:GLN:H	1:46:A:PRO:CB	3	0.12
(1,517)	1:47:A:GLN:H	1:45:A:SER:CA	5	0.12
(1,513)	1:45:A:SER:H	1:48:A:GLU:CA	6	0.12
(1,512)	1:45:A:SER:H	1:46:A:PRO:CD	1	0.12
(1,496)	1:43:A:THR:H	1:38:A:SER:C	8	0.12
(1,494)	1:43:A:THR:H	1:49:A:LEU:CD1	9	0.12
(1,493)	1:43:A:THR:H	1:43:A:THR:CG2	11	0.12
(1,488)	1:43:A:THR:H	1:41:A:THR:CG2	4	0.12
(1,478)	1:42:A:ASN:H	1:40:A:GLU:CA	8	0.12

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,476)	1:41:A:THR:H	1:37:A:ILE:C	12	0.12
(1,468)	1:41:A:THR:H	1:41:A:THR:CB	7	0.12
(1,454)	1:40:A:GLU:H	1:40:A:GLU:CB	9	0.12
(1,451)	1:40:A:GLU:H	1:39:A:SER:CA	12	0.12
(1,435)	1:38:A:SER:H	1:37:A:ILE:CD1	5	0.12
(1,434)	1:38:A:SER:H	1:37:A:ILE:CG2	3	0.12
(1,433)	1:38:A:SER:H	1:37:A:ILE:CG1	9	0.12
(1,427)	1:37:A:ILE:H	1:33:A:LEU:C	6	0.12
(1,426)	1:37:A:ILE:H	1:38:A:SER:CB	3	0.12
(1,425)	1:37:A:ILE:H	1:38:A:SER:CA	1	0.12
(1,425)	1:37:A:ILE:H	1:38:A:SER:CA	12	0.12
(1,421)	1:37:A:ILE:H	1:37:A:ILE:CB	5	0.12
(1,415)	1:37:A:ILE:H	1:35:A:ALA:CB	10	0.12
(1,413)	1:37:A:ILE:H	1:34:A:SER:CA	12	0.12
(1,406)	1:36:A:VAL:H	1:36:A:VAL:CG2	10	0.12
(1,393)	1:35:A:ALA:H	1:34:A:SER:CB	3	0.12
(1,393)	1:35:A:ALA:H	1:34:A:SER:CB	8	0.12
(1,392)	1:35:A:ALA:H	1:34:A:SER:CA	6	0.12
(1,384)	1:34:A:SER:H	1:33:A:LEU:CD2	6	0.12
(1,378)	1:34:A:SER:H	1:31:A:PRO:CA	10	0.12
(1,370)	1:33:A:LEU:H	1:30:A:SER:CA	1	0.12
(1,335)	1:27:A:LEU:H	1:28:A:PHE:CB	2	0.12
(1,329)	1:27:A:LEU:H	1:26:A:GLU:CA	2	0.12
(1,323)	1:26:A:GLU:H	1:27:A:LEU:CB	8	0.12
(1,321)	1:26:A:GLU:H	1:26:A:GLU:CB	8	0.12
(1,316)	1:26:A:GLU:H	1:24:A:ILE:CA	7	0.12
(1,311)	1:25:A:ASN:H	1:25:A:ASN:CB	8	0.12
(1,307)	1:25:A:ASN:H	1:24:A:ILE:CB	12	0.12
(1,292)	1:23:A:SER:H	1:26:A:GLU:CG	2	0.12
(1,278)	1:22:A:ILE:H	1:60:A:SER:CA	3	0.12
(1,277)	1:22:A:ILE:H	1:22:A:ILE:CD1	4	0.12
(1,268)	1:21:A:LYS:H	1:62:A:THR:CA	8	0.12
(1,267)	1:21:A:LYS:H	1:21:A:LYS:CE	6	0.12
(1,266)	1:21:A:LYS:H	1:21:A:LYS:CD	8	0.12
(1,264)	1:21:A:LYS:H	1:21:A:LYS:CB	11	0.12
(1,261)	1:21:A:LYS:H	1:19:A:ASP:CB	8	0.12
(1,252)	1:19:A:ASP:N	1:19:A:ASP:OD1	6	0.12
(1,251)	1:19:A:ASP:H	1:19:A:ASP:OD1	11	0.12
(1,234)	1:18:A:GLN:H	1:17:A:ASP:CB	5	0.12
(1,227)	1:17:A:ASP:H	1:18:A:GLN:CB	7	0.12
(1,205)	1:15:A:ASP:H	1:14:A:LEU:CB	1	0.12
(1,197)	1:14:A:LEU:H	1:13:A:THR:CB	12	0.12

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,193)	1:14:A:LEU:H	1:10:A:LEU:CA	8	0.12
(1,189)	1:13:A:THR:H	1:13:A:THR:CG2	1	0.12
(1,181)	1:13:A:THR:H	1:10:A:LEU:CA	10	0.12
(1,174)	1:12:A:ASN:H	1:9:A:SER:CA	9	0.12
(1,171)	1:11:A:PHE:H	1:7:A:LEU:C	11	0.12
(1,170)	1:11:A:PHE:H	1:11:A:PHE:CB	8	0.12
(1,153)	1:9:A:SER:H	1:5:A:GLN:C	6	0.12
(1,145)	1:9:A:SER:H	1:5:A:GLN:CA	3	0.12
(1,144)	1:8:A:GLN:H	1:4:A:GLU:C	11	0.12
(1,139)	1:8:A:GLN:H	1:7:A:LEU:CD2	1	0.12
(1,137)	1:8:A:GLN:H	1:7:A:LEU:CG	4	0.12
(1,134)	1:8:A:GLN:H	1:5:A:GLN:CA	8	0.12
(1,133)	1:8:A:GLN:H	1:4:A:GLU:CA	8	0.12
(1,122)	1:7:A:LEU:H	1:4:A:GLU:CA	1	0.12
(1,122)	1:7:A:LEU:H	1:4:A:GLU:CA	4	0.12
(1,120)	1:6:A:GLU:H	1:7:A:LEU:CB	7	0.12
(1,96)	1:4:A:GLU:H	1:3:A:THR:CG2	4	0.12
(1,95)	1:4:A:GLU:H	1:3:A:THR:CB	6	0.12
(1,72)	1:0:A:HIS:H	1:-1:A:SER:CA	6	0.12
(1,72)	1:0:A:HIS:H	1:-1:A:SER:CA	12	0.12
(1,65)	1:-2:A:GLY:H	1:-3:A:ARG:CA	6	0.12
(1,63)	1:-3:A:ARG:H	1:-3:A:ARG:CG	7	0.12
(1,60)	1:-3:A:ARG:H	1:-4:A:PRO:CB	8	0.12
(1,53)	1:-5:A:VAL:H	1:-6:A:LEU:CD2	6	0.12
(1,34)	1:-10:A:HIS:H	1:-10:A:HIS:CB	1	0.12
(1,25)	1:-12:A:HIS:H	1:-12:A:HIS:CB	8	0.12
(1,23)	1:-12:A:HIS:H	1:-13:A:HIS:CB	3	0.12
(1,14)	1:-14:A:HIS:H	1:-15:A:HIS:CA	3	0.12
(1,11)	1:-15:A:HIS:H	1:-16:A:SER:CB	11	0.12
(1,10)	1:-15:A:HIS:H	1:-16:A:SER:CA	2	0.12
(3,98)	1:68:A:LYS:N	1:64:A:GLU:O	10	0.11
(3,94)	1:66:A:LEU:N	1:62:A:THR:O	6	0.11
(3,94)	1:66:A:LEU:N	1:62:A:THR:O	7	0.11
(3,88)	1:62:A:THR:N	1:65:A:GLU:OE1	7	0.11
(3,79)	1:58:A:ASP:H	1:56:A:ASP:OD1	12	0.11
(3,78)	1:58:A:ASP:N	1:54:A:ASP:OD1	7	0.11
(3,72)	1:54:A:ASP:N	1:50:A:LEU:O	11	0.11
(3,70)	1:53:A:TYR:N	1:49:A:LEU:O	2	0.11
(3,64)	1:50:A:LEU:N	1:46:A:PRO:O	11	0.11
(3,53)	1:39:A:SER:H	1:35:A:ALA:O	12	0.11
(3,31)	1:20:A:GLY:H	1:15:A:ASP:OD2	3	0.11
(3,27)	1:19:A:ASP:H	1:15:A:ASP:OD1	3	0.11

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,26)	1:18:A:GLN:N	1:15:A:ASP:OD1	11	0.11
(3,19)	1:15:A:ASP:H	1:11:A:PHE:O	9	0.11
(3,16)	1:13:A:THR:N	1:9:A:SER:O	10	0.11
(3,14)	1:12:A:ASN:N	1:8:A:GLN:O	11	0.11
(3,12)	1:11:A:PHE:N	1:7:A:LEU:O	12	0.11
(3,11)	1:11:A:PHE:H	1:7:A:LEU:O	12	0.11
(3,10)	1:10:A:LEU:N	1:6:A:GLU:O	4	0.11
(3,9)	1:10:A:LEU:H	1:6:A:GLU:O	12	0.11
(3,4)	1:7:A:LEU:N	1:3:A:THR:O	12	0.11
(1,807)	1:75:A:ASN:H	1:74:A:SER:CA	1	0.11
(1,797)	1:73:A:ALA:H	1:74:A:SER:CA	12	0.11
(1,791)	1:73:A:ALA:H	1:72:A:LYS:CA	8	0.11
(1,782)	1:72:A:LYS:H	1:71:A:LYS:CD	9	0.11
(1,782)	1:72:A:LYS:H	1:71:A:LYS:CD	11	0.11
(1,770)	1:71:A:LYS:H	1:70:A:VAL:CG1	1	0.11
(1,770)	1:71:A:LYS:H	1:70:A:VAL:CG1	2	0.11
(1,766)	1:71:A:LYS:H	1:68:A:LYS:CA	10	0.11
(1,765)	1:71:A:LYS:H	1:67:A:LYS:CA	1	0.11
(1,747)	1:69:A:ALA:H	1:68:A:LYS:CA	7	0.11
(1,747)	1:69:A:ALA:H	1:68:A:LYS:CA	9	0.11
(1,743)	1:68:A:LYS:H	1:69:A:ALA:CB	5	0.11
(1,740)	1:68:A:LYS:H	1:68:A:LYS:CB	3	0.11
(1,732)	1:67:A:LYS:H	1:63:A:PHE:C	4	0.11
(1,724)	1:67:A:LYS:H	1:66:A:LEU:CG	2	0.11
(1,723)	1:67:A:LYS:H	1:66:A:LEU:CB	12	0.11
(1,716)	1:66:A:LEU:H	1:66:A:LEU:CD1	6	0.11
(1,703)	1:65:A:GLU:H	1:64:A:GLU:CG	2	0.11
(1,694)	1:65:A:GLU:H	1:61:A:ILE:CA	1	0.11
(1,688)	1:64:A:GLU:H	1:63:A:PHE:CB	7	0.11
(1,686)	1:64:A:GLU:H	1:62:A:THR:CG2	8	0.11
(1,662)	1:61:A:ILE:H	1:22:A:ILE:C	9	0.11
(1,650)	1:61:A:ILE:H	1:21:A:LYS:CA	10	0.11
(1,649)	1:60:A:SER:H	1:58:A:ASP:CG	3	0.11
(1,647)	1:60:A:SER:H	1:60:A:SER:CB	4	0.11
(1,643)	1:60:A:SER:H	1:58:A:ASP:CA	7	0.11
(1,639)	1:59:A:GLY:H	1:54:A:ASP:CG	3	0.11
(1,615)	1:57:A:GLN:H	1:54:A:ASP:CB	7	0.11
(1,613)	1:56:A:ASP:H	1:65:A:GLU:CG	11	0.11
(1,605)	1:56:A:ASP:H	1:54:A:ASP:CA	8	0.11
(1,596)	1:54:A:ASP:H	1:54:A:ASP:CB	11	0.11
(1,585)	1:53:A:TYR:H	1:52:A:GLN:CA	7	0.11
(1,583)	1:53:A:TYR:H	1:50:A:LEU:CA	2	0.11

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,581)	1:52:A:GLN:H	1:48:A:GLU:C	9	0.11
(1,581)	1:52:A:GLN:H	1:48:A:GLU:C	11	0.11
(1,579)	1:52:A:GLN:H	1:52:A:GLN:CB	3	0.11
(1,579)	1:52:A:GLN:H	1:52:A:GLN:CB	9	0.11
(1,558)	1:51:A:VAL:H	1:48:A:GLU:CG	2	0.11
(1,546)	1:50:A:LEU:H	1:47:A:GLN:CA	9	0.11
(1,545)	1:50:A:LEU:H	1:46:A:PRO:CA	6	0.11
(1,526)	1:47:A:GLN:H	1:48:A:GLU:CB	2	0.11
(1,521)	1:47:A:GLN:H	1:46:A:PRO:CG	11	0.11
(1,519)	1:47:A:GLN:H	1:46:A:PRO:CA	8	0.11
(1,514)	1:45:A:SER:H	1:48:A:GLU:CB	9	0.11
(1,502)	1:44:A:ASN:H	1:45:A:SER:CB	6	0.11
(1,495)	1:43:A:THR:H	1:49:A:LEU:CD2	11	0.11
(1,484)	1:43:A:THR:H	1:38:A:SER:CB	10	0.11
(1,470)	1:41:A:THR:H	1:42:A:ASN:CA	3	0.11
(1,448)	1:40:A:GLU:H	1:36:A:VAL:CA	1	0.11
(1,447)	1:39:A:SER:H	1:35:A:ALA:C	8	0.11
(1,445)	1:39:A:SER:H	1:39:A:SER:CB	9	0.11
(1,438)	1:38:A:SER:H	1:39:A:SER:CB	1	0.11
(1,438)	1:38:A:SER:H	1:39:A:SER:CB	7	0.11
(1,429)	1:38:A:SER:H	1:35:A:ALA:CA	6	0.11
(1,426)	1:37:A:ILE:H	1:38:A:SER:CB	8	0.11
(1,425)	1:37:A:ILE:H	1:38:A:SER:CA	7	0.11
(1,419)	1:37:A:ILE:H	1:36:A:VAL:CG2	12	0.11
(1,412)	1:37:A:ILE:H	1:33:A:LEU:CA	6	0.11
(1,409)	1:37:A:ILE:H	1:10:A:LEU:CD1	5	0.11
(1,408)	1:36:A:VAL:H	1:32:A:GLY:C	4	0.11
(1,386)	1:34:A:SER:H	1:34:A:SER:CB	2	0.11
(1,379)	1:34:A:SER:H	1:32:A:GLY:CA	10	0.11
(1,361)	1:30:A:SER:H	1:30:A:SER:CB	12	0.11
(1,351)	1:29:A:LEU:H	1:25:A:ASN:C	11	0.11
(1,347)	1:29:A:LEU:H	1:28:A:PHE:CA	5	0.11
(1,336)	1:27:A:LEU:H	1:23:A:SER:C	2	0.11
(1,336)	1:27:A:LEU:H	1:23:A:SER:C	12	0.11
(1,328)	1:27:A:LEU:H	1:25:A:ASN:CA	1	0.11
(1,325)	1:26:A:GLU:H	1:28:A:PHE:CB	10	0.11
(1,319)	1:26:A:GLU:H	1:25:A:ASN:CB	7	0.11
(1,316)	1:26:A:GLU:H	1:24:A:ILE:CA	1	0.11
(1,308)	1:25:A:ASN:H	1:24:A:ILE:CG1	11	0.11
(1,307)	1:25:A:ASN:H	1:24:A:ILE:CB	2	0.11
(1,299)	1:24:A:ILE:H	1:24:A:ILE:CD1	4	0.11
(1,293)	1:24:A:ILE:H	1:23:A:SER:CA	9	0.11

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,291)	1:23:A:SER:H	1:26:A:GLU:CB	3	0.11
(1,291)	1:23:A:SER:H	1:26:A:GLU:CB	9	0.11
(1,275)	1:22:A:ILE:H	1:22:A:ILE:CG1	2	0.11
(1,271)	1:22:A:ILE:H	1:21:A:LYS:CG	12	0.11
(1,270)	1:22:A:ILE:H	1:21:A:LYS:CB	7	0.11
(1,264)	1:21:A:LYS:H	1:21:A:LYS:CB	7	0.11
(1,260)	1:21:A:LYS:H	1:19:A:ASP:CA	11	0.11
(1,254)	1:20:A:GLY:H	1:15:A:ASP:CB	12	0.11
(1,253)	1:19:A:ASP:H	1:19:A:ASP:CG	6	0.11
(1,253)	1:19:A:ASP:H	1:19:A:ASP:CG	7	0.11
(1,247)	1:19:A:ASP:H	1:19:A:ASP:CB	7	0.11
(1,244)	1:19:A:ASP:H	1:18:A:GLN:CB	4	0.11
(1,241)	1:19:A:ASP:H	1:17:A:ASP:CA	1	0.11
(1,241)	1:19:A:ASP:H	1:17:A:ASP:CA	3	0.11
(1,231)	1:18:A:GLN:H	1:15:A:ASP:CB	11	0.11
(1,226)	1:17:A:ASP:H	1:18:A:GLN:CA	3	0.11
(1,218)	1:17:A:ASP:H	1:15:A:ASP:CA	6	0.11
(1,209)	1:15:A:ASP:H	1:15:A:ASP:CB	2	0.11
(1,207)	1:15:A:ASP:H	1:14:A:LEU:CD2	10	0.11
(1,205)	1:15:A:ASP:H	1:14:A:LEU:CB	9	0.11
(1,195)	1:14:A:LEU:H	1:12:A:ASN:CB	1	0.11
(1,189)	1:13:A:THR:H	1:13:A:THR:CG2	9	0.11
(1,188)	1:13:A:THR:H	1:13:A:THR:CB	1	0.11
(1,184)	1:13:A:THR:H	1:11:A:PHE:CB	9	0.11
(1,176)	1:12:A:ASN:H	1:11:A:PHE:CB	5	0.11
(1,171)	1:11:A:PHE:H	1:7:A:LEU:C	10	0.11
(1,170)	1:11:A:PHE:H	1:11:A:PHE:CB	7	0.11
(1,168)	1:11:A:PHE:H	1:10:A:LEU:CD2	2	0.11
(1,166)	1:11:A:PHE:H	1:10:A:LEU:CG	3	0.11
(1,166)	1:11:A:PHE:H	1:10:A:LEU:CG	8	0.11
(1,162)	1:10:A:LEU:H	1:6:A:GLU:C	7	0.11
(1,162)	1:10:A:LEU:H	1:6:A:GLU:C	12	0.11
(1,159)	1:10:A:LEU:H	1:10:A:LEU:CG	12	0.11
(1,149)	1:9:A:SER:H	1:8:A:GLN:CG	1	0.11
(1,147)	1:9:A:SER:H	1:8:A:GLN:CA	6	0.11
(1,143)	1:8:A:GLN:H	1:9:A:SER:CB	3	0.11
(1,143)	1:8:A:GLN:H	1:9:A:SER:CB	7	0.11
(1,136)	1:8:A:GLN:H	1:7:A:LEU:CB	1	0.11
(1,133)	1:8:A:GLN:H	1:4:A:GLU:CA	5	0.11
(1,123)	1:7:A:LEU:H	1:6:A:GLU:CA	5	0.11
(1,122)	1:7:A:LEU:H	1:4:A:GLU:CA	8	0.11
(1,116)	1:6:A:GLU:H	1:5:A:GLN:CG	7	0.11

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,116)	1:6:A:GLU:H	1:5:A:GLN:CG	11	0.11
(1,115)	1:6:A:GLU:H	1:5:A:GLN:CB	10	0.11
(1,105)	1:5:A:GLN:H	1:4:A:GLU:CB	4	0.11
(1,88)	1:3:A:THR:H	1:2:A:ALA:CB	8	0.11
(1,57)	1:-5:A:VAL:H	1:-5:A:VAL:CG2	3	0.11
(1,56)	1:-5:A:VAL:H	1:-5:A:VAL:CG1	1	0.11
(1,48)	1:-6:A:LEU:H	1:-6:A:LEU:CB	7	0.11
(1,44)	1:-7:A:GLY:H	1:-8:A:SER:CB	12	0.11
(1,1)	1:-17:A:SER:H	1:-18:A:GLY:CA	4	0.11
(3,100)	1:69:A:ALA:N	1:65:A:GLU:O	1	0.1
(3,96)	1:67:A:LYS:N	1:63:A:PHE:O	3	0.1
(3,67)	1:52:A:GLN:H	1:48:A:GLU:O	6	0.1
(3,67)	1:52:A:GLN:H	1:48:A:GLU:O	10	0.1
(3,62)	1:48:A:GLU:N	1:45:A:SER:OG	9	0.1
(3,61)	1:48:A:GLU:H	1:45:A:SER:OG	2	0.1
(3,48)	1:36:A:VAL:N	1:32:A:GLY:O	6	0.1
(3,25)	1:18:A:GLN:H	1:15:A:ASP:OD1	11	0.1
(1,809)	1:75:A:ASN:H	1:75:A:ASN:CB	3	0.1
(1,804)	1:74:A:SER:H	1:75:A:ASN:CB	5	0.1
(1,776)	1:71:A:LYS:H	1:67:A:LYS:C	10	0.1
(1,763)	1:70:A:VAL:H	1:71:A:LYS:CB	2	0.1
(1,761)	1:70:A:VAL:H	1:70:A:VAL:CG1	1	0.1
(1,758)	1:70:A:VAL:H	1:69:A:ALA:CB	12	0.1
(1,719)	1:66:A:LEU:H	1:62:A:THR:C	3	0.1
(1,714)	1:66:A:LEU:H	1:66:A:LEU:CB	9	0.1
(1,678)	1:63:A:PHE:H	1:62:A:THR:CG2	5	0.1
(1,678)	1:63:A:PHE:H	1:62:A:THR:CG2	8	0.1
(1,677)	1:63:A:PHE:H	1:62:A:THR:CB	2	0.1
(1,665)	1:62:A:THR:H	1:61:A:ILE:CG1	11	0.1
(1,656)	1:61:A:ILE:H	1:60:A:SER:CB	6	0.1
(1,656)	1:61:A:ILE:H	1:60:A:SER:CB	8	0.1
(1,625)	1:58:A:ASP:H	1:57:A:GLN:CG	8	0.1
(1,619)	1:57:A:GLN:H	1:57:A:GLN:CB	4	0.1
(1,611)	1:56:A:ASP:H	1:57:A:GLN:CA	9	0.1
(1,571)	1:52:A:GLN:H	1:48:A:GLU:CA	11	0.1
(1,570)	1:51:A:VAL:H	1:47:A:GLN:C	11	0.1
(1,540)	1:49:A:LEU:H	1:48:A:GLU:CG	1	0.1
(1,533)	1:48:A:GLU:H	1:48:A:GLU:CB	1	0.1
(1,533)	1:48:A:GLU:H	1:48:A:GLU:CB	4	0.1
(1,511)	1:45:A:SER:H	1:45:A:SER:CB	9	0.1
(1,511)	1:45:A:SER:H	1:45:A:SER:CB	11	0.1
(1,507)	1:45:A:SER:H	1:43:A:THR:CG2	9	0.1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,492)	1:43:A:THR:H	1:43:A:THR:CB	2	0.1
(1,479)	1:42:A:ASN:H	1:41:A:THR:CA	3	0.1
(1,458)	1:41:A:THR:H	1:37:A:ILE:CA	1	0.1
(1,447)	1:39:A:SER:H	1:35:A:ALA:C	3	0.1
(1,439)	1:38:A:SER:H	1:34:A:SER:C	1	0.1
(1,435)	1:38:A:SER:H	1:37:A:ILE:CD1	1	0.1
(1,424)	1:37:A:ILE:H	1:37:A:ILE:CD1	12	0.1
(1,321)	1:26:A:GLU:H	1:26:A:GLU:CB	11	0.1
(1,319)	1:26:A:GLU:H	1:25:A:ASN:CB	9	0.1
(1,312)	1:25:A:ASN:H	1:26:A:GLU:CG	5	0.1
(1,307)	1:25:A:ASN:H	1:24:A:ILE:CB	7	0.1
(1,305)	1:25:A:ASN:H	1:23:A:SER:CB	9	0.1
(1,267)	1:21:A:LYS:H	1:21:A:LYS:CE	1	0.1
(1,260)	1:21:A:LYS:H	1:19:A:ASP:CA	6	0.1
(1,244)	1:19:A:ASP:H	1:18:A:GLN:CB	9	0.1
(1,242)	1:19:A:ASP:H	1:17:A:ASP:CB	10	0.1
(1,239)	1:18:A:GLN:H	1:15:A:ASP:CG	4	0.1
(1,220)	1:17:A:ASP:H	1:16:A:ARG:CA	8	0.1
(1,195)	1:14:A:LEU:H	1:12:A:ASN:CB	2	0.1
(1,184)	1:13:A:THR:H	1:11:A:PHE:CB	5	0.1
(1,178)	1:12:A:ASN:H	1:12:A:ASN:CB	4	0.1
(1,149)	1:9:A:SER:H	1:8:A:GLN:CG	8	0.1
(1,137)	1:8:A:GLN:H	1:7:A:LEU:CG	1	0.1
(1,127)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:CB	4	0.1
(1,100)	1:4:A:GLU:H	1:5:A:GLN:CB	3	0.1
(1,86)	1:2:A:ALA:H	1:70:A:VAL:CG1	9	0.1
(1,80)	1:2:A:ALA:H	1:1:A:MET:CA	9	0.1
(1,76)	1:1:A:MET:H	1:0:A:HIS:CA	8	0.1
(1,63)	1:-3:A:ARG:H	1:-3:A:ARG:CG	8	0.1
(1,42)	1:-8:A:SER:H	1:-8:A:SER:CB	9	0.1
(1,35)	1:-9:A:SER:H	1:-10:A:HIS:CA	1	0.1
(1,5)	1:-16:A:SER:H	1:-18:A:GLY:CA	2	0.1

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

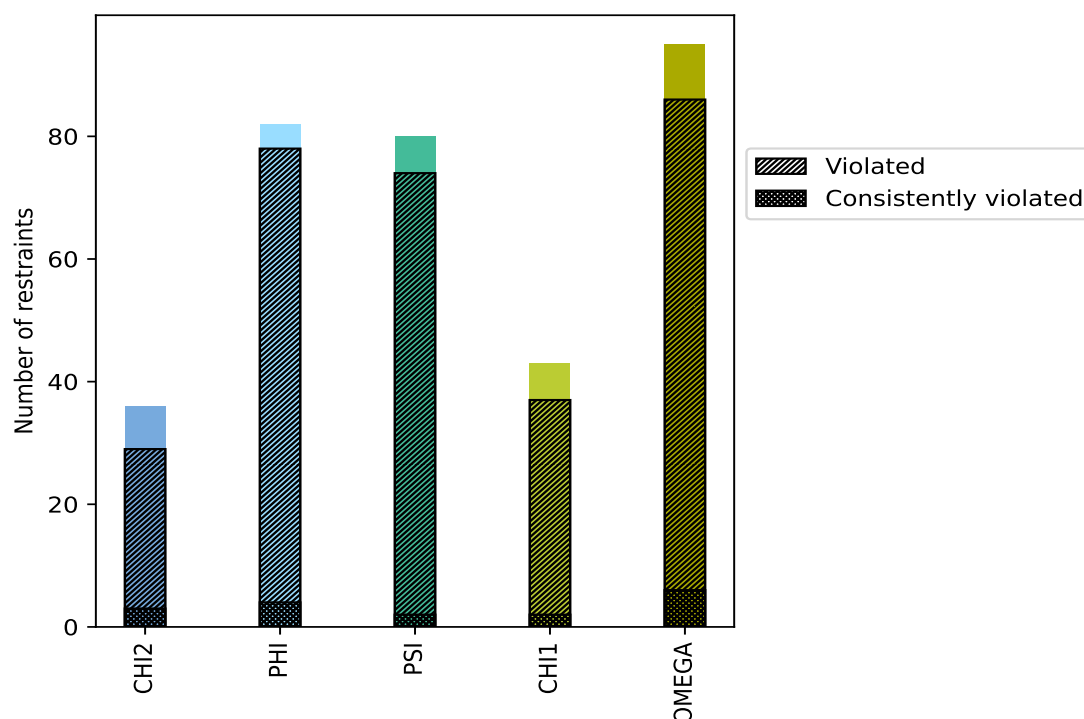
10.1 Summary of dihedral-angle violations [i](#)

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

Angle type	Count	% ¹	Violated ³			Consistently Violated ⁴		
			Count	% ²	% ¹	Count	% ²	% ¹
CHI2	36	10.7	29	80.6	8.6	3	8.3	0.9
PHI	82	24.4	78	95.1	23.2	4	4.9	1.2
PSI	80	23.8	74	92.5	22.0	2	2.5	0.6
CHI1	43	12.8	37	86.0	11.0	2	4.7	0.6
OMEGA	95	28.3	86	90.5	25.6	6	6.3	1.8
Total	336	100.0	304	90.5	90.5	17	5.1	5.1

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

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



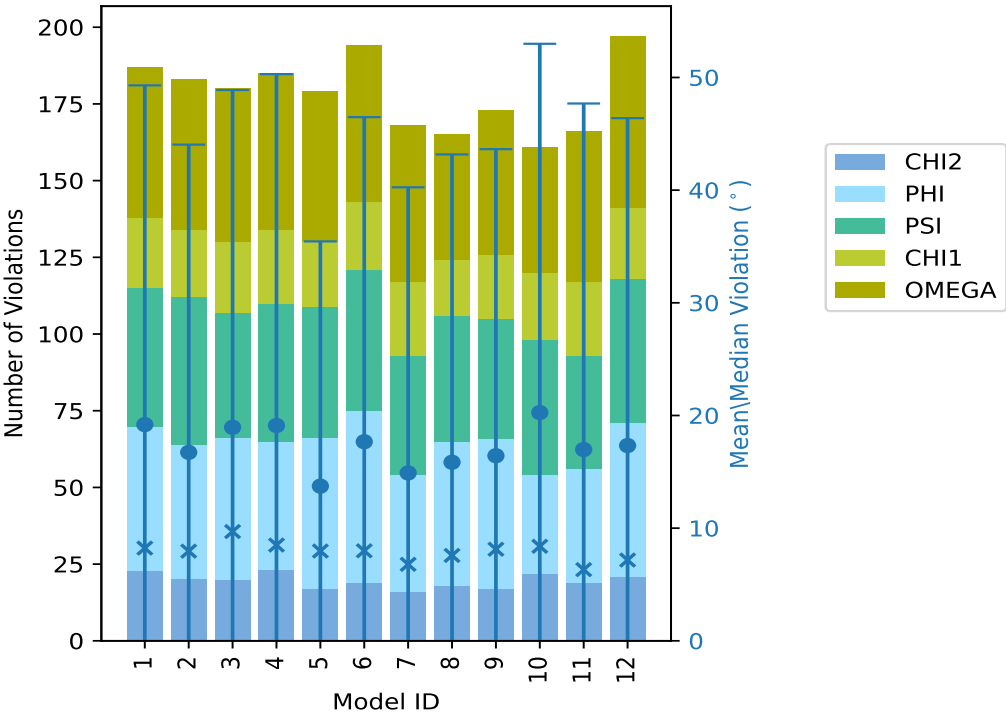
Violated and consistently violated restraints are shown using different hatch patterns in their respective categories

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

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

Model ID	Number of violations						Mean (°)	Max (°)	SD (°)	Median (°)
	CHI2	PHI	PSI	CHI1	OMEGA	Total				
1	23	47	45	23	49	187	19.19	155.69	30.11	8.23
2	20	44	48	22	49	183	16.73	170.55	27.31	7.96
3	20	46	41	23	50	180	18.95	168.85	29.94	9.7
4	23	42	45	24	51	185	19.11	162.82	31.19	8.5
5	17	49	43	21	49	179	13.73	158.15	21.72	7.97
6	19	56	46	22	51	194	17.67	161.1	28.81	7.99
7	16	38	39	24	51	168	14.9	155.65	25.35	6.79
8	18	47	41	18	41	165	15.85	169.65	27.32	7.58
9	17	49	39	21	47	173	16.43	157.32	27.21	8.13
10	22	32	44	22	41	161	20.26	162.42	32.73	8.39
11	19	37	37	24	49	166	16.98	154.65	30.71	6.32
12	21	50	47	23	56	197	17.33	168.67	29.06	7.17

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

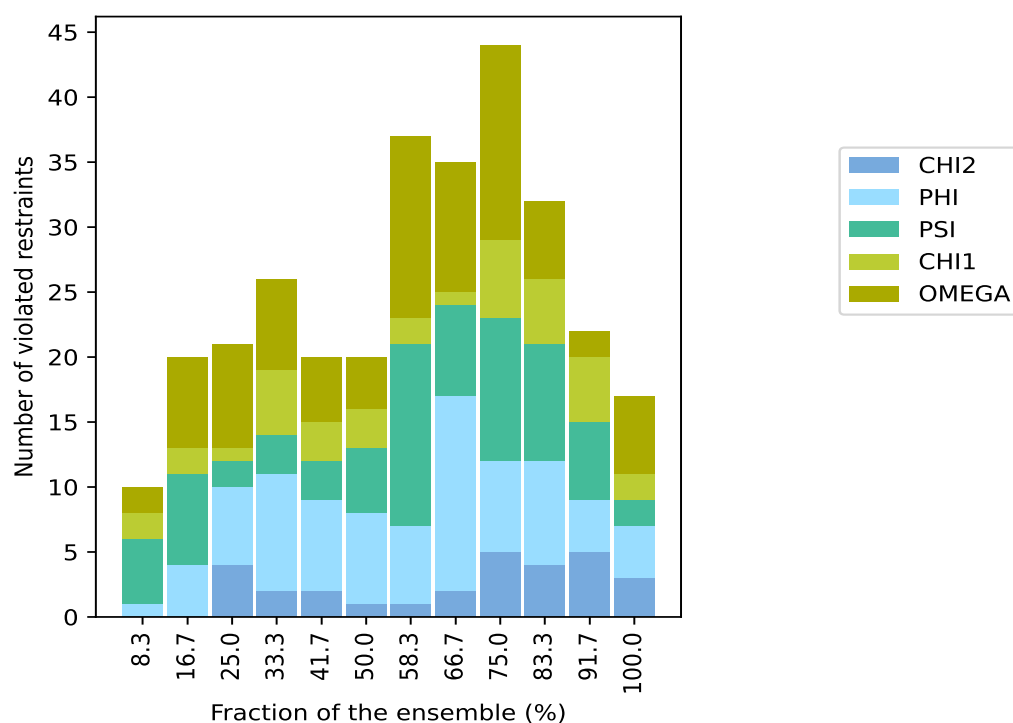
10.3 Dihedral-angle violation statistics for the ensemble [i](#)

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	
CHI2	PHI	PSI	CHI1	OMEGA	Total	Count ¹	%
0	1	5	2	2	10	1	8.3
0	4	7	2	7	20	2	16.7
4	6	2	1	8	21	3	25.0
2	9	3	5	7	26	4	33.3
2	7	3	3	5	20	5	41.7
1	7	5	3	4	20	6	50.0
1	6	14	2	14	37	7	58.3
2	15	7	1	10	35	8	66.7
5	7	11	6	15	44	9	75.0
4	8	9	5	6	32	10	83.3
5	4	6	5	2	22	11	91.7
3	4	2	2	6	17	12	100.0

¹ Number of models with violations

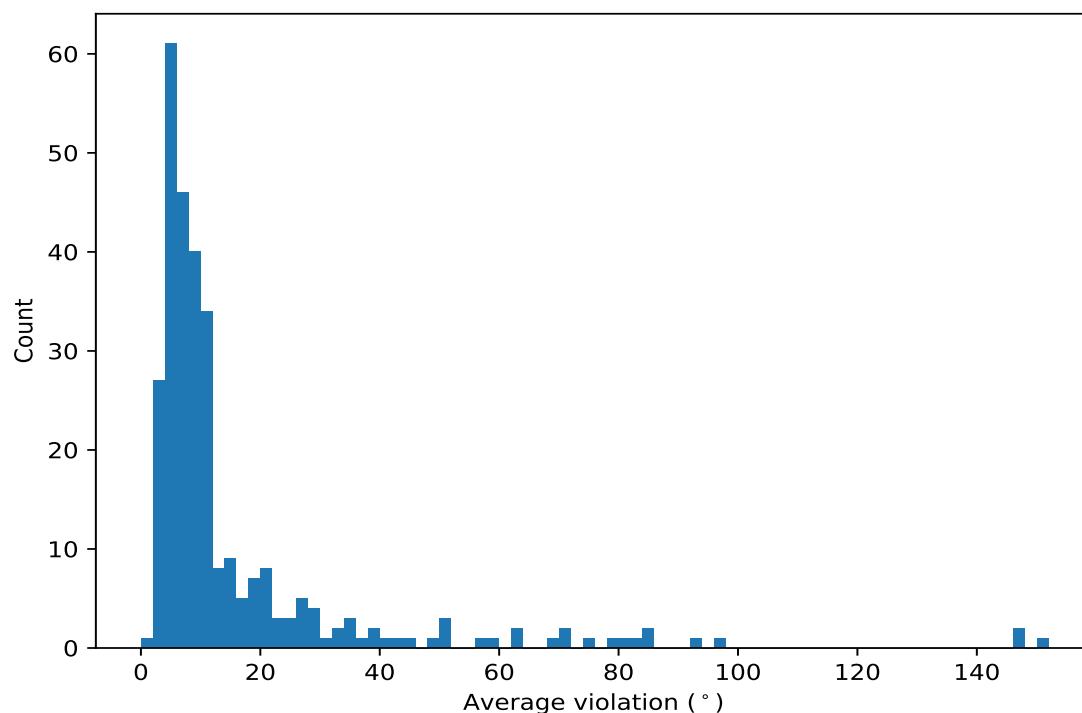
10.3.1 Bar graph : Dihedral-angle Violation statistics for the ensemble [i](#)



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
(1,46)	1:-3:A:ARG:C	1:-2:A:GLY:N	1:-2:A:GLY:CA	1:-2:A:GLY:C	12	150.17	13.78	152.85
(1,4)	1:-17:A:SER:C	1:-16:A:SER:N	1:-16:A:SER:CA	1:-16:A:SER:C	12	147.68	17.89	155.65
(1,2)	1:-17:A:SER:N	1:-17:A:SER:CA	1:-17:A:SER:C	1:-16:A:SER:N	12	146.41	22.69	154.43
(1,29)	1:-10:A:HIS:C	1:-9:A:SER:N	1:-9:A:SER:CA	1:-9:A:SER:C	12	85.31	24.91	91.06
(1,24)	1:-11:A:HIS:C	1:-10:A:HIS:N	1:-10:A:HIS:CA	1:-10:A:HIS:C	12	74.97	26.97	88.44
(1,192)	1:37:A:ILE:CA	1:37:A:ILE:CB	1:37:A:ILE:CG1	1:37:A:ILE:CD1	12	68.82	51.91	105.82
(1,134)	1:21:A:LYS:N	1:21:A:LYS:CA	1:21:A:LYS:CB	1:21:A:LYS:CG	12	36.2	47.93	9.25
(1,64)	1:4:A:GLU:N	1:4:A:GLU:CA	1:4:A:GLU:CB	1:4:A:GLU:CG	12	29.18	34.43	16.91
(1,123)	1:18:A:GLN:N	1:18:A:GLN:CA	1:18:A:GLN:C	1:19:A:ASP:N	12	20.48	7.63	22.66
(1,127)	1:19:A:ASP:CA	1:19:A:ASP:CB	1:19:A:ASP:CG	1:19:A:ASP:OD1	12	18.9	12.96	17.5
(1,135)	1:21:A:LYS:CA	1:21:A:LYS:CB	1:21:A:LYS:CG	1:21:A:LYS:CD	12	15.03	9.12	14.24
(1,211)	1:42:A:ASN:CA	1:42:A:ASN:C	1:43:A:THR:N	1:43:A:THR:CA	12	14.33	6.53	13.13
(1,111)	1:15:A:ASP:CA	1:15:A:ASP:C	1:16:A:ARG:N	1:16:A:ARG:CA	12	11.84	5.45	10.85

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Models ¹	Mean	SD ²	Median
(1,283)	1:61:A:ILE:CA	1:61:A:ILE:C	1:62:A:THR:N	1:62:A:THR:CA	12	11.42	3.96	10.22
(1,132)	1:20:A:GLY:CA	1:20:A:GLY:C	1:21:A:LYS:N	1:21:A:LYS:CA	12	11.16	6.44	10.79
(1,142)	1:22:A:ILE:CA	1:22:A:ILE:C	1:23:A:SER:N	1:23:A:SER:CA	12	10.28	6.15	9.88
(1,223)	1:46:A:PRO:CA	1:46:A:PRO:C	1:47:A:GLN:N	1:47:A:GLN:CA	12	10.14	3.54	9.57
(1,148)	1:24:A:ILE:CA	1:24:A:ILE:CB	1:24:A:ILE:CG1	1:24:A:ILE:CD1	11	96.03	31.62	100.49
(1,119)	1:17:A:ASP:CA	1:17:A:ASP:CB	1:17:A:ASP:CG	1:17:A:ASP:OD1	11	44.74	56.01	25.01
(1,265)	1:57:A:GLN:N	1:57:A:GLN:CA	1:57:A:GLN:C	1:58:A:ASP:N	11	35.7	11.37	35.08
(1,229)	1:48:A:GLU:N	1:48:A:GLU:CA	1:48:A:GLU:CB	1:48:A:GLU:CG	11	34.14	28.09	18.31
(1,288)	1:63:A:PHE:CA	1:63:A:PHE:CB	1:63:A:PHE:CG	1:63:A:PHE:CD1	11	33.39	33.62	22.4
(1,110)	1:15:A:ASP:N	1:15:A:ASP:CA	1:15:A:ASP:C	1:16:A:ARG:N	11	22.21	8.86	21.05
(1,267)	1:57:A:GLN:C	1:58:A:ASP:N	1:58:A:ASP:CA	1:58:A:ASP:C	11	16.61	15.48	10.74
(1,261)	1:56:A:ASP:CA	1:56:A:ASP:CB	1:56:A:ASP:CG	1:56:A:ASP:OD1	11	15.9	10.52	13.21
(1,259)	1:55:A:SER:C	1:56:A:ASP:N	1:56:A:ASP:CA	1:56:A:ASP:C	11	15.61	9.31	14.0
(1,170)	1:29:A:LEU:C	1:30:A:SER:N	1:30:A:SER:CA	1:30:A:SER:C	11	13.91	8.23	11.64
(1,65)	1:4:A:GLU:CA	1:4:A:GLU:CB	1:4:A:GLU:CG	1:4:A:GLU:CD	11	10.86	4.94	9.6
(1,120)	1:17:A:ASP:N	1:17:A:ASP:CA	1:17:A:ASP:C	1:18:A:GLN:N	11	10.37	6.64	9.48
(1,268)	1:58:A:ASP:N	1:58:A:ASP:CA	1:58:A:ASP:CB	1:58:A:ASP:CG	11	10.28	4.56	10.41
(1,225)	1:47:A:GLN:N	1:47:A:GLN:CA	1:47:A:GLN:CB	1:47:A:GLN:CG	11	9.22	6.22	6.73
(1,155)	1:26:A:GLU:N	1:26:A:GLU:CA	1:26:A:GLU:CB	1:26:A:GLU:CG	11	9.08	3.88	7.65
(1,242)	1:51:A:VAL:N	1:51:A:VAL:CA	1:51:A:VAL:CB	1:51:A:VAL:CG1	11	8.97	7.29	5.1
(1,277)	1:60:A:SER:N	1:60:A:SER:CA	1:60:A:SER:C	1:61:A:ILE:N	11	8.29	6.07	7.43
(1,78)	1:7:A:LEU:CA	1:7:A:LEU:C	1:8:A:GLN:N	1:8:A:GLN:CA	11	7.5	2.9	6.9
(1,152)	1:25:A:ASN:N	1:25:A:ASN:CA	1:25:A:ASN:C	1:26:A:GLU:N	11	7.41	5.36	5.56
(1,312)	1:69:A:ALA:N	1:69:A:ALA:CA	1:69:A:ALA:C	1:70:A:VAL:N	11	6.78	3.91	6.34
(1,71)	1:5:A:GLN:CA	1:5:A:GLN:C	1:6:A:GLU:N	1:6:A:GLU:CA	11	6.6	2.98	7.15
(1,279)	1:60:A:SER:C	1:61:A:ILE:N	1:61:A:ILE:CA	1:61:A:ILE:C	11	5.54	3.27	5.02
(1,114)	1:16:A:ARG:CA	1:16:A:ARG:CB	1:16:A:ARG:CG	1:16:A:ARG:CD	10	58.86	51.31	64.81
(1,112)	1:15:A:ASP:C	1:16:A:ARG:N	1:16:A:ARG:CA	1:16:A:ARG:C	10	38.89	19.3	44.29
(1,323)	1:72:A:LYS:N	1:72:A:LYS:CA	1:72:A:LYS:CB	1:72:A:LYS:CG	10	27.09	36.25	10.88
(1,168)	1:29:A:LEU:N	1:29:A:LEU:CA	1:29:A:LEU:C	1:30:A:SER:N	10	26.86	15.49	27.22
(1,257)	1:55:A:SER:N	1:55:A:SER:CA	1:55:A:SER:C	1:56:A:ASP:N	10	23.21	13.99	19.71
(1,264)	1:56:A:ASP:C	1:57:A:GLN:N	1:57:A:GLN:CA	1:57:A:GLN:C	10	21.72	7.82	22.0
(1,253)	1:54:A:ASP:N	1:54:A:ASP:CA	1:54:A:ASP:C	1:55:A:SER:N	10	20.36	10.44	22.39
(1,80)	1:8:A:GLN:CA	1:8:A:GLN:CB	1:8:A:GLN:CG	1:8:A:GLN:CD	10	20.23	32.2	10.04
(1,262)	1:56:A:ASP:N	1:56:A:ASP:CA	1:56:A:ASP:C	1:57:A:GLN:N	10	19.73	13.2	21.11
(1,219)	1:44:A:ASN:C	1:45:A:SER:N	1:45:A:SER:CA	1:45:A:SER:C	10	17.53	4.48	17.72
(1,301)	1:66:A:LEU:CA	1:66:A:LEU:CB	1:66:A:LEU:CG	1:66:A:LEU:CD1	10	14.61	5.58	17.24
(1,250)	1:53:A:TYR:C	1:54:A:ASP:N	1:54:A:ASP:CA	1:54:A:ASP:C	10	13.02	6.53	13.79
(1,62)	1:3:A:THR:CA	1:3:A:THR:C	1:4:A:GLU:N	1:4:A:GLU:CA	10	11.71	6.35	9.75
(1,282)	1:61:A:ILE:N	1:61:A:ILE:CA	1:61:A:ILE:C	1:62:A:THR:N	10	11.54	6.03	10.2
(1,122)	1:17:A:ASP:C	1:18:A:GLN:N	1:18:A:GLN:CA	1:18:A:GLN:C	10	10.86	4.2	11.54
(1,3)	1:-17:A:SER:CA	1:-17:A:SER:C	1:-16:A:SER:N	1:-16:A:SER:CA	10	10.71	4.99	9.58
(1,139)	1:22:A:ILE:N	1:22:A:ILE:CA	1:22:A:ILE:CB	1:22:A:ILE:CG1	10	10.44	5.99	9.42
(1,284)	1:61:A:ILE:C	1:62:A:THR:N	1:62:A:THR:CA	1:62:A:THR:C	10	10.3	9.5	6.06
(1,181)	1:34:A:SER:N	1:34:A:SER:CA	1:34:A:SER:C	1:35:A:ALA:N	10	9.79	7.75	7.23
(1,214)	1:43:A:THR:N	1:43:A:THR:CA	1:43:A:THR:C	1:44:A:ASN:N	10	9.36	4.98	8.28
(1,138)	1:21:A:LYS:C	1:22:A:ILE:N	1:22:A:ILE:CA	1:22:A:ILE:C	10	8.8	7.78	5.32
(1,300)	1:66:A:LEU:N	1:66:A:LEU:CA	1:66:A:LEU:CB	1:66:A:LEU:CG	10	8.63	5.34	7.49
(1,296)	1:65:A:GLU:CA	1:65:A:GLU:CB	1:65:A:GLU:CG	1:65:A:GLU:CD	10	8.61	7.19	6.28
(1,105)	1:14:A:LEU:N	1:14:A:LEU:CA	1:14:A:LEU:C	1:15:A:ASP:N	10	8.23	7.88	4.42
(1,254)	1:54:A:ASP:CA	1:54:A:ASP:C	1:55:A:SER:N	1:55:A:SER:CA	10	7.41	5.38	5.37

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Models ¹	Mean	SD ²	Median
(1,251)	1:54:A:ASP:N	1:54:A:ASP:CA	1:54:A:ASP:CB	1:54:A:ASP:CG	10	6.87	2.49	8.28
(1,310)	1:68:A:LYS:CA	1:68:A:LYS:C	1:69:A:ALA:N	1:69:A:ALA:CA	10	6.12	2.21	6.24
(1,202)	1:39:A:SER:C	1:40:A:GLU:N	1:40:A:GLU:CA	1:40:A:GLU:C	10	5.93	3.57	5.54
(1,67)	1:4:A:GLU:CA	1:4:A:GLU:C	1:5:A:GLN:N	1:5:A:GLN:CA	10	5.93	3.8	5.44
(1,187)	1:36:A:VAL:N	1:36:A:VAL:CA	1:36:A:VAL:CB	1:36:A:VAL:CG1	10	5.35	3.63	3.68
(1,336)	1:76:A:LEU:CA	1:76:A:LEU:C	1:77:A:THR:N	1:77:A:THR:CA	10	5.09	3.28	4.46
(1,157)	1:26:A:GLU:N	1:26:A:GLU:CA	1:26:A:GLU:C	1:27:A:LEU:N	10	4.84	3.96	3.56
(1,324)	1:72:A:LYS:CA	1:72:A:LYS:CB	1:72:A:LYS:CG	1:72:A:LYS:CD	9	70.75	54.75	113.91
(1,191)	1:37:A:ILE:N	1:37:A:ILE:CA	1:37:A:ILE:CB	1:37:A:ILE:CG1	9	50.26	38.49	70.94
(1,281)	1:61:A:ILE:CA	1:61:A:ILE:CB	1:61:A:ILE:CG1	1:61:A:ILE:CD1	9	48.1	55.86	9.74
(1,20)	1:-12:A:HIS:N	1:-12:A:HIS:CA	1:-12:A:HIS:C	1:-11:A:HIS:N	9	28.69	14.66	27.89
(1,220)	1:45:A:SER:N	1:45:A:SER:CA	1:45:A:SER:CB	1:45:A:SER:OG	9	28.6	36.26	10.95
(1,230)	1:48:A:GLU:CA	1:48:A:GLU:CB	1:48:A:GLU:CG	1:48:A:GLU:CD	9	19.5	31.18	6.11
(1,97)	1:12:A:ASN:N	1:12:A:ASN:CA	1:12:A:ASN:C	1:13:A:THR:N	9	19.27	15.48	19.89
(1,234)	1:49:A:LEU:N	1:49:A:LEU:CA	1:49:A:LEU:CB	1:49:A:LEU:CG	9	15.61	8.8	13.9
(1,325)	1:72:A:LYS:N	1:72:A:LYS:CA	1:72:A:LYS:C	1:73:A:ALA:N	9	14.73	16.04	7.14
(1,96)	1:11:A:PHE:C	1:12:A:ASN:N	1:12:A:ASN:CA	1:12:A:ASN:C	9	13.05	5.86	13.09
(1,222)	1:46:A:PRO:N	1:46:A:PRO:CA	1:46:A:PRO:C	1:47:A:GLN:N	9	11.8	5.39	11.9
(1,107)	1:14:A:LEU:C	1:15:A:ASP:N	1:15:A:ASP:CA	1:15:A:ASP:C	9	11.79	6.56	9.52
(1,131)	1:20:A:GLY:N	1:20:A:GLY:CA	1:20:A:GLY:C	1:21:A:LYS:N	9	11.2	5.7	10.76
(1,41)	1:-5:A:VAL:CA	1:-5:A:VAL:C	1:-4:A:PRO:N	1:-4:A:PRO:CA	9	11.01	7.45	10.91
(1,103)	1:13:A:THR:C	1:14:A:LEU:N	1:14:A:LEU:CA	1:14:A:LEU:C	9	10.21	7.53	13.25
(1,92)	1:11:A:PHE:N	1:11:A:PHE:CA	1:11:A:PHE:CB	1:11:A:PHE:CG	9	9.37	9.29	6.13
(1,106)	1:14:A:LEU:CA	1:14:A:LEU:C	1:15:A:ASP:N	1:15:A:ASP:CA	9	9.0	4.66	9.21
(1,145)	1:23:A:SER:CA	1:23:A:SER:C	1:24:A:ILE:N	1:24:A:ILE:CA	9	8.64	3.87	9.31
(1,5)	1:-16:A:SER:N	1:-16:A:SER:CA	1:-16:A:SER:C	1:-15:A:HIS:N	9	8.59	4.13	7.19
(1,66)	1:4:A:GLU:N	1:4:A:GLU:CA	1:4:A:GLU:C	1:5:A:GLN:N	9	8.48	5.57	7.59
(1,118)	1:17:A:ASP:N	1:17:A:ASP:CA	1:17:A:ASP:CB	1:17:A:ASP:CG	9	8.42	4.38	9.64
(1,241)	1:50:A:LEU:C	1:51:A:VAL:N	1:51:A:VAL:CA	1:51:A:VAL:C	9	8.41	5.59	6.56
(1,109)	1:15:A:ASP:CA	1:15:A:ASP:CB	1:15:A:ASP:CG	1:15:A:ASP:OD1	9	8.39	5.47	6.63
(1,263)	1:56:A:ASP:CA	1:56:A:ASP:C	1:57:A:GLN:N	1:57:A:GLN:CA	9	7.9	5.73	5.02
(1,156)	1:26:A:GLU:CA	1:26:A:GLU:CB	1:26:A:GLU:CG	1:26:A:GLU:CD	9	7.82	4.24	6.05
(1,116)	1:16:A:ARG:CA	1:16:A:ARG:C	1:17:A:ASP:N	1:17:A:ASP:CA	9	7.53	3.6	6.87
(1,204)	1:40:A:GLU:N	1:40:A:GLU:CA	1:40:A:GLU:C	1:41:A:THR:N	9	7.27	3.55	6.86
(1,160)	1:27:A:LEU:N	1:27:A:LEU:CA	1:27:A:LEU:C	1:28:A:PHE:N	9	7.27	3.78	7.35
(1,72)	1:5:A:GLN:C	1:6:A:GLU:N	1:6:A:GLU:CA	1:6:A:GLU:C	9	6.21	5.34	3.55
(1,278)	1:60:A:SER:CA	1:60:A:SER:C	1:61:A:ILE:N	1:61:A:ILE:CA	9	5.95	3.63	5.71
(1,294)	1:64:A:GLU:C	1:65:A:GLU:N	1:65:A:GLU:CA	1:65:A:GLU:C	9	5.72	2.66	4.57
(1,189)	1:36:A:VAL:CA	1:36:A:VAL:C	1:37:A:ILE:N	1:37:A:ILE:CA	9	5.62	2.95	4.65
(1,326)	1:72:A:LYS:CA	1:72:A:LYS:C	1:73:A:ALA:N	1:73:A:ALA:CA	9	5.55	2.77	4.05
(1,260)	1:56:A:ASP:N	1:56:A:ASP:CA	1:56:A:ASP:CB	1:56:A:ASP:CG	9	5.32	4.02	3.41
(1,258)	1:55:A:SER:CA	1:55:A:SER:C	1:56:A:ASP:N	1:56:A:ASP:CA	9	5.22	3.52	4.54
(1,303)	1:66:A:LEU:CA	1:66:A:LEU:C	1:67:A:LYS:N	1:67:A:LYS:CA	9	5.06	2.84	4.13
(1,89)	1:10:A:LEU:N	1:10:A:LEU:CA	1:10:A:LEU:C	1:11:A:PHE:N	9	5.06	1.94	5.41
(1,81)	1:8:A:GLN:N	1:8:A:GLN:CA	1:8:A:GLN:C	1:9:A:SER:N	9	4.99	3.39	3.38
(1,102)	1:13:A:THR:CA	1:13:A:THR:C	1:14:A:LEU:N	1:14:A:LEU:CA	9	4.8	4.55	3.76
(1,321)	1:71:A:LYS:CA	1:71:A:LYS:C	1:72:A:LYS:N	1:72:A:LYS:CA	9	4.7	2.99	3.42
(1,173)	1:31:A:PRO:CA	1:31:A:PRO:C	1:32:A:GLY:N	1:32:A:GLY:CA	9	4.44	2.87	3.91
(1,87)	1:9:A:SER:C	1:10:A:LEU:N	1:10:A:LEU:CA	1:10:A:LEU:C	9	4.35	2.88	3.19
(1,176)	1:32:A:GLY:CA	1:32:A:GLY:C	1:33:A:LEU:N	1:33:A:LEU:CA	9	4.21	2.83	3.11
(1,86)	1:9:A:SER:CA	1:9:A:SER:C	1:10:A:LEU:N	1:10:A:LEU:CA	9	3.57	2.47	2.71

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Models ¹	Mean	SD ²	Median
(1,88)	1:10:A:LEU:CA	1:10:A:LEU:CB	1:10:A:LEU:CG	1:10:A:LEU:CD1	8	51.04	45.73	47.79
(1,255)	1:54:A:ASP:C	1:55:A:SER:N	1:55:A:SER:CA	1:55:A:SER:C	8	40.97	26.85	37.1
(1,280)	1:61:A:ILE:N	1:61:A:ILE:CA	1:61:A:ILE:CB	1:61:A:ILE:CG1	8	34.26	42.97	14.14
(1,37)	1:-7:A:GLY:C	1:-6:A:LEU:N	1:-6:A:LEU:CA	1:-6:A:LEU:C	8	21.68	12.43	22.32
(1,162)	1:27:A:LEU:C	1:28:A:PHE:N	1:28:A:PHE:CA	1:28:A:PHE:C	8	20.63	13.1	20.46
(1,166)	1:28:A:PHE:C	1:29:A:LEU:N	1:29:A:LEU:CA	1:29:A:LEU:C	8	16.8	6.88	16.93
(1,274)	1:59:A:GLY:CA	1:59:A:GLY:C	1:60:A:SER:N	1:60:A:SER:CA	8	12.64	5.73	11.18
(1,210)	1:42:A:ASN:N	1:42:A:ASN:CA	1:42:A:ASN:C	1:43:A:THR:N	8	12.5	5.28	11.72
(1,218)	1:44:A:ASN:CA	1:44:A:ASN:C	1:45:A:SER:N	1:45:A:SER:CA	8	10.89	4.39	10.5
(1,136)	1:21:A:LYS:N	1:21:A:LYS:CA	1:21:A:LYS:C	1:22:A:ILE:N	8	10.69	6.58	11.96
(1,38)	1:-6:A:LEU:CA	1:-6:A:LEU:C	1:-5:A:VAL:N	1:-5:A:VAL:CA	8	10.4	6.73	7.43
(1,133)	1:20:A:GLY:C	1:21:A:LYS:N	1:21:A:LYS:CA	1:21:A:LYS:C	8	10.32	9.2	6.64
(1,63)	1:3:A:THR:C	1:4:A:GLU:N	1:4:A:GLU:CA	1:4:A:GLU:C	8	10.26	6.7	9.54
(1,322)	1:71:A:LYS:C	1:72:A:LYS:N	1:72:A:LYS:CA	1:72:A:LYS:C	8	9.79	10.7	4.08
(1,252)	1:54:A:ASP:CA	1:54:A:ASP:CB	1:54:A:ASP:CG	1:54:A:ASP:OD1	8	9.42	4.87	8.07
(1,252)	1:54:A:ASP:CA	1:54:A:ASP:CB	1:54:A:ASP:CG	1:54:A:ASP:OD1	8	9.42	4.87	8.07
(1,246)	1:52:A:GLN:N	1:52:A:GLN:CA	1:52:A:GLN:C	1:53:A:TYR:N	8	9.1	5.82	9.62
(1,221)	1:45:A:SER:CA	1:45:A:SER:C	1:46:A:PRO:N	1:46:A:PRO:CA	8	8.79	7.04	5.06
(1,238)	1:49:A:LEU:C	1:50:A:LEU:N	1:50:A:LEU:CA	1:50:A:LEU:C	8	8.48	5.73	8.14
(1,239)	1:50:A:LEU:N	1:50:A:LEU:CA	1:50:A:LEU:C	1:51:A:VAL:N	8	7.56	6.19	4.93
(1,200)	1:39:A:SER:N	1:39:A:SER:CA	1:39:A:SER:C	1:40:A:GLU:N	8	7.48	4.44	6.9
(1,179)	1:33:A:LEU:CA	1:33:A:LEU:C	1:34:A:SER:N	1:34:A:SER:CA	8	7.24	3.56	7.88
(1,272)	1:58:A:ASP:C	1:59:A:GLY:N	1:59:A:GLY:CA	1:59:A:GLY:C	8	6.97	8.7	3.65
(1,153)	1:25:A:ASN:CA	1:25:A:ASN:C	1:26:A:GLU:N	1:26:A:GLU:CA	8	6.41	4.26	5.86
(1,183)	1:34:A:SER:C	1:35:A:ALA:N	1:35:A:ALA:CA	1:35:A:ALA:C	8	6.04	1.57	5.82
(1,154)	1:25:A:ASN:C	1:26:A:GLU:N	1:26:A:GLU:CA	1:26:A:GLU:C	8	5.81	4.94	3.34
(1,182)	1:34:A:SER:CA	1:34:A:SER:C	1:35:A:ALA:N	1:35:A:ALA:CA	8	5.4	2.43	5.46
(1,293)	1:64:A:GLU:CA	1:64:A:GLU:C	1:65:A:GLU:N	1:65:A:GLU:CA	8	5.31	3.22	5.16
(1,195)	1:37:A:ILE:C	1:38:A:SER:N	1:38:A:SER:CA	1:38:A:SER:C	8	5.26	3.95	3.08
(1,228)	1:47:A:GLN:C	1:48:A:GLU:N	1:48:A:GLU:CA	1:48:A:GLU:C	8	5.16	3.45	3.78
(1,165)	1:28:A:PHE:CA	1:28:A:PHE:C	1:29:A:LEU:N	1:29:A:LEU:CA	8	4.85	3.3	4.64
(1,121)	1:17:A:ASP:CA	1:17:A:ASP:C	1:18:A:GLN:N	1:18:A:GLN:CA	8	4.62	2.38	4.28
(1,226)	1:47:A:GLN:N	1:47:A:GLN:CA	1:47:A:GLN:C	1:48:A:GLU:N	8	4.57	2.55	3.14
(1,85)	1:9:A:SER:N	1:9:A:SER:CA	1:9:A:SER:C	1:10:A:LEU:N	8	4.47	2.89	3.77
(1,233)	1:48:A:GLU:C	1:49:A:LEU:N	1:49:A:LEU:CA	1:49:A:LEU:C	8	4.13	2.36	3.7
(1,159)	1:26:A:GLU:C	1:27:A:LEU:N	1:27:A:LEU:CA	1:27:A:LEU:C	8	3.91	1.71	4.26
(1,8)	1:-15:A:HIS:CA	1:-15:A:HIS:CB	1:-15:A:HIS:CG	1:-15:A:HIS:ND1	7	80.11	46.72	80.21
(1,164)	1:28:A:PHE:N	1:28:A:PHE:CA	1:28:A:PHE:C	1:29:A:LEU:N	7	27.84	11.55	24.65
(1,40)	1:-5:A:VAL:N	1:-5:A:VAL:CA	1:-5:A:VAL:CB	1:-5:A:VAL:CG1	7	24.29	36.73	10.06
(1,47)	1:-2:A:GLY:N	1:-2:A:GLY:CA	1:-2:A:GLY:C	1:-1:A:SER:N	7	20.0	9.56	18.41
(1,115)	1:16:A:ARG:N	1:16:A:ARG:CA	1:16:A:ARG:C	1:17:A:ASP:N	7	19.14	15.4	13.27
(1,61)	1:3:A:THR:N	1:3:A:THR:CA	1:3:A:THR:C	1:4:A:GLU:N	7	13.39	12.36	8.31
(1,117)	1:16:A:ARG:C	1:17:A:ASP:N	1:17:A:ASP:CA	1:17:A:ASP:C	7	10.8	10.08	6.28
(1,172)	1:30:A:SER:CA	1:30:A:SER:C	1:31:A:PRO:N	1:31:A:PRO:CA	7	10.77	6.57	10.17
(1,56)	1:1:A:MET:N	1:1:A:MET:CA	1:1:A:MET:C	1:2:A:ALA:N	7	10.74	7.8	7.62
(1,217)	1:44:A:ASN:N	1:44:A:ASN:CA	1:44:A:ASN:C	1:45:A:SER:N	7	9.96	9.29	8.93
(1,126)	1:19:A:ASP:N	1:19:A:ASP:CA	1:19:A:ASP:CB	1:19:A:ASP:CG	7	9.84	7.78	6.18
(1,1)	1:-18:A:GLY:CA	1:-18:A:GLY:C	1:-17:A:SER:N	1:-17:A:SER:CA	7	8.2	6.36	4.34
(1,286)	1:62:A:THR:CA	1:62:A:THR:C	1:63:A:PHE:N	1:63:A:PHE:CA	7	8.07	4.64	7.61
(1,292)	1:64:A:GLU:N	1:64:A:GLU:CA	1:64:A:GLU:C	1:65:A:GLU:N	7	6.78	2.42	5.95
(1,21)	1:-12:A:HIS:CA	1:-12:A:HIS:C	1:-11:A:HIS:N	1:-11:A:HIS:CA	7	6.71	4.82	4.72

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Models ¹	Mean	SD ²	Median
(1,186)	1:35:A:ALA:C	1:36:A:VAL:N	1:36:A:VAL:CA	1:36:A:VAL:C	7	6.34	3.62	5.57
(1,74)	1:6:A:GLU:N	1:6:A:GLU:CA	1:6:A:GLU:C	1:7:A:LEU:N	7	6.21	3.94	4.28
(1,151)	1:24:A:ILE:C	1:25:A:ASN:N	1:25:A:ASN:CA	1:25:A:ASN:C	7	6.16	4.12	4.6
(1,308)	1:67:A:LYS:C	1:68:A:LYS:N	1:68:A:LYS:CA	1:68:A:LYS:C	7	6.11	3.59	4.36
(1,95)	1:11:A:PHE:CA	1:11:A:PHE:C	1:12:A:ASN:N	1:12:A:ASN:CA	7	6.04	4.65	5.55
(1,70)	1:5:A:GLN:N	1:5:A:GLN:CA	1:5:A:GLN:C	1:6:A:GLU:N	7	6.01	3.05	5.98
(1,82)	1:8:A:GLN:CA	1:8:A:GLN:C	1:9:A:SER:N	1:9:A:SER:CA	7	5.61	3.79	6.51
(1,158)	1:26:A:GLU:CA	1:26:A:GLU:C	1:27:A:LEU:N	1:27:A:LEU:CA	7	5.58	4.69	3.01
(1,137)	1:21:A:LYS:CA	1:21:A:LYS:C	1:22:A:ILE:N	1:22:A:ILE:CA	7	5.43	3.78	5.87
(1,68)	1:4:A:GLU:C	1:5:A:GLN:N	1:5:A:GLN:CA	1:5:A:GLN:C	7	5.43	3.69	5.82
(1,169)	1:29:A:LEU:CA	1:29:A:LEU:C	1:30:A:SER:N	1:30:A:SER:CA	7	5.41	2.81	4.81
(1,309)	1:68:A:LYS:N	1:68:A:LYS:CA	1:68:A:LYS:C	1:69:A:ALA:N	7	5.33	3.55	3.53
(1,188)	1:36:A:VAL:N	1:36:A:VAL:CA	1:36:A:VAL:C	1:37:A:ILE:N	7	5.31	3.2	4.57
(1,75)	1:6:A:GLU:CA	1:6:A:GLU:C	1:7:A:LEU:N	1:7:A:LEU:CA	7	5.1	2.59	5.15
(1,236)	1:49:A:LEU:N	1:49:A:LEU:CA	1:49:A:LEU:C	1:50:A:LEU:N	7	5.06	2.81	4.3
(1,185)	1:35:A:ALA:CA	1:35:A:ALA:C	1:36:A:VAL:N	1:36:A:VAL:CA	7	4.9	2.79	4.85
(1,244)	1:51:A:VAL:CA	1:51:A:VAL:C	1:52:A:GLN:N	1:52:A:GLN:CA	7	4.6	4.01	2.21
(1,302)	1:66:A:LEU:N	1:66:A:LEU:CA	1:66:A:LEU:C	1:67:A:LYS:N	7	4.07	2.77	2.7
(1,77)	1:7:A:LEU:N	1:7:A:LEU:CA	1:7:A:LEU:C	1:8:A:GLN:N	7	3.96	2.51	3.21
(1,227)	1:47:A:GLN:CA	1:47:A:GLN:C	1:48:A:GLU:N	1:48:A:GLU:CA	7	3.9	2.17	3.32
(1,330)	1:74:A:SER:CA	1:74:A:SER:C	1:75:A:ASN:N	1:75:A:ASN:CA	7	3.65	2.22	3.18
(1,76)	1:6:A:GLU:C	1:7:A:LEU:N	1:7:A:LEU:CA	1:7:A:LEU:C	7	3.57	2.11	2.93
(1,319)	1:71:A:LYS:CA	1:71:A:LYS:CB	1:71:A:LYS:CG	1:71:A:LYS:CD	6	27.16	37.92	11.11
(1,315)	1:70:A:VAL:N	1:70:A:VAL:CA	1:70:A:VAL:CB	1:70:A:VAL:CG1	6	25.74	39.46	9.51
(1,33)	1:-8:A:SER:N	1:-8:A:SER:CA	1:-8:A:SER:C	1:-7:A:GLY:N	6	22.14	19.54	16.4
(1,42)	1:-4:A:PRO:N	1:-4:A:PRO:CA	1:-4:A:PRO:C	1:-3:A:ARG:N	6	16.79	5.17	16.71
(1,245)	1:51:A:VAL:C	1:52:A:GLN:N	1:52:A:GLN:CA	1:52:A:GLN:C	6	15.37	4.95	14.31
(1,178)	1:33:A:LEU:N	1:33:A:LEU:CA	1:33:A:LEU:C	1:34:A:SER:N	6	11.75	10.63	6.04
(1,273)	1:59:A:GLY:N	1:59:A:GLY:CA	1:59:A:GLY:C	1:60:A:SER:N	6	10.61	6.66	10.09
(1,328)	1:73:A:ALA:CA	1:73:A:ALA:C	1:74:A:SER:N	1:74:A:SER:CA	6	10.44	4.21	8.44
(1,299)	1:65:A:GLU:C	1:66:A:LEU:N	1:66:A:LEU:CA	1:66:A:LEU:C	6	8.3	5.13	6.84
(1,212)	1:42:A:ASN:C	1:43:A:THR:N	1:43:A:THR:CA	1:43:A:THR:C	6	8.28	6.96	6.72
(1,108)	1:15:A:ASP:N	1:15:A:ASP:CA	1:15:A:ASP:CB	1:15:A:ASP:CG	6	8.26	7.58	6.03
(1,295)	1:65:A:GLU:N	1:65:A:GLU:CA	1:65:A:GLU:CB	1:65:A:GLU:CG	6	7.26	3.27	6.97
(1,130)	1:19:A:ASP:C	1:20:A:GLY:N	1:20:A:GLY:CA	1:20:A:GLY:C	6	7.01	3.04	6.38
(1,266)	1:57:A:GLN:CA	1:57:A:GLN:C	1:58:A:ASP:N	1:58:A:ASP:CA	6	6.54	2.44	6.72
(1,125)	1:18:A:GLN:C	1:19:A:ASP:N	1:19:A:ASP:CA	1:19:A:ASP:C	6	6.43	4.17	5.48
(1,205)	1:40:A:GLU:CA	1:40:A:GLU:C	1:41:A:THR:N	1:41:A:THR:CA	6	6.41	2.93	6.24
(1,231)	1:48:A:GLU:N	1:48:A:GLU:CA	1:48:A:GLU:C	1:49:A:LEU:N	6	6.34	2.19	7.04
(1,291)	1:63:A:PHE:C	1:64:A:GLU:N	1:64:A:GLU:CA	1:64:A:GLU:C	6	5.64	3.5	5.51
(1,290)	1:63:A:PHE:CA	1:63:A:PHE:C	1:64:A:GLU:N	1:64:A:GLU:CA	6	5.14	1.46	4.53
(1,91)	1:10:A:LEU:C	1:11:A:PHE:N	1:11:A:PHE:CA	1:11:A:PHE:C	6	3.71	1.72	3.66
(1,44)	1:-3:A:ARG:CA	1:-3:A:ARG:CB	1:-3:A:ARG:CG	1:-3:A:ARG:CD	5	70.56	49.67	104.18
(1,73)	1:6:A:GLU:N	1:6:A:GLU:CA	1:6:A:GLU:CB	1:6:A:GLU:CG	5	26.23	36.52	7.86
(1,13)	1:-14:A:HIS:N	1:-14:A:HIS:CA	1:-14:A:HIS:C	1:-13:A:HIS:N	5	12.95	4.6	13.39
(1,305)	1:67:A:LYS:CA	1:67:A:LYS:CB	1:67:A:LYS:CG	1:67:A:LYS:CD	5	12.51	7.26	15.6
(1,175)	1:32:A:GLY:N	1:32:A:GLY:CA	1:32:A:GLY:C	1:33:A:LEU:N	5	10.3	13.36	3.73
(1,199)	1:39:A:SER:N	1:39:A:SER:CA	1:39:A:SER:CB	1:39:A:SER:OG	5	8.93	5.7	11.0
(1,184)	1:35:A:ALA:N	1:35:A:ALA:CA	1:35:A:ALA:C	1:36:A:VAL:N	5	8.86	5.26	7.46
(1,79)	1:7:A:LEU:C	1:8:A:GLN:N	1:8:A:GLN:CA	1:8:A:GLN:C	5	7.94	3.9	7.62
(1,215)	1:43:A:THR:CA	1:43:A:THR:C	1:44:A:ASN:N	1:44:A:ASN:CA	5	7.08	3.96	7.7

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Models ¹	Mean	SD ²	Median
(1,240)	1:50:A:LEU:CA	1:50:A:LEU:C	1:51:A:VAL:N	1:51:A:VAL:CA	5	6.53	3.34	6.48
(1,98)	1:12:A:ASN:CA	1:12:A:ASN:C	1:13:A:THR:N	1:13:A:THR:CA	5	6.46	3.4	6.69
(1,194)	1:37:A:ILE:CA	1:37:A:ILE:C	1:38:A:SER:N	1:38:A:SER:CA	5	6.29	5.41	2.52
(1,314)	1:69:A:ALA:C	1:70:A:VAL:N	1:70:A:VAL:CA	1:70:A:VAL:C	5	5.76	5.29	2.88
(1,100)	1:13:A:THR:N	1:13:A:THR:CA	1:13:A:THR:CB	1:13:A:THR:OG1	5	5.48	3.83	3.81
(1,206)	1:40:A:GLU:C	1:41:A:THR:N	1:41:A:THR:CA	1:41:A:THR:C	5	5.31	3.66	3.24
(1,60)	1:2:A:ALA:C	1:3:A:THR:N	1:3:A:THR:CA	1:3:A:THR:C	5	4.27	2.04	3.92
(1,190)	1:36:A:VAL:C	1:37:A:ILE:N	1:37:A:ILE:CA	1:37:A:ILE:C	5	4.0	1.53	3.89
(1,311)	1:68:A:LYS:C	1:69:A:ALA:N	1:69:A:ALA:CA	1:69:A:ALA:C	5	3.78	2.25	2.7
(1,317)	1:70:A:VAL:CA	1:70:A:VAL:C	1:71:A:LYS:N	1:71:A:LYS:CA	5	3.41	0.68	3.24
(1,304)	1:66:A:LEU:C	1:67:A:LYS:N	1:67:A:LYS:CA	1:67:A:LYS:C	5	3.26	1.53	2.82
(1,329)	1:73:A:ALA:C	1:74:A:SER:N	1:74:A:SER:CA	1:74:A:SER:C	4	92.48	52.15	122.39
(1,203)	1:40:A:GLU:N	1:40:A:GLU:CA	1:40:A:GLU:CB	1:40:A:GLU:CG	4	83.24	8.75	84.53
(1,26)	1:-10:A:HIS:CA	1:-10:A:HIS:CB	1:-10:A:HIS:CG	1:-10:A:HIS:ND1	4	63.13	55.22	61.58
(1,333)	1:75:A:ASN:C	1:76:A:LEU:N	1:76:A:LEU:CA	1:76:A:LEU:C	4	57.55	22.16	57.1
(1,18)	1:-12:A:HIS:N	1:-12:A:HIS:CA	1:-12:A:HIS:CB	1:-12:A:HIS:CG	4	42.28	43.8	21.54
(1,25)	1:-10:A:HIS:N	1:-10:A:HIS:CA	1:-10:A:HIS:CB	1:-10:A:HIS:CG	4	30.28	8.77	29.3
(1,147)	1:24:A:ILE:N	1:24:A:ILE:CA	1:24:A:ILE:CB	1:24:A:ILE:CG1	4	29.68	2.12	28.47
(1,69)	1:5:A:GLN:N	1:5:A:GLN:CA	1:5:A:GLN:CB	1:5:A:GLN:CG	4	25.35	4.82	25.98
(1,17)	1:-13:A:HIS:C	1:-12:A:HIS:N	1:-12:A:HIS:CA	1:-12:A:HIS:C	4	15.83	9.69	15.48
(1,232)	1:48:A:GLU:CA	1:48:A:GLU:C	1:49:A:LEU:N	1:49:A:LEU:CA	4	8.22	3.16	7.07
(1,198)	1:38:A:SER:C	1:39:A:SER:N	1:39:A:SER:CA	1:39:A:SER:C	4	8.01	5.91	7.94
(1,174)	1:31:A:PRO:C	1:32:A:GLY:N	1:32:A:GLY:CA	1:32:A:GLY:C	4	7.65	4.46	8.36
(1,235)	1:49:A:LEU:CA	1:49:A:LEU:CB	1:49:A:LEU:CG	1:49:A:LEU:CD1	4	6.79	5.3	5.64
(1,101)	1:13:A:THR:N	1:13:A:THR:CA	1:13:A:THR:C	1:14:A:LEU:N	4	6.36	3.49	6.01
(1,209)	1:41:A:THR:C	1:42:A:ASN:N	1:42:A:ASN:CA	1:42:A:ASN:C	4	6.22	5.89	3.76
(1,161)	1:27:A:LEU:CA	1:27:A:LEU:C	1:28:A:PHE:N	1:28:A:PHE:CA	4	5.69	5.16	3.52
(1,180)	1:33:A:LEU:C	1:34:A:SER:N	1:34:A:SER:CA	1:34:A:SER:C	4	5.42	2.79	5.8
(1,320)	1:71:A:LYS:N	1:71:A:LYS:CA	1:71:A:LYS:C	1:72:A:LYS:N	4	5.37	2.74	5.07
(1,307)	1:67:A:LYS:CA	1:67:A:LYS:C	1:68:A:LYS:N	1:68:A:LYS:CA	4	4.34	1.42	4.84
(1,313)	1:69:A:ALA:CA	1:69:A:ALA:C	1:70:A:VAL:N	1:70:A:VAL:CA	4	3.93	1.4	4.44
(1,90)	1:10:A:LEU:CA	1:10:A:LEU:C	1:11:A:PHE:N	1:11:A:PHE:CA	4	3.72	2.06	3.27
(1,83)	1:8:A:GLN:C	1:9:A:SER:N	1:9:A:SER:CA	1:9:A:SER:C	4	3.62	1.88	3.54
(1,224)	1:46:A:PRO:C	1:47:A:GLN:N	1:47:A:GLN:CA	1:47:A:GLN:C	4	3.2	1.15	3.16
(1,237)	1:49:A:LEU:CA	1:49:A:LEU:C	1:50:A:LEU:N	1:50:A:LEU:CA	4	2.32	0.96	1.99
(1,297)	1:65:A:GLU:N	1:65:A:GLU:CA	1:65:A:GLU:C	1:66:A:LEU:N	4	2.26	1.09	1.94
(1,124)	1:18:A:GLN:CA	1:18:A:GLN:C	1:19:A:ASP:N	1:19:A:ASP:CA	4	1.42	0.41	1.21
(1,167)	1:29:A:LEU:CA	1:29:A:LEU:CB	1:29:A:LEU:CG	1:29:A:LEU:CD1	3	85.94	3.86	85.78
(1,30)	1:-9:A:SER:N	1:-9:A:SER:CA	1:-9:A:SER:CB	1:-9:A:SER:OG	3	79.51	5.4	80.02
(1,163)	1:28:A:PHE:CA	1:28:A:PHE:CB	1:28:A:PHE:CG	1:28:A:PHE:CD1	3	51.2	5.12	52.81
(1,99)	1:12:A:ASN:C	1:13:A:THR:N	1:13:A:THR:CA	1:13:A:THR:C	3	33.16	20.33	24.64
(1,104)	1:14:A:LEU:CA	1:14:A:LEU:CB	1:14:A:LEU:CG	1:14:A:LEU:CD1	3	20.33	7.09	24.51
(1,177)	1:32:A:GLY:C	1:33:A:LEU:N	1:33:A:LEU:CA	1:33:A:LEU:C	3	19.44	11.92	23.93
(1,39)	1:-6:A:LEU:C	1:-5:A:VAL:N	1:-5:A:VAL:CA	1:-5:A:VAL:C	3	17.45	3.54	19.23
(1,58)	1:1:A:MET:C	1:2:A:ALA:N	1:2:A:ALA:CA	1:2:A:ALA:C	3	10.91	7.53	9.73
(1,57)	1:1:A:MET:CA	1:1:A:MET:C	1:2:A:ALA:N	1:2:A:ALA:CA	3	8.49	4.91	6.48
(1,318)	1:70:A:VAL:C	1:71:A:LYS:N	1:71:A:LYS:CA	1:71:A:LYS:C	3	7.18	4.94	6.84
(1,59)	1:2:A:ALA:CA	1:2:A:ALA:C	1:3:A:THR:N	1:3:A:THR:CA	3	6.13	1.97	6.95
(1,54)	1:0:A:HIS:CA	1:0:A:HIS:C	1:1:A:MET:N	1:1:A:MET:CA	3	5.8	1.38	6.5
(1,247)	1:52:A:GLN:CA	1:52:A:GLN:C	1:53:A:TYR:N	1:53:A:TYR:CA	3	4.99	0.98	4.97
(1,140)	1:22:A:ILE:CA	1:22:A:ILE:CB	1:22:A:ILE:CG1	1:22:A:ILE:CD1	3	4.56	3.45	3.2

Continued on next page...

Continued from previous page...

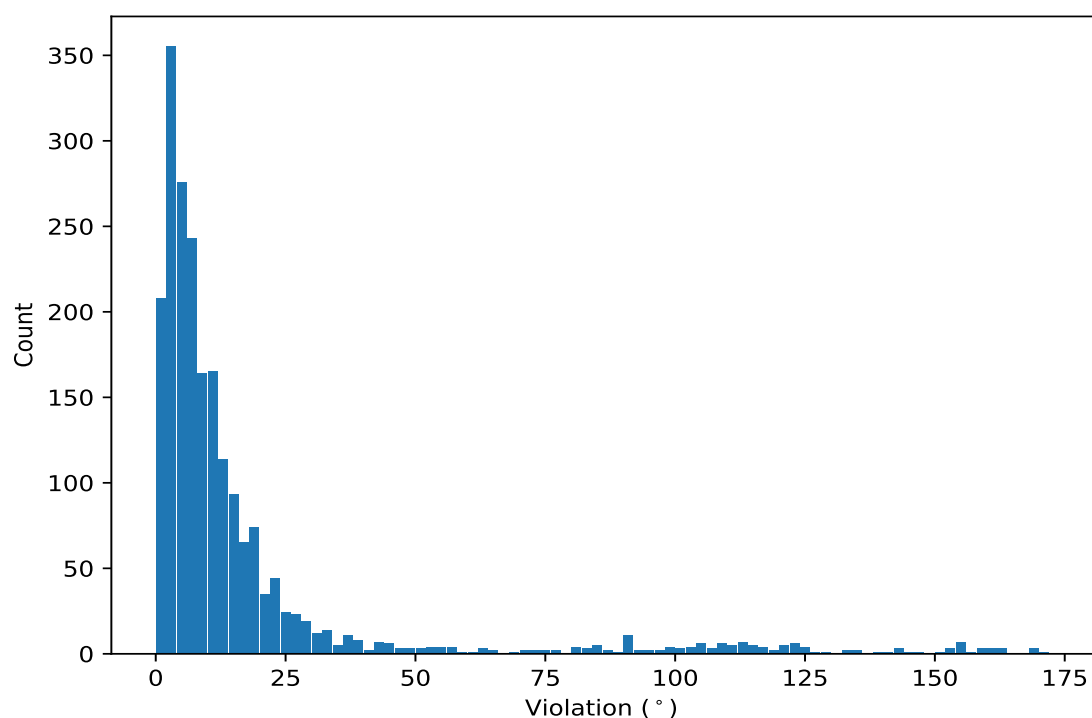
Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Models ¹	Mean	SD ²	Median
(1,332)	1:75:A:ASN:CA	1:75:A:ASN:C	1:76:A:LEU:N	1:76:A:LEU:CA	3	4.52	4.32	1.88
(1,28)	1:-10:A:HIS:CA	1:-10:A:HIS:C	1:-9:A:SER:N	1:-9:A:SER:CA	3	3.86	2.3	3.91
(1,306)	1:67:A:LYS:N	1:67:A:LYS:CA	1:67:A:LYS:C	1:68:A:LYS:N	3	3.7	2.57	2.59
(1,316)	1:70:A:VAL:N	1:70:A:VAL:CA	1:70:A:VAL:C	1:71:A:LYS:N	3	3.46	2.15	2.48
(1,6)	1:-16:A:SER:CA	1:-16:A:SER:C	1:-15:A:HIS:N	1:-15:A:HIS:CA	3	3.14	1.33	3.59
(1,146)	1:23:A:SER:C	1:24:A:ILE:N	1:24:A:ILE:CA	1:24:A:ILE:C	3	3.0	0.46	3.04
(1,32)	1:-9:A:SER:CA	1:-9:A:SER:C	1:-8:A:SER:N	1:-8:A:SER:CA	3	2.65	1.1	2.4
(1,27)	1:-10:A:HIS:N	1:-10:A:HIS:CA	1:-10:A:HIS:C	1:-9:A:SER:N	2	62.86	58.28	62.86
(1,171)	1:30:A:SER:N	1:30:A:SER:CA	1:30:A:SER:CB	1:30:A:SER:OG	2	38.0	1.07	38.0
(1,51)	1:-1:A:SER:N	1:-1:A:SER:CA	1:-1:A:SER:C	1:0:A:HIS:N	2	18.61	11.51	18.61
(1,275)	1:59:A:GLY:C	1:60:A:SER:N	1:60:A:SER:CA	1:60:A:SER:C	2	10.84	6.02	10.84
(1,331)	1:74:A:SER:C	1:75:A:ASN:N	1:75:A:ASN:CA	1:75:A:ASN:C	2	10.68	8.47	10.68
(1,196)	1:38:A:SER:N	1:38:A:SER:CA	1:38:A:SER:C	1:39:A:SER:N	2	9.12	6.56	9.12
(1,35)	1:-7:A:GLY:N	1:-7:A:GLY:CA	1:-7:A:GLY:C	1:-6:A:LEU:N	2	9.08	1.26	9.08
(1,249)	1:53:A:TYR:CA	1:53:A:TYR:C	1:54:A:ASP:N	1:54:A:ASP:CA	2	8.94	3.99	8.94
(1,243)	1:51:A:VAL:N	1:51:A:VAL:CA	1:51:A:VAL:C	1:52:A:GLN:N	2	8.27	6.84	8.27
(1,334)	1:76:A:LEU:N	1:76:A:LEU:CA	1:76:A:LEU:CB	1:76:A:LEU:CG	2	6.44	4.6	6.44
(1,143)	1:22:A:ILE:C	1:23:A:SER:N	1:23:A:SER:CA	1:23:A:SER:C	2	6.25	4.58	6.25
(1,14)	1:-14:A:HIS:CA	1:-14:A:HIS:C	1:-13:A:HIS:N	1:-13:A:HIS:CA	2	5.85	1.1	5.85
(1,34)	1:-8:A:SER:CA	1:-8:A:SER:C	1:-7:A:GLY:N	1:-7:A:GLY:CA	2	5.38	4.19	5.38
(1,141)	1:22:A:ILE:N	1:22:A:ILE:CA	1:22:A:ILE:C	1:23:A:SER:N	2	4.43	0.98	4.43
(1,327)	1:72:A:LYS:C	1:73:A:ALA:N	1:73:A:ALA:CA	1:73:A:ALA:C	2	4.28	2.92	4.28
(1,197)	1:38:A:SER:CA	1:38:A:SER:C	1:39:A:SER:N	1:39:A:SER:CA	2	3.97	1.58	3.97
(1,285)	1:62:A:THR:N	1:62:A:THR:CA	1:62:A:THR:C	1:63:A:PHE:N	2	2.74	0.97	2.74
(1,52)	1:-1:A:SER:CA	1:-1:A:SER:C	1:0:A:HIS:N	1:0:A:HIS:CA	2	2.6	0.09	2.6
(1,150)	1:24:A:ILE:CA	1:24:A:ILE:C	1:25:A:ASN:N	1:25:A:ASN:CA	2	2.56	1.2	2.56
(1,201)	1:39:A:SER:CA	1:39:A:SER:C	1:40:A:GLU:N	1:40:A:GLU:CA	2	2.5	0.64	2.5

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 (°)
(1,46)	1:-3:A:ARG:C	1:-2:A:GLY:N	1:-2:A:GLY:CA	1:-2:A:GLY:C	2	170.55
(1,4)	1:-17:A:SER:C	1:-16:A:SER:N	1:-16:A:SER:CA	1:-16:A:SER:C	8	169.65
(1,2)	1:-17:A:SER:N	1:-17:A:SER:CA	1:-17:A:SER:C	1:-16:A:SER:N	3	168.85
(1,119)	1:-17:A:ASP:CA	1:-17:A:ASP:CB	1:-17:A:ASP:CG	1:-17:A:ASP:OD1	12	168.67
(1,2)	1:-17:A:SER:N	1:-17:A:SER:CA	1:-17:A:SER:C	1:-16:A:SER:N	4	162.82
(1,46)	1:-3:A:ARG:C	1:-2:A:GLY:N	1:-2:A:GLY:CA	1:-2:A:GLY:C	10	162.42
(1,4)	1:-17:A:SER:C	1:-16:A:SER:N	1:-16:A:SER:CA	1:-16:A:SER:C	3	162.03
(1,2)	1:-17:A:SER:N	1:-17:A:SER:CA	1:-17:A:SER:C	1:-16:A:SER:N	6	161.1
(1,2)	1:-17:A:SER:N	1:-17:A:SER:CA	1:-17:A:SER:C	1:-16:A:SER:N	12	160.46
(1,46)	1:-3:A:ARG:C	1:-2:A:GLY:N	1:-2:A:GLY:CA	1:-2:A:GLY:C	8	160.4
(1,4)	1:-17:A:SER:C	1:-16:A:SER:N	1:-16:A:SER:CA	1:-16:A:SER:C	4	159.91
(1,46)	1:-3:A:ARG:C	1:-2:A:GLY:N	1:-2:A:GLY:CA	1:-2:A:GLY:C	3	159.74
(1,2)	1:-17:A:SER:N	1:-17:A:SER:CA	1:-17:A:SER:C	1:-16:A:SER:N	5	158.15
(1,46)	1:-3:A:ARG:C	1:-2:A:GLY:N	1:-2:A:GLY:CA	1:-2:A:GLY:C	9	157.32
(1,4)	1:-17:A:SER:C	1:-16:A:SER:N	1:-16:A:SER:CA	1:-16:A:SER:C	1	155.69
(1,4)	1:-17:A:SER:C	1:-16:A:SER:N	1:-16:A:SER:CA	1:-16:A:SER:C	9	155.67
(1,4)	1:-17:A:SER:C	1:-16:A:SER:N	1:-16:A:SER:CA	1:-16:A:SER:C	7	155.65
(1,4)	1:-17:A:SER:C	1:-16:A:SER:N	1:-16:A:SER:CA	1:-16:A:SER:C	10	155.65
(1,2)	1:-17:A:SER:N	1:-17:A:SER:CA	1:-17:A:SER:C	1:-16:A:SER:N	11	154.65
(1,46)	1:-3:A:ARG:C	1:-2:A:GLY:N	1:-2:A:GLY:CA	1:-2:A:GLY:C	5	154.57
(1,2)	1:-17:A:SER:N	1:-17:A:SER:CA	1:-17:A:SER:C	1:-16:A:SER:N	9	154.2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,119)	1:17:A:ASP:CA	1:17:A:ASP:CB	1:17:A:ASP:CG	1:17:A:ASP:OD1	11	153.06
(1,4)	1:-17:A:SER:C	1:-16:A:SER:N	1:-16:A:SER:CA	1:-16:A:SER:C	11	152.75
(1,2)	1:-17:A:SER:N	1:-17:A:SER:CA	1:-17:A:SER:C	1:-16:A:SER:N	10	152.15
(1,46)	1:-3:A:ARG:C	1:-2:A:GLY:N	1:-2:A:GLY:CA	1:-2:A:GLY:C	11	151.13
(1,46)	1:-3:A:ARG:C	1:-2:A:GLY:N	1:-2:A:GLY:CA	1:-2:A:GLY:C	1	147.21
(1,4)	1:-17:A:SER:C	1:-16:A:SER:N	1:-16:A:SER:CA	1:-16:A:SER:C	6	145.46
(1,8)	1:-15:A:HIS:CA	1:-15:A:HIS:CB	1:-15:A:HIS:CG	1:-15:A:HIS:ND1	4	143.27
(1,46)	1:-3:A:ARG:C	1:-2:A:GLY:N	1:-2:A:GLY:CA	1:-2:A:GLY:C	6	142.56
(1,46)	1:-3:A:ARG:C	1:-2:A:GLY:N	1:-2:A:GLY:CA	1:-2:A:GLY:C	7	142.02
(1,2)	1:-17:A:SER:N	1:-17:A:SER:CA	1:-17:A:SER:C	1:-16:A:SER:N	7	141.14
(1,46)	1:-3:A:ARG:C	1:-2:A:GLY:N	1:-2:A:GLY:CA	1:-2:A:GLY:C	4	138.17
(1,4)	1:-17:A:SER:C	1:-16:A:SER:N	1:-16:A:SER:CA	1:-16:A:SER:C	5	135.92
(1,2)	1:-17:A:SER:N	1:-17:A:SER:CA	1:-17:A:SER:C	1:-16:A:SER:N	8	134.35
(1,288)	1:63:A:PHE:CA	1:63:A:PHE:CB	1:63:A:PHE:CG	1:63:A:PHE:CD1	10	133.17
(1,281)	1:61:A:ILE:CA	1:61:A:ILE:CB	1:61:A:ILE:CG1	1:61:A:ILE:CD1	12	132.24
(1,26)	1:-10:A:HIS:CA	1:-10:A:HIS:CB	1:-10:A:HIS:CG	1:-10:A:HIS:ND1	1	128.16
(1,2)	1:-17:A:SER:N	1:-17:A:SER:CA	1:-17:A:SER:C	1:-16:A:SER:N	1	127.09
(1,324)	1:72:A:LYS:CA	1:72:A:LYS:CB	1:72:A:LYS:CG	1:72:A:LYS:CD	2	125.65
(1,134)	1:21:A:LYS:N	1:21:A:LYS:CA	1:21:A:LYS:CB	1:21:A:LYS:CG	1	124.52
(1,281)	1:61:A:ILE:CA	1:61:A:ILE:CB	1:61:A:ILE:CG1	1:61:A:ILE:CD1	10	124.37
(1,148)	1:24:A:ILE:CA	1:24:A:ILE:CB	1:24:A:ILE:CG1	1:24:A:ILE:CD1	9	124.25
(1,281)	1:61:A:ILE:CA	1:61:A:ILE:CB	1:61:A:ILE:CG1	1:61:A:ILE:CD1	11	123.37
(1,8)	1:-15:A:HIS:CA	1:-15:A:HIS:CB	1:-15:A:HIS:CG	1:-15:A:HIS:ND1	2	123.37
(1,148)	1:24:A:ILE:CA	1:24:A:ILE:CB	1:24:A:ILE:CG1	1:24:A:ILE:CD1	7	123.19
(1,329)	1:73:A:ALA:C	1:74:A:SER:N	1:74:A:SER:CA	1:74:A:SER:C	11	122.99
(1,329)	1:73:A:ALA:C	1:74:A:SER:N	1:74:A:SER:CA	1:74:A:SER:C	10	122.98
(1,324)	1:72:A:LYS:CA	1:72:A:LYS:CB	1:72:A:LYS:CG	1:72:A:LYS:CD	1	122.64
(1,329)	1:73:A:ALA:C	1:74:A:SER:N	1:74:A:SER:CA	1:74:A:SER:C	12	121.8
(1,192)	1:37:A:ILE:CA	1:37:A:ILE:CB	1:37:A:ILE:CG1	1:37:A:ILE:CD1	6	121.17
(1,27)	1:-10:A:HIS:N	1:-10:A:HIS:CA	1:-10:A:HIS:C	1:-9:A:SER:N	12	121.14
(1,324)	1:72:A:LYS:CA	1:72:A:LYS:CB	1:72:A:LYS:CG	1:72:A:LYS:CD	4	120.89
(1,148)	1:24:A:ILE:CA	1:24:A:ILE:CB	1:24:A:ILE:CG1	1:24:A:ILE:CD1	8	120.74
(1,44)	1:-3:A:ARG:CA	1:-3:A:ARG:CB	1:-3:A:ARG:CG	1:-3:A:ARG:CD	4	119.34
(1,134)	1:21:A:LYS:N	1:21:A:LYS:CA	1:21:A:LYS:CB	1:21:A:LYS:CG	2	118.92
(1,192)	1:37:A:ILE:CA	1:37:A:ILE:CB	1:37:A:ILE:CG1	1:37:A:ILE:CD1	1	117.62
(1,18)	1:-12:A:HIS:N	1:-12:A:HIS:CA	1:-12:A:HIS:CB	1:-12:A:HIS:CG	11	117.52
(1,192)	1:37:A:ILE:CA	1:37:A:ILE:CB	1:37:A:ILE:CG1	1:37:A:ILE:CD1	8	116.89
(1,46)	1:-3:A:ARG:C	1:-2:A:GLY:N	1:-2:A:GLY:CA	1:-2:A:GLY:C	12	116.01
(1,8)	1:-15:A:HIS:CA	1:-15:A:HIS:CB	1:-15:A:HIS:CG	1:-15:A:HIS:ND1	10	115.69
(1,80)	1:8:A:GLN:CA	1:8:A:GLN:CB	1:8:A:GLN:CG	1:8:A:GLN:CD	10	115.55
(1,29)	1:-10:A:HIS:C	1:-9:A:SER:N	1:-9:A:SER:CA	1:-9:A:SER:C	3	115.44
(1,4)	1:-17:A:SER:C	1:-16:A:SER:N	1:-16:A:SER:CA	1:-16:A:SER:C	2	114.57
(1,324)	1:72:A:LYS:CA	1:72:A:LYS:CB	1:72:A:LYS:CG	1:72:A:LYS:CD	6	114.23
(1,29)	1:-10:A:HIS:C	1:-9:A:SER:N	1:-9:A:SER:CA	1:-9:A:SER:C	7	113.97
(1,324)	1:72:A:LYS:CA	1:72:A:LYS:CB	1:72:A:LYS:CG	1:72:A:LYS:CD	3	113.91
(1,134)	1:21:A:LYS:N	1:21:A:LYS:CA	1:21:A:LYS:CB	1:21:A:LYS:CG	4	113.61
(1,315)	1:70:A:VAL:N	1:70:A:VAL:CA	1:70:A:VAL:CB	1:70:A:VAL:CG1	10	113.54
(1,40)	1:-5:A:VAL:N	1:-5:A:VAL:CA	1:-5:A:VAL:CB	1:-5:A:VAL:CG1	9	113.33
(1,29)	1:-10:A:HIS:C	1:-9:A:SER:N	1:-9:A:SER:CA	1:-9:A:SER:C	2	112.18
(1,114)	1:16:A:ARG:CA	1:16:A:ARG:CB	1:16:A:ARG:CG	1:16:A:ARG:CD	12	112.03
(1,114)	1:16:A:ARG:CA	1:16:A:ARG:CB	1:16:A:ARG:CG	1:16:A:ARG:CD	6	111.93

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,114)	1:16:A:ARG:CA	1:16:A:ARG:CB	1:16:A:ARG:CG	1:16:A:ARG:CD	4	111.87
(1,114)	1:16:A:ARG:CA	1:16:A:ARG:CB	1:16:A:ARG:CG	1:16:A:ARG:CD	3	111.44
(1,319)	1:71:A:LYS:CA	1:71:A:LYS:CB	1:71:A:LYS:CG	1:71:A:LYS:CD	12	111.4
(1,192)	1:37:A:ILE:CA	1:37:A:ILE:CB	1:37:A:ILE:CG1	1:37:A:ILE:CD1	3	111.14
(1,280)	1:61:A:ILE:N	1:61:A:ILE:CA	1:61:A:ILE:CB	1:61:A:ILE:CG1	3	109.97
(1,64)	1:4:A:GLU:N	1:4:A:GLU:CA	1:4:A:GLU:CB	1:4:A:GLU:CG	12	109.87
(1,4)	1:-17:A:SER:C	1:-16:A:SER:N	1:-16:A:SER:CA	1:-16:A:SER:C	12	109.2
(1,192)	1:37:A:ILE:CA	1:37:A:ILE:CB	1:37:A:ILE:CG1	1:37:A:ILE:CD1	9	108.97
(1,44)	1:-3:A:ARG:CA	1:-3:A:ARG:CB	1:-3:A:ARG:CG	1:-3:A:ARG:CD	2	108.61
(1,192)	1:37:A:ILE:CA	1:37:A:ILE:CB	1:37:A:ILE:CG1	1:37:A:ILE:CD1	2	108.44
(1,26)	1:-10:A:HIS:CA	1:-10:A:HIS:CB	1:-10:A:HIS:CG	1:-10:A:HIS:ND1	4	107.0
(1,148)	1:24:A:ILE:CA	1:24:A:ILE:CB	1:24:A:ILE:CG1	1:24:A:ILE:CD1	6	106.7
(1,280)	1:61:A:ILE:N	1:61:A:ILE:CA	1:61:A:ILE:CB	1:61:A:ILE:CG1	6	106.19
(1,230)	1:48:A:GLU:CA	1:48:A:GLU:CB	1:48:A:GLU:CG	1:48:A:GLU:CD	10	105.7
(1,323)	1:72:A:LYS:N	1:72:A:LYS:CA	1:72:A:LYS:CB	1:72:A:LYS:CG	3	105.38
(1,29)	1:-10:A:HIS:C	1:-9:A:SER:N	1:-9:A:SER:CA	1:-9:A:SER:C	11	104.93
(1,24)	1:-11:A:HIS:C	1:-10:A:HIS:N	1:-10:A:HIS:CA	1:-10:A:HIS:C	8	104.71
(1,88)	1:10:A:LEU:CA	1:10:A:LEU:CB	1:10:A:LEU:CG	1:10:A:LEU:CD1	1	104.69
(1,44)	1:-3:A:ARG:CA	1:-3:A:ARG:CB	1:-3:A:ARG:CG	1:-3:A:ARG:CD	1	104.18
(1,192)	1:37:A:ILE:CA	1:37:A:ILE:CB	1:37:A:ILE:CG1	1:37:A:ILE:CD1	7	103.19
(1,88)	1:10:A:LEU:CA	1:10:A:LEU:CB	1:10:A:LEU:CG	1:10:A:LEU:CD1	4	102.3
(1,24)	1:-11:A:HIS:C	1:-10:A:HIS:N	1:-10:A:HIS:CA	1:-10:A:HIS:C	6	102.26
(1,148)	1:24:A:ILE:CA	1:24:A:ILE:CB	1:24:A:ILE:CG1	1:24:A:ILE:CD1	4	102.25
(1,148)	1:24:A:ILE:CA	1:24:A:ILE:CB	1:24:A:ILE:CG1	1:24:A:ILE:CD1	10	100.49
(1,64)	1:4:A:GLU:N	1:4:A:GLU:CA	1:4:A:GLU:CB	1:4:A:GLU:CG	11	100.45
(1,114)	1:16:A:ARG:CA	1:16:A:ARG:CB	1:16:A:ARG:CG	1:16:A:ARG:CD	1	100.17
(1,148)	1:24:A:ILE:CA	1:24:A:ILE:CB	1:24:A:ILE:CG1	1:24:A:ILE:CD1	5	99.81
(1,73)	1:6:A:GLU:N	1:6:A:GLU:CA	1:6:A:GLU:CB	1:6:A:GLU:CG	9	99.06
(1,191)	1:37:A:ILE:N	1:37:A:ILE:CA	1:37:A:ILE:CB	1:37:A:ILE:CG1	8	99.02
(1,229)	1:48:A:GLU:N	1:48:A:GLU:CA	1:48:A:GLU:CB	1:48:A:GLU:CG	10	98.36
(1,148)	1:24:A:ILE:CA	1:24:A:ILE:CB	1:24:A:ILE:CG1	1:24:A:ILE:CD1	3	97.27
(1,220)	1:45:A:SER:N	1:45:A:SER:CA	1:45:A:SER:CB	1:45:A:SER:OG	6	97.09
(1,220)	1:45:A:SER:N	1:45:A:SER:CA	1:45:A:SER:CB	1:45:A:SER:OG	3	94.8
(1,24)	1:-11:A:HIS:C	1:-10:A:HIS:N	1:-10:A:HIS:CA	1:-10:A:HIS:C	12	94.45
(1,148)	1:24:A:ILE:CA	1:24:A:ILE:CB	1:24:A:ILE:CG1	1:24:A:ILE:CD1	2	93.19
(1,203)	1:40:A:GLU:N	1:40:A:GLU:CA	1:40:A:GLU:CB	1:40:A:GLU:CG	1	92.04
(1,88)	1:10:A:LEU:CA	1:10:A:LEU:CB	1:10:A:LEU:CG	1:10:A:LEU:CD1	2	91.94
(1,323)	1:72:A:LYS:N	1:72:A:LYS:CA	1:72:A:LYS:CB	1:72:A:LYS:CG	6	91.9
(1,24)	1:-11:A:HIS:C	1:-10:A:HIS:N	1:-10:A:HIS:CA	1:-10:A:HIS:C	4	91.8
(1,203)	1:40:A:GLU:N	1:40:A:GLU:CA	1:40:A:GLU:CB	1:40:A:GLU:CG	4	91.45
(1,29)	1:-10:A:HIS:C	1:-9:A:SER:N	1:-9:A:SER:CA	1:-9:A:SER:C	5	91.1
(1,29)	1:-10:A:HIS:C	1:-9:A:SER:N	1:-9:A:SER:CA	1:-9:A:SER:C	1	91.07
(1,29)	1:-10:A:HIS:C	1:-9:A:SER:N	1:-9:A:SER:CA	1:-9:A:SER:C	4	91.05
(1,29)	1:-10:A:HIS:C	1:-9:A:SER:N	1:-9:A:SER:CA	1:-9:A:SER:C	8	91.05
(1,167)	1:29:A:LEU:CA	1:29:A:LEU:CB	1:29:A:LEU:CG	1:29:A:LEU:CD1	4	90.74
(1,191)	1:37:A:ILE:N	1:37:A:ILE:CA	1:37:A:ILE:CB	1:37:A:ILE:CG1	7	90.51
(1,24)	1:-11:A:HIS:C	1:-10:A:HIS:N	1:-10:A:HIS:CA	1:-10:A:HIS:C	11	90.47
(1,24)	1:-11:A:HIS:C	1:-10:A:HIS:N	1:-10:A:HIS:CA	1:-10:A:HIS:C	9	89.93
(1,24)	1:-11:A:HIS:C	1:-10:A:HIS:N	1:-10:A:HIS:CA	1:-10:A:HIS:C	1	86.96
(1,88)	1:10:A:LEU:CA	1:10:A:LEU:CB	1:10:A:LEU:CG	1:10:A:LEU:CD1	11	86.82
(1,30)	1:-9:A:SER:N	1:-9:A:SER:CA	1:-9:A:SER:CB	1:-9:A:SER:OG	4	85.86

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,167)	1:29:A:LEU:CA	1:29:A:LEU:CB	1:29:A:LEU:CG	1:29:A:LEU:CD1	3	85.78
(1,191)	1:37:A:ILE:N	1:37:A:ILE:CA	1:37:A:ILE:CB	1:37:A:ILE:CG1	3	85.52
(1,55)	1:1:A:MET:N	1:1:A:MET:CA	1:1:A:MET:CB	1:1:A:MET:CG	6	84.83
(1,148)	1:24:A:ILE:CA	1:24:A:ILE:CB	1:24:A:ILE:CG1	1:24:A:ILE:CD1	1	84.81
(1,333)	1:75:A:ASN:C	1:76:A:LEU:N	1:76:A:LEU:CA	1:76:A:LEU:C	9	82.69
(1,255)	1:54:A:ASP:C	1:55:A:SER:N	1:55:A:SER:CA	1:55:A:SER:C	6	82.39
(1,2)	1:-17:A:SER:N	1:-17:A:SER:CA	1:-17:A:SER:C	1:-16:A:SER:N	2	82.01
(1,167)	1:29:A:LEU:CA	1:29:A:LEU:CB	1:29:A:LEU:CG	1:29:A:LEU:CD1	6	81.29
(1,24)	1:-11:A:HIS:C	1:-10:A:HIS:N	1:-10:A:HIS:CA	1:-10:A:HIS:C	3	80.57
(1,8)	1:-15:A:HIS:CA	1:-15:A:HIS:CB	1:-15:A:HIS:CG	1:-15:A:HIS:ND1	1	80.21
(1,30)	1:-9:A:SER:N	1:-9:A:SER:CA	1:-9:A:SER:CB	1:-9:A:SER:OG	1	80.02
(1,203)	1:40:A:GLU:N	1:40:A:GLU:CA	1:40:A:GLU:CB	1:40:A:GLU:CG	12	77.61
(1,333)	1:75:A:ASN:C	1:76:A:LEU:N	1:76:A:LEU:CA	1:76:A:LEU:C	7	76.4
(1,255)	1:54:A:ASP:C	1:55:A:SER:N	1:55:A:SER:CA	1:55:A:SER:C	1	74.78
(1,31)	1:-9:A:SER:N	1:-9:A:SER:CA	1:-9:A:SER:C	1:-8:A:SER:N	6	74.46
(1,191)	1:37:A:ILE:N	1:37:A:ILE:CA	1:37:A:ILE:CB	1:37:A:ILE:CG1	9	73.7
(1,30)	1:-9:A:SER:N	1:-9:A:SER:CA	1:-9:A:SER:CB	1:-9:A:SER:OG	2	72.66
(1,203)	1:40:A:GLU:N	1:40:A:GLU:CA	1:40:A:GLU:CB	1:40:A:GLU:CG	2	71.86
(1,191)	1:37:A:ILE:N	1:37:A:ILE:CA	1:37:A:ILE:CB	1:37:A:ILE:CG1	10	70.94
(1,229)	1:48:A:GLU:N	1:48:A:GLU:CA	1:48:A:GLU:CB	1:48:A:GLU:CG	12	68.74
(1,29)	1:-10:A:HIS:C	1:-9:A:SER:N	1:-9:A:SER:CA	1:-9:A:SER:C	12	64.79
(1,33)	1:-8:A:SER:N	1:-8:A:SER:CA	1:-8:A:SER:C	1:-7:A:GLY:N	10	64.09
(1,8)	1:-15:A:HIS:CA	1:-15:A:HIS:CB	1:-15:A:HIS:CG	1:-15:A:HIS:ND1	6	63.39
(1,229)	1:48:A:GLU:N	1:48:A:GLU:CA	1:48:A:GLU:CB	1:48:A:GLU:CG	11	63.01
(1,112)	1:15:A:ASP:C	1:16:A:ARG:N	1:16:A:ARG:CA	1:16:A:ARG:C	2	62.8
(1,99)	1:12:A:ASN:C	1:13:A:THR:N	1:13:A:THR:CA	1:13:A:THR:C	8	61.21
(1,112)	1:15:A:ASP:C	1:16:A:ARG:N	1:16:A:ARG:CA	1:16:A:ARG:C	1	59.3
(1,97)	1:12:A:ASN:N	1:12:A:ASN:CA	1:12:A:ASN:C	1:13:A:THR:N	8	57.45
(1,112)	1:15:A:ASP:C	1:16:A:ARG:N	1:16:A:ARG:CA	1:16:A:ARG:C	9	56.8
(1,163)	1:28:A:PHE:CA	1:28:A:PHE:CB	1:28:A:PHE:CG	1:28:A:PHE:CD1	11	56.52
(1,255)	1:54:A:ASP:C	1:55:A:SER:N	1:55:A:SER:CA	1:55:A:SER:C	12	56.24
(1,265)	1:57:A:GLN:N	1:57:A:GLN:CA	1:57:A:GLN:C	1:58:A:ASP:N	8	55.22
(1,29)	1:-10:A:HIS:C	1:-9:A:SER:N	1:-9:A:SER:CA	1:-9:A:SER:C	6	54.87
(1,29)	1:-10:A:HIS:C	1:-9:A:SER:N	1:-9:A:SER:CA	1:-9:A:SER:C	9	54.87
(1,24)	1:-11:A:HIS:C	1:-10:A:HIS:N	1:-10:A:HIS:CA	1:-10:A:HIS:C	10	54.51
(1,267)	1:57:A:GLN:C	1:58:A:ASP:N	1:58:A:ASP:CA	1:58:A:ASP:C	6	53.69
(1,257)	1:55:A:SER:N	1:55:A:SER:CA	1:55:A:SER:C	1:56:A:ASP:N	10	53.24
(1,163)	1:28:A:PHE:CA	1:28:A:PHE:CB	1:28:A:PHE:CG	1:28:A:PHE:CD1	12	52.81
(1,168)	1:29:A:LEU:N	1:29:A:LEU:CA	1:29:A:LEU:C	1:30:A:SER:N	8	52.36
(1,20)	1:-12:A:HIS:N	1:-12:A:HIS:CA	1:-12:A:HIS:C	1:-11:A:HIS:N	12	51.95
(1,288)	1:63:A:PHE:CA	1:63:A:PHE:CB	1:63:A:PHE:CG	1:63:A:PHE:CD1	3	50.33
(1,265)	1:57:A:GLN:N	1:57:A:GLN:CA	1:57:A:GLN:C	1:58:A:ASP:N	6	50.08
(1,112)	1:15:A:ASP:C	1:16:A:ARG:N	1:16:A:ARG:CA	1:16:A:ARG:C	6	49.38
(1,265)	1:57:A:GLN:N	1:57:A:GLN:CA	1:57:A:GLN:C	1:58:A:ASP:N	5	48.72
(1,20)	1:-12:A:HIS:N	1:-12:A:HIS:CA	1:-12:A:HIS:C	1:-11:A:HIS:N	11	48.03
(1,24)	1:-11:A:HIS:C	1:-10:A:HIS:N	1:-10:A:HIS:CA	1:-10:A:HIS:C	5	47.89
(1,164)	1:28:A:PHE:N	1:28:A:PHE:CA	1:28:A:PHE:C	1:29:A:LEU:N	12	47.81
(1,255)	1:54:A:ASP:C	1:55:A:SER:N	1:55:A:SER:CA	1:55:A:SER:C	10	46.72
(1,127)	1:19:A:ASP:CA	1:19:A:ASP:CB	1:19:A:ASP:CG	1:19:A:ASP:OD1	7	45.75
(1,325)	1:72:A:LYS:N	1:72:A:LYS:CA	1:72:A:LYS:C	1:73:A:ALA:N	10	45.67
(1,115)	1:16:A:ARG:N	1:16:A:ARG:CA	1:16:A:ARG:C	1:17:A:ASP:N	1	45.55

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,112)	1:15:A:ASP:C	1:16:A:ARG:N	1:16:A:ARG:CA	1:16:A:ARG:C	8	44.48
(1,163)	1:28:A:PHE:CA	1:28:A:PHE:CB	1:28:A:PHE:CG	1:28:A:PHE:CD1	10	44.28
(1,112)	1:15:A:ASP:C	1:16:A:ARG:N	1:16:A:ARG:CA	1:16:A:ARG:C	7	44.1
(1,325)	1:72:A:LYS:N	1:72:A:LYS:CA	1:72:A:LYS:C	1:73:A:ALA:N	12	43.27
(1,25)	1:-10:A:HIS:N	1:-10:A:HIS:CA	1:-10:A:HIS:CB	1:-10:A:HIS:CG	12	43.1
(1,168)	1:29:A:LEU:N	1:29:A:LEU:CA	1:29:A:LEU:C	1:30:A:SER:N	9	43.05
(1,168)	1:29:A:LEU:N	1:29:A:LEU:CA	1:29:A:LEU:C	1:30:A:SER:N	10	42.81
(1,110)	1:15:A:ASP:N	1:15:A:ASP:CA	1:15:A:ASP:C	1:16:A:ARG:N	2	42.55
(1,261)	1:56:A:ASP:CA	1:56:A:ASP:CB	1:56:A:ASP:CG	1:56:A:ASP:OD1	10	42.33
(1,162)	1:27:A:LEU:C	1:28:A:PHE:N	1:28:A:PHE:CA	1:28:A:PHE:C	12	42.13
(1,262)	1:56:A:ASP:N	1:56:A:ASP:CA	1:56:A:ASP:C	1:57:A:GLN:N	11	40.54
(1,262)	1:56:A:ASP:N	1:56:A:ASP:CA	1:56:A:ASP:C	1:57:A:GLN:N	4	40.53
(1,127)	1:19:A:ASP:CA	1:19:A:ASP:CB	1:19:A:ASP:CG	1:19:A:ASP:OD1	9	39.82
(1,171)	1:30:A:SER:N	1:30:A:SER:CA	1:30:A:SER:CB	1:30:A:SER:OG	7	39.07
(1,24)	1:-11:A:HIS:C	1:-10:A:HIS:N	1:-10:A:HIS:CA	1:-10:A:HIS:C	7	38.9
(1,61)	1:3:A:THR:N	1:3:A:THR:CA	1:3:A:THR:C	1:4:A:GLU:N	1	38.88
(1,119)	1:17:A:ASP:CA	1:17:A:ASP:CB	1:17:A:ASP:CG	1:17:A:ASP:OD1	1	38.77
(1,29)	1:-10:A:HIS:C	1:-9:A:SER:N	1:-9:A:SER:CA	1:-9:A:SER:C	10	38.39
(1,265)	1:57:A:GLN:N	1:57:A:GLN:CA	1:57:A:GLN:C	1:58:A:ASP:N	4	38.36
(1,257)	1:55:A:SER:N	1:55:A:SER:CA	1:55:A:SER:C	1:56:A:ASP:N	9	38.13
(1,333)	1:75:A:ASN:C	1:76:A:LEU:N	1:76:A:LEU:CA	1:76:A:LEU:C	12	37.81
(1,253)	1:54:A:ASP:N	1:54:A:ASP:CA	1:54:A:ASP:C	1:55:A:SER:N	12	37.58
(1,164)	1:28:A:PHE:N	1:28:A:PHE:CA	1:28:A:PHE:C	1:29:A:LEU:N	1	37.46
(1,37)	1:-7:A:GLY:C	1:-6:A:LEU:N	1:-6:A:LEU:CA	1:-6:A:LEU:C	3	37.18
(1,171)	1:30:A:SER:N	1:30:A:SER:CA	1:30:A:SER:CB	1:30:A:SER:OG	5	36.92
(1,115)	1:16:A:ARG:N	1:16:A:ARG:CA	1:16:A:ARG:C	1:17:A:ASP:N	11	36.88
(1,175)	1:32:A:GLY:N	1:32:A:GLY:CA	1:32:A:GLY:C	1:33:A:LEU:N	9	36.8
(1,265)	1:57:A:GLN:N	1:57:A:GLN:CA	1:57:A:GLN:C	1:58:A:ASP:N	3	36.49
(1,234)	1:49:A:LEU:N	1:49:A:LEU:CA	1:49:A:LEU:CB	1:49:A:LEU:CG	7	36.43
(1,47)	1:-2:A:GLY:N	1:-2:A:GLY:CA	1:-2:A:GLY:C	1:-1:A:SER:N	7	36.19
(1,264)	1:56:A:ASP:C	1:57:A:GLN:N	1:57:A:GLN:CA	1:57:A:GLN:C	8	36.03
(1,288)	1:63:A:PHE:CA	1:63:A:PHE:CB	1:63:A:PHE:CG	1:63:A:PHE:CD1	6	35.93
(1,229)	1:48:A:GLU:N	1:48:A:GLU:CA	1:48:A:GLU:CB	1:48:A:GLU:CG	2	35.76
(1,265)	1:57:A:GLN:N	1:57:A:GLN:CA	1:57:A:GLN:C	1:58:A:ASP:N	9	35.08
(1,37)	1:-7:A:GLY:C	1:-6:A:LEU:N	1:-6:A:LEU:CA	1:-6:A:LEU:C	1	34.82
(1,92)	1:11:A:PHE:N	1:11:A:PHE:CA	1:11:A:PHE:CB	1:11:A:PHE:CG	3	34.55
(1,20)	1:-12:A:HIS:N	1:-12:A:HIS:CA	1:-12:A:HIS:C	1:-11:A:HIS:N	8	33.96
(1,267)	1:57:A:GLN:C	1:58:A:ASP:N	1:58:A:ASP:CA	1:58:A:ASP:C	5	33.94
(1,37)	1:-7:A:GLY:C	1:-6:A:LEU:N	1:-6:A:LEU:CA	1:-6:A:LEU:C	11	33.69
(1,259)	1:55:A:SER:C	1:56:A:ASP:N	1:56:A:ASP:CA	1:56:A:ASP:C	10	33.53
(1,257)	1:55:A:SER:N	1:55:A:SER:CA	1:55:A:SER:C	1:56:A:ASP:N	6	33.41
(1,147)	1:24:A:ILE:N	1:24:A:ILE:CA	1:24:A:ILE:CB	1:24:A:ILE:CG1	10	33.35
(1,333)	1:75:A:ASN:C	1:76:A:LEU:N	1:76:A:LEU:CA	1:76:A:LEU:C	10	33.31
(1,288)	1:63:A:PHE:CA	1:63:A:PHE:CB	1:63:A:PHE:CG	1:63:A:PHE:CD1	2	33.06
(1,133)	1:20:A:GLY:C	1:21:A:LYS:N	1:21:A:LYS:CA	1:21:A:LYS:C	4	32.99
(1,168)	1:29:A:LEU:N	1:29:A:LEU:CA	1:29:A:LEU:C	1:30:A:SER:N	7	32.91
(1,25)	1:-10:A:HIS:N	1:-10:A:HIS:CA	1:-10:A:HIS:CB	1:-10:A:HIS:CG	3	32.73
(1,20)	1:-12:A:HIS:N	1:-12:A:HIS:CA	1:-12:A:HIS:C	1:-11:A:HIS:N	10	32.71
(1,117)	1:16:A:ARG:C	1:17:A:ASP:N	1:17:A:ASP:CA	1:17:A:ASP:C	1	32.31
(1,170)	1:29:A:LEU:C	1:30:A:SER:N	1:30:A:SER:CA	1:30:A:SER:C	11	32.09
(1,135)	1:21:A:LYS:CA	1:21:A:LYS:CB	1:21:A:LYS:CG	1:21:A:LYS:CD	11	31.99

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,112)	1:15:A:ASP:C	1:16:A:ARG:N	1:16:A:ARG:CA	1:16:A:ARG:C	5	31.9
(1,164)	1:28:A:PHE:N	1:28:A:PHE:CA	1:28:A:PHE:C	1:29:A:LEU:N	11	31.42
(1,135)	1:21:A:LYS:CA	1:21:A:LYS:CB	1:21:A:LYS:CG	1:21:A:LYS:CD	4	31.4
(1,69)	1:5:A:GLN:N	1:5:A:GLN:CA	1:5:A:GLN:CB	1:5:A:GLN:CG	7	31.3
(1,177)	1:32:A:GLY:C	1:33:A:LEU:N	1:33:A:LEU:CA	1:33:A:LEU:C	8	31.27
(1,162)	1:27:A:LEU:C	1:28:A:PHE:N	1:28:A:PHE:CA	1:28:A:PHE:C	1	30.93
(1,119)	1:17:A:ASP:CA	1:17:A:ASP:CB	1:17:A:ASP:CG	1:17:A:ASP:OD1	4	30.8
(1,284)	1:61:A:ILE:C	1:62:A:THR:N	1:62:A:THR:CA	1:62:A:THR:C	6	30.5
(1,265)	1:57:A:GLN:N	1:57:A:GLN:CA	1:57:A:GLN:C	1:58:A:ASP:N	2	30.5
(1,162)	1:27:A:LEU:C	1:28:A:PHE:N	1:28:A:PHE:CA	1:28:A:PHE:C	4	30.45
(1,51)	1:-1:A:SER:N	1:-1:A:SER:CA	1:-1:A:SER:C	1:0:A:HIS:N	12	30.12
(1,123)	1:18:A:GLN:N	1:18:A:GLN:CA	1:18:A:GLN:C	1:19:A:ASP:N	6	29.98
(1,272)	1:58:A:ASP:C	1:59:A:GLY:N	1:59:A:GLY:CA	1:59:A:GLY:C	5	29.8
(1,47)	1:-2:A:GLY:N	1:-2:A:GLY:CA	1:-2:A:GLY:C	1:-1:A:SER:N	10	29.77
(1,168)	1:29:A:LEU:N	1:29:A:LEU:CA	1:29:A:LEU:C	1:30:A:SER:N	5	29.58
(1,253)	1:54:A:ASP:N	1:54:A:ASP:CA	1:54:A:ASP:C	1:55:A:SER:N	6	29.5
(1,114)	1:16:A:ARG:CA	1:16:A:ARG:CB	1:16:A:ARG:CG	1:16:A:ARG:CD	2	29.44
(1,138)	1:21:A:LYS:C	1:22:A:ILE:N	1:22:A:ILE:CA	1:22:A:ILE:C	2	29.3
(1,253)	1:54:A:ASP:N	1:54:A:ASP:CA	1:54:A:ASP:C	1:55:A:SER:N	4	28.97
(1,322)	1:71:A:LYS:C	1:72:A:LYS:N	1:72:A:LYS:CA	1:72:A:LYS:C	10	28.69
(1,217)	1:44:A:ASN:N	1:44:A:ASN:CA	1:44:A:ASN:C	1:45:A:SER:N	8	28.61
(1,265)	1:57:A:GLN:N	1:57:A:GLN:CA	1:57:A:GLN:C	1:58:A:ASP:N	1	28.52
(1,37)	1:-7:A:GLY:C	1:-6:A:LEU:N	1:-6:A:LEU:CA	1:-6:A:LEU:C	9	28.5
(1,147)	1:24:A:ILE:N	1:24:A:ILE:CA	1:24:A:ILE:CB	1:24:A:ILE:CG1	11	28.48
(1,147)	1:24:A:ILE:N	1:24:A:ILE:CA	1:24:A:ILE:CB	1:24:A:ILE:CG1	12	28.46
(1,147)	1:24:A:ILE:N	1:24:A:ILE:CA	1:24:A:ILE:CB	1:24:A:ILE:CG1	3	28.45
(1,110)	1:15:A:ASP:N	1:15:A:ASP:CA	1:15:A:ASP:C	1:16:A:ARG:N	10	28.37
(1,166)	1:28:A:PHE:C	1:29:A:LEU:N	1:29:A:LEU:CA	1:29:A:LEU:C	12	28.29
(1,123)	1:18:A:GLN:N	1:18:A:GLN:CA	1:18:A:GLN:C	1:19:A:ASP:N	9	28.16
(1,253)	1:54:A:ASP:N	1:54:A:ASP:CA	1:54:A:ASP:C	1:55:A:SER:N	2	28.05
(1,20)	1:-12:A:HIS:N	1:-12:A:HIS:CA	1:-12:A:HIS:C	1:-11:A:HIS:N	5	27.89
(1,264)	1:56:A:ASP:C	1:57:A:GLN:N	1:57:A:GLN:CA	1:57:A:GLN:C	3	27.82
(1,265)	1:57:A:GLN:N	1:57:A:GLN:CA	1:57:A:GLN:C	1:58:A:ASP:N	7	27.77
(1,17)	1:-13:A:HIS:C	1:-12:A:HIS:N	1:-12:A:HIS:CA	1:-12:A:HIS:C	4	27.75
(1,97)	1:12:A:ASN:N	1:12:A:ASN:CA	1:12:A:ASN:C	1:13:A:THR:N	1	27.7
(1,69)	1:5:A:GLN:N	1:5:A:GLN:CA	1:5:A:GLN:CB	1:5:A:GLN:CG	1	27.52
(1,264)	1:56:A:ASP:C	1:57:A:GLN:N	1:57:A:GLN:CA	1:57:A:GLN:C	7	27.49
(1,255)	1:54:A:ASP:C	1:55:A:SER:N	1:55:A:SER:CA	1:55:A:SER:C	3	27.49
(1,265)	1:57:A:GLN:N	1:57:A:GLN:CA	1:57:A:GLN:C	1:58:A:ASP:N	11	27.43
(1,267)	1:57:A:GLN:C	1:58:A:ASP:N	1:58:A:ASP:CA	1:58:A:ASP:C	10	27.4
(1,322)	1:71:A:LYS:C	1:72:A:LYS:N	1:72:A:LYS:CA	1:72:A:LYS:C	12	27.37
(1,284)	1:61:A:ILE:C	1:62:A:THR:N	1:62:A:THR:CA	1:62:A:THR:C	5	27.3
(1,178)	1:33:A:LEU:N	1:33:A:LEU:CA	1:33:A:LEU:C	1:34:A:SER:N	8	27.29
(1,20)	1:-12:A:HIS:N	1:-12:A:HIS:CA	1:-12:A:HIS:C	1:-11:A:HIS:N	4	26.98
(1,110)	1:15:A:ASP:N	1:15:A:ASP:CA	1:15:A:ASP:C	1:16:A:ARG:N	6	26.83
(1,123)	1:18:A:GLN:N	1:18:A:GLN:CA	1:18:A:GLN:C	1:19:A:ASP:N	4	26.78
(1,119)	1:17:A:ASP:CA	1:17:A:ASP:CB	1:17:A:ASP:CG	1:17:A:ASP:OD1	5	26.68
(1,262)	1:56:A:ASP:N	1:56:A:ASP:CA	1:56:A:ASP:C	1:57:A:GLN:N	2	26.53
(1,127)	1:19:A:ASP:CA	1:19:A:ASP:CB	1:19:A:ASP:CG	1:19:A:ASP:OD1	3	26.34
(1,105)	1:14:A:LEU:N	1:14:A:LEU:CA	1:14:A:LEU:C	1:15:A:ASP:N	5	26.29
(1,211)	1:42:A:ASN:CA	1:42:A:ASN:C	1:43:A:THR:N	1:43:A:THR:CA	3	26.13

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,104)	1:14:A:LEU:CA	1:14:A:LEU:CB	1:14:A:LEU:CG	1:14:A:LEU:CD1	2	26.13
(1,211)	1:42:A:ASN:CA	1:42:A:ASN:C	1:43:A:THR:N	1:43:A:THR:CA	9	26.0
(1,110)	1:15:A:ASP:N	1:15:A:ASP:CA	1:15:A:ASP:C	1:16:A:ARG:N	4	25.96
(1,25)	1:-10:A:HIS:N	1:-10:A:HIS:CA	1:-10:A:HIS:CB	1:-10:A:HIS:CG	11	25.88
(1,264)	1:56:A:ASP:C	1:57:A:GLN:N	1:57:A:GLN:CA	1:57:A:GLN:C	2	25.85
(1,178)	1:33:A:LEU:N	1:33:A:LEU:CA	1:33:A:LEU:C	1:34:A:SER:N	9	25.83
(1,126)	1:19:A:ASP:N	1:19:A:ASP:CA	1:19:A:ASP:CB	1:19:A:ASP:CG	7	25.31
(1,181)	1:34:A:SER:N	1:34:A:SER:CA	1:34:A:SER:C	1:35:A:ALA:N	8	25.27
(1,259)	1:55:A:SER:C	1:56:A:ASP:N	1:56:A:ASP:CA	1:56:A:ASP:C	1	25.26
(1,261)	1:56:A:ASP:CA	1:56:A:ASP:CB	1:56:A:ASP:CG	1:56:A:ASP:OD1	7	25.15
(1,123)	1:18:A:GLN:N	1:18:A:GLN:CA	1:18:A:GLN:C	1:19:A:ASP:N	3	25.08
(1,110)	1:15:A:ASP:N	1:15:A:ASP:CA	1:15:A:ASP:C	1:16:A:ARG:N	1	25.07
(1,119)	1:17:A:ASP:CA	1:17:A:ASP:CB	1:17:A:ASP:CG	1:17:A:ASP:OD1	3	25.01
(1,56)	1:1:A:MET:N	1:1:A:MET:CA	1:1:A:MET:C	1:2:A:ALA:N	3	24.92
(1,168)	1:29:A:LEU:N	1:29:A:LEU:CA	1:29:A:LEU:C	1:30:A:SER:N	3	24.86
(1,119)	1:17:A:ASP:CA	1:17:A:ASP:CB	1:17:A:ASP:CG	1:17:A:ASP:OD1	6	24.8
(1,242)	1:51:A:VAL:N	1:51:A:VAL:CA	1:51:A:VAL:CB	1:51:A:VAL:CG1	5	24.78
(1,123)	1:18:A:GLN:N	1:18:A:GLN:CA	1:18:A:GLN:C	1:19:A:ASP:N	11	24.74
(1,164)	1:28:A:PHE:N	1:28:A:PHE:CA	1:28:A:PHE:C	1:29:A:LEU:N	4	24.65
(1,99)	1:12:A:ASN:C	1:13:A:THR:N	1:13:A:THR:CA	1:13:A:THR:C	1	24.64
(1,296)	1:65:A:GLU:CA	1:65:A:GLU:CB	1:65:A:GLU:CG	1:65:A:GLU:CD	3	24.62
(1,245)	1:51:A:VAL:C	1:52:A:GLN:N	1:52:A:GLN:CA	1:52:A:GLN:C	3	24.54
(1,104)	1:14:A:LEU:CA	1:14:A:LEU:CB	1:14:A:LEU:CG	1:14:A:LEU:CD1	1	24.51
(1,69)	1:5:A:GLN:N	1:5:A:GLN:CA	1:5:A:GLN:CB	1:5:A:GLN:CG	8	24.43
(1,230)	1:48:A:GLU:CA	1:48:A:GLU:CB	1:48:A:GLU:CG	1:48:A:GLU:CD	5	24.32
(1,18)	1:-12:A:HIS:N	1:-12:A:HIS:CA	1:-12:A:HIS:CB	1:-12:A:HIS:CG	8	24.09
(1,63)	1:3:A:THR:C	1:4:A:GLU:N	1:4:A:GLU:CA	1:4:A:GLU:C	5	23.98
(1,288)	1:63:A:PHE:CA	1:63:A:PHE:CB	1:63:A:PHE:CG	1:63:A:PHE:CD1	4	23.97
(1,177)	1:32:A:GLY:C	1:33:A:LEU:N	1:33:A:LEU:CA	1:33:A:LEU:C	9	23.93
(1,219)	1:44:A:ASN:C	1:45:A:SER:N	1:45:A:SER:CA	1:45:A:SER:C	2	23.8
(1,210)	1:42:A:ASN:N	1:42:A:ASN:CA	1:42:A:ASN:C	1:43:A:THR:N	3	23.8
(1,229)	1:48:A:GLU:N	1:48:A:GLU:CA	1:48:A:GLU:CB	1:48:A:GLU:CG	8	23.79
(1,250)	1:53:A:TYR:C	1:54:A:ASP:N	1:54:A:ASP:CA	1:54:A:ASP:C	6	23.74
(1,103)	1:13:A:THR:C	1:14:A:LEU:N	1:14:A:LEU:CA	1:14:A:LEU:C	5	23.74
(1,261)	1:56:A:ASP:CA	1:56:A:ASP:CB	1:56:A:ASP:CG	1:56:A:ASP:OD1	5	23.61
(1,259)	1:55:A:SER:C	1:56:A:ASP:N	1:56:A:ASP:CA	1:56:A:ASP:C	12	23.58
(1,108)	1:15:A:ASP:N	1:15:A:ASP:CA	1:15:A:ASP:CB	1:15:A:ASP:CG	6	23.54
(1,123)	1:18:A:GLN:N	1:18:A:GLN:CA	1:18:A:GLN:C	1:19:A:ASP:N	10	23.43
(1,42)	1:-4:A:PRO:N	1:-4:A:PRO:CA	1:-4:A:PRO:C	1:-3:A:ARG:N	10	23.35
(1,62)	1:3:A:THR:CA	1:3:A:THR:C	1:4:A:GLU:N	1:4:A:GLU:CA	6	23.34
(1,107)	1:14:A:LEU:C	1:15:A:ASP:N	1:15:A:ASP:CA	1:15:A:ASP:C	1	23.24
(1,274)	1:59:A:GLY:CA	1:59:A:GLY:C	1:60:A:SER:N	1:60:A:SER:CA	1	23.15
(1,277)	1:60:A:SER:N	1:60:A:SER:CA	1:60:A:SER:C	1:61:A:ILE:N	5	23.03
(1,111)	1:15:A:ASP:CA	1:15:A:ASP:C	1:16:A:ARG:N	1:16:A:ARG:CA	4	23.0
(1,181)	1:34:A:SER:N	1:34:A:SER:CA	1:34:A:SER:C	1:35:A:ALA:N	5	22.98
(1,253)	1:54:A:ASP:N	1:54:A:ASP:CA	1:54:A:ASP:C	1:55:A:SER:N	1	22.97
(1,112)	1:15:A:ASP:C	1:16:A:ARG:N	1:16:A:ARG:CA	1:16:A:ARG:C	3	22.89
(1,17)	1:-13:A:HIS:C	1:-12:A:HIS:N	1:-12:A:HIS:CA	1:-12:A:HIS:C	1	22.82
(1,267)	1:57:A:GLN:C	1:58:A:ASP:N	1:58:A:ASP:CA	1:58:A:ASP:C	8	22.69
(1,257)	1:55:A:SER:N	1:55:A:SER:CA	1:55:A:SER:C	1:56:A:ASP:N	1	22.69
(1,255)	1:54:A:ASP:C	1:55:A:SER:N	1:55:A:SER:CA	1:55:A:SER:C	5	22.66

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,212)	1:42:A:ASN:C	1:43:A:THR:N	1:43:A:THR:CA	1:43:A:THR:C	3	22.65
(1,281)	1:61:A:ILE:CA	1:61:A:ILE:CB	1:61:A:ILE:CG1	1:61:A:ILE:CD1	9	22.62
(1,61)	1:3:A:THR:N	1:3:A:THR:CA	1:3:A:THR:C	1:4:A:GLU:N	4	22.62
(1,262)	1:56:A:ASP:N	1:56:A:ASP:CA	1:56:A:ASP:C	1:57:A:GLN:N	12	22.54
(1,164)	1:28:A:PHE:N	1:28:A:PHE:CA	1:28:A:PHE:C	1:29:A:LEU:N	2	22.42
(1,64)	1:4:A:GLU:N	1:4:A:GLU:CA	1:4:A:GLU:CB	1:4:A:GLU:CG	7	22.42
(1,288)	1:63:A:PHE:CA	1:63:A:PHE:CB	1:63:A:PHE:CG	1:63:A:PHE:CD1	12	22.4
(1,80)	1:8:A:GLN:CA	1:8:A:GLN:CB	1:8:A:GLN:CG	1:8:A:GLN:CD	5	22.36
(1,66)	1:4:A:GLU:N	1:4:A:GLU:CA	1:4:A:GLU:C	1:5:A:GLN:N	5	22.3
(1,41)	1:-5:A:VAL:CA	1:-5:A:VAL:C	1:-4:A:PRO:N	1:-4:A:PRO:CA	1	22.26
(1,225)	1:47:A:GLN:N	1:47:A:GLN:CA	1:47:A:GLN:CB	1:47:A:GLN:CG	4	22.25
(1,234)	1:49:A:LEU:N	1:49:A:LEU:CA	1:49:A:LEU:CB	1:49:A:LEU:CG	6	22.23
(1,164)	1:28:A:PHE:N	1:28:A:PHE:CA	1:28:A:PHE:C	1:29:A:LEU:N	3	22.23
(1,47)	1:-2:A:GLY:N	1:-2:A:GLY:CA	1:-2:A:GLY:C	1:-1:A:SER:N	5	22.22
(1,273)	1:59:A:GLY:N	1:59:A:GLY:CA	1:59:A:GLY:C	1:60:A:SER:N	3	22.1
(1,219)	1:44:A:ASN:C	1:45:A:SER:N	1:45:A:SER:CA	1:45:A:SER:C	6	22.09
(1,264)	1:56:A:ASP:C	1:57:A:GLN:N	1:57:A:GLN:CA	1:57:A:GLN:C	4	22.04
(1,41)	1:-5:A:VAL:CA	1:-5:A:VAL:C	1:-4:A:PRO:N	1:-4:A:PRO:CA	7	22.04
(1,115)	1:16:A:ARG:N	1:16:A:ARG:CA	1:16:A:ARG:C	1:17:A:ASP:N	2	22.02
(1,264)	1:56:A:ASP:C	1:57:A:GLN:N	1:57:A:GLN:CA	1:57:A:GLN:C	1	21.96
(1,170)	1:29:A:LEU:C	1:30:A:SER:N	1:30:A:SER:CA	1:30:A:SER:C	5	21.92
(1,123)	1:18:A:GLN:N	1:18:A:GLN:CA	1:18:A:GLN:C	1:19:A:ASP:N	2	21.9
(1,221)	1:45:A:SER:CA	1:45:A:SER:C	1:46:A:PRO:N	1:46:A:PRO:CA	5	21.88
(1,219)	1:44:A:ASN:C	1:45:A:SER:N	1:45:A:SER:CA	1:45:A:SER:C	10	21.87
(1,282)	1:61:A:ILE:N	1:61:A:ILE:CA	1:61:A:ILE:C	1:62:A:THR:N	2	21.81
(1,253)	1:54:A:ASP:N	1:54:A:ASP:CA	1:54:A:ASP:C	1:55:A:SER:N	8	21.81
(1,20)	1:-12:A:HIS:N	1:-12:A:HIS:CA	1:-12:A:HIS:C	1:-11:A:HIS:N	9	21.79
(1,259)	1:55:A:SER:C	1:56:A:ASP:N	1:56:A:ASP:CA	1:56:A:ASP:C	4	21.77
(1,152)	1:25:A:ASN:N	1:25:A:ASN:CA	1:25:A:ASN:C	1:26:A:GLU:N	4	21.65
(1,250)	1:53:A:TYR:C	1:54:A:ASP:N	1:54:A:ASP:CA	1:54:A:ASP:C	5	21.51
(1,132)	1:20:A:GLY:CA	1:20:A:GLY:C	1:21:A:LYS:N	1:21:A:LYS:CA	4	21.37
(1,38)	1:-6:A:LEU:CA	1:-6:A:LEU:C	1:-5:A:VAL:N	1:-5:A:VAL:CA	9	21.33
(1,42)	1:-4:A:PRO:N	1:-4:A:PRO:CA	1:-4:A:PRO:C	1:-3:A:ARG:N	4	21.28
(1,262)	1:56:A:ASP:N	1:56:A:ASP:CA	1:56:A:ASP:C	1:57:A:GLN:N	10	21.27
(1,110)	1:15:A:ASP:N	1:15:A:ASP:CA	1:15:A:ASP:C	1:16:A:ARG:N	7	21.05
(1,135)	1:21:A:LYS:CA	1:21:A:LYS:CB	1:21:A:LYS:CG	1:21:A:LYS:CD	7	21.0
(1,162)	1:27:A:LEU:C	1:28:A:PHE:N	1:28:A:PHE:CA	1:28:A:PHE:C	11	20.99
(1,42)	1:-4:A:PRO:N	1:-4:A:PRO:CA	1:-4:A:PRO:C	1:-3:A:ARG:N	6	20.96
(1,262)	1:56:A:ASP:N	1:56:A:ASP:CA	1:56:A:ASP:C	1:57:A:GLN:N	1	20.95
(1,110)	1:15:A:ASP:N	1:15:A:ASP:CA	1:15:A:ASP:C	1:16:A:ARG:N	11	20.83
(1,97)	1:12:A:ASN:N	1:12:A:ASN:CA	1:12:A:ASN:C	1:13:A:THR:N	2	20.78
(1,170)	1:29:A:LEU:C	1:30:A:SER:N	1:30:A:SER:CA	1:30:A:SER:C	4	20.74
(1,96)	1:11:A:PHE:C	1:12:A:ASN:N	1:12:A:ASN:CA	1:12:A:ASN:C	2	20.68
(1,65)	1:4:A:GLU:CA	1:4:A:GLU:CB	1:4:A:GLU:CG	1:4:A:GLU:CD	2	20.68
(1,96)	1:11:A:PHE:C	1:12:A:ASN:N	1:12:A:ASN:CA	1:12:A:ASN:C	8	20.67
(1,219)	1:44:A:ASN:C	1:45:A:SER:N	1:45:A:SER:CA	1:45:A:SER:C	5	20.66
(1,58)	1:1:A:MET:C	1:2:A:ALA:N	1:2:A:ALA:CA	1:2:A:ALA:C	12	20.66
(1,39)	1:-6:A:LEU:C	1:-5:A:VAL:N	1:-5:A:VAL:CA	1:-5:A:VAL:C	3	20.62
(1,38)	1:-6:A:LEU:CA	1:-6:A:LEU:C	1:-5:A:VAL:N	1:-5:A:VAL:CA	8	20.56
(1,132)	1:20:A:GLY:CA	1:20:A:GLY:C	1:21:A:LYS:N	1:21:A:LYS:CA	9	20.53
(1,222)	1:46:A:PRO:N	1:46:A:PRO:CA	1:46:A:PRO:C	1:47:A:GLN:N	4	20.25

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,263)	1:56:A:ASP:CA	1:56:A:ASP:C	1:57:A:GLN:N	1:57:A:GLN:CA	4	20.15
(1,120)	1:17:A:ASP:N	1:17:A:ASP:CA	1:17:A:ASP:C	1:18:A:GLN:N	7	20.15
(1,168)	1:29:A:LEU:N	1:29:A:LEU:CA	1:29:A:LEU:C	1:30:A:SER:N	12	20.12
(1,109)	1:15:A:ASP:CA	1:15:A:ASP:CB	1:15:A:ASP:CG	1:15:A:ASP:OD1	5	19.94
(1,97)	1:12:A:ASN:N	1:12:A:ASN:CA	1:12:A:ASN:C	1:13:A:THR:N	6	19.94
(1,305)	1:67:A:LYS:CA	1:67:A:LYS:CB	1:67:A:LYS:CG	1:67:A:LYS:CD	7	19.93
(1,162)	1:27:A:LEU:C	1:28:A:PHE:N	1:28:A:PHE:CA	1:28:A:PHE:C	2	19.93
(1,97)	1:12:A:ASN:N	1:12:A:ASN:CA	1:12:A:ASN:C	1:13:A:THR:N	5	19.89
(1,64)	1:4:A:GLU:N	1:4:A:GLU:CA	1:4:A:GLU:CB	1:4:A:GLU:CG	1	19.89
(1,300)	1:66:A:LEU:N	1:66:A:LEU:CA	1:66:A:LEU:CB	1:66:A:LEU:CG	12	19.86
(1,257)	1:55:A:SER:N	1:55:A:SER:CA	1:55:A:SER:C	1:56:A:ASP:N	2	19.84
(1,131)	1:20:A:GLY:N	1:20:A:GLY:CA	1:20:A:GLY:C	1:21:A:LYS:N	9	19.76
(1,218)	1:44:A:ASN:CA	1:44:A:ASN:C	1:45:A:SER:N	1:45:A:SER:CA	10	19.71
(1,8)	1:-15:A:HIS:CA	1:-15:A:HIS:CB	1:-15:A:HIS:CG	1:-15:A:HIS:ND1	3	19.68
(1,211)	1:42:A:ASN:CA	1:42:A:ASN:C	1:43:A:THR:N	1:43:A:THR:CA	10	19.67
(1,301)	1:66:A:LEU:CA	1:66:A:LEU:CB	1:66:A:LEU:CG	1:66:A:LEU:CD1	9	19.64
(1,166)	1:28:A:PHE:C	1:29:A:LEU:N	1:29:A:LEU:CA	1:29:A:LEU:C	7	19.63
(1,301)	1:66:A:LEU:CA	1:66:A:LEU:CB	1:66:A:LEU:CG	1:66:A:LEU:CD1	3	19.58
(1,257)	1:55:A:SER:N	1:55:A:SER:CA	1:55:A:SER:C	1:56:A:ASP:N	8	19.58
(1,120)	1:17:A:ASP:N	1:17:A:ASP:CA	1:17:A:ASP:C	1:18:A:GLN:N	12	19.58
(1,239)	1:50:A:LEU:N	1:50:A:LEU:CA	1:50:A:LEU:C	1:51:A:VAL:N	1	19.56
(1,33)	1:-8:A:SER:N	1:-8:A:SER:CA	1:-8:A:SER:C	1:-7:A:GLY:N	4	19.52
(1,33)	1:-8:A:SER:N	1:-8:A:SER:CA	1:-8:A:SER:C	1:-7:A:GLY:N	7	19.49
(1,257)	1:55:A:SER:N	1:55:A:SER:CA	1:55:A:SER:C	1:56:A:ASP:N	3	19.46
(1,25)	1:-10:A:HIS:N	1:-10:A:HIS:CA	1:-10:A:HIS:CB	1:-10:A:HIS:CG	6	19.42
(1,132)	1:20:A:GLY:CA	1:20:A:GLY:C	1:21:A:LYS:N	1:21:A:LYS:CA	8	19.41
(1,305)	1:67:A:LYS:CA	1:67:A:LYS:CB	1:67:A:LYS:CG	1:67:A:LYS:CD	9	19.39
(1,3)	1:-17:A:SER:CA	1:-17:A:SER:C	1:-16:A:SER:N	1:-16:A:SER:CA	7	19.38
(1,238)	1:49:A:LEU:C	1:50:A:LEU:N	1:50:A:LEU:CA	1:50:A:LEU:C	3	19.37
(1,62)	1:3:A:THR:CA	1:3:A:THR:C	1:4:A:GLU:N	1:4:A:GLU:CA	3	19.37
(1,136)	1:21:A:LYS:N	1:21:A:LYS:CA	1:21:A:LYS:C	1:22:A:ILE:N	5	19.36
(1,172)	1:30:A:SER:CA	1:30:A:SER:C	1:31:A:PRO:N	1:31:A:PRO:CA	6	19.33
(1,1)	1:-18:A:GLY:CA	1:-18:A:GLY:C	1:-17:A:SER:N	1:-17:A:SER:CA	5	19.33
(1,142)	1:22:A:ILE:CA	1:22:A:ILE:C	1:23:A:SER:N	1:23:A:SER:CA	3	19.28
(1,301)	1:66:A:LEU:CA	1:66:A:LEU:CB	1:66:A:LEU:CG	1:66:A:LEU:CD1	10	19.25
(1,219)	1:44:A:ASN:C	1:45:A:SER:N	1:45:A:SER:CA	1:45:A:SER:C	11	19.23
(1,39)	1:-6:A:LEU:C	1:-5:A:VAL:N	1:-5:A:VAL:CA	1:-5:A:VAL:C	6	19.23
(1,246)	1:52:A:GLN:N	1:52:A:GLN:CA	1:52:A:GLN:C	1:53:A:TYR:N	2	19.21
(1,331)	1:74:A:SER:C	1:75:A:ASN:N	1:75:A:ASN:CA	1:75:A:ASN:C	4	19.15
(1,139)	1:22:A:ILE:N	1:22:A:ILE:CA	1:22:A:ILE:CB	1:22:A:ILE:CG1	1	19.12
(1,142)	1:22:A:ILE:CA	1:22:A:ILE:C	1:23:A:SER:N	1:23:A:SER:CA	12	19.11
(1,241)	1:50:A:LEU:C	1:51:A:VAL:N	1:51:A:VAL:CA	1:51:A:VAL:C	7	19.08
(1,13)	1:-14:A:HIS:N	1:-14:A:HIS:CA	1:-14:A:HIS:C	1:-13:A:HIS:N	2	19.07
(1,222)	1:46:A:PRO:N	1:46:A:PRO:CA	1:46:A:PRO:C	1:47:A:GLN:N	3	19.05
(1,166)	1:28:A:PHE:C	1:29:A:LEU:N	1:29:A:LEU:CA	1:29:A:LEU:C	5	19.01
(1,65)	1:4:A:GLU:CA	1:4:A:GLU:CB	1:4:A:GLU:CG	1:4:A:GLU:CD	8	19.01
(1,18)	1:-12:A:HIS:N	1:-12:A:HIS:CA	1:-12:A:HIS:CB	1:-12:A:HIS:CG	2	19.0
(1,127)	1:19:A:ASP:CA	1:19:A:ASP:CB	1:19:A:ASP:CG	1:19:A:ASP:OD1	1	18.99
(1,254)	1:54:A:ASP:CA	1:54:A:ASP:C	1:55:A:SER:N	1:55:A:SER:CA	6	18.92
(1,135)	1:21:A:LYS:CA	1:21:A:LYS:CB	1:21:A:LYS:CG	1:21:A:LYS:CD	9	18.9
(1,127)	1:19:A:ASP:CA	1:19:A:ASP:CB	1:19:A:ASP:CG	1:19:A:ASP:OD1	11	18.88

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,301)	1:66:A:LEU:CA	1:66:A:LEU:CB	1:66:A:LEU:CG	1:66:A:LEU:CD1	6	18.8
(1,274)	1:59:A:GLY:CA	1:59:A:GLY:C	1:60:A:SER:N	1:60:A:SER:CA	2	18.8
(1,220)	1:45:A:SER:N	1:45:A:SER:CA	1:45:A:SER:CB	1:45:A:SER:OG	4	18.79
(1,283)	1:61:A:ILE:CA	1:61:A:ILE:C	1:62:A:THR:N	1:62:A:THR:CA	12	18.77
(1,268)	1:58:A:ASP:N	1:58:A:ASP:CA	1:58:A:ASP:CB	1:58:A:ASP:CG	11	18.73
(1,122)	1:17:A:ASP:C	1:18:A:GLN:N	1:18:A:GLN:CA	1:18:A:GLN:C	10	18.61
(1,56)	1:1:A:MET:N	1:1:A:MET:CA	1:1:A:MET:C	1:2:A:ALA:N	1	18.58
(1,139)	1:22:A:ILE:N	1:22:A:ILE:CA	1:22:A:ILE:CB	1:22:A:ILE:CG1	12	18.56
(1,142)	1:22:A:ILE:CA	1:22:A:ILE:C	1:23:A:SER:N	1:23:A:SER:CA	4	18.5
(1,123)	1:18:A:GLN:N	1:18:A:GLN:CA	1:18:A:GLN:C	1:19:A:ASP:N	7	18.41
(1,47)	1:-2:A:GLY:N	1:-2:A:GLY:CA	1:-2:A:GLY:C	1:-1:A:SER:N	9	18.41
(1,245)	1:51:A:VAL:C	1:52:A:GLN:N	1:52:A:GLN:CA	1:52:A:GLN:C	2	18.37
(1,120)	1:17:A:ASP:N	1:17:A:ASP:CA	1:17:A:ASP:C	1:18:A:GLN:N	5	18.35
(1,229)	1:48:A:GLU:N	1:48:A:GLU:CA	1:48:A:GLU:CB	1:48:A:GLU:CG	1	18.31
(1,319)	1:71:A:LYS:CA	1:71:A:LYS:CB	1:71:A:LYS:CG	1:71:A:LYS:CD	1	18.3
(1,107)	1:14:A:LEU:C	1:15:A:ASP:N	1:15:A:ASP:CA	1:15:A:ASP:C	12	18.3
(1,242)	1:51:A:VAL:N	1:51:A:VAL:CA	1:51:A:VAL:CB	1:51:A:VAL:CG1	12	18.24
(1,136)	1:21:A:LYS:N	1:21:A:LYS:CA	1:21:A:LYS:C	1:22:A:ILE:N	2	18.23
(1,299)	1:65:A:GLU:C	1:66:A:LEU:N	1:66:A:LEU:CA	1:66:A:LEU:C	9	18.2
(1,69)	1:5:A:GLN:N	1:5:A:GLN:CA	1:5:A:GLN:CB	1:5:A:GLN:CG	2	18.15
(1,280)	1:61:A:ILE:N	1:61:A:ILE:CA	1:61:A:ILE:CB	1:61:A:ILE:CG1	8	18.13
(1,44)	1:-3:A:ARG:CA	1:-3:A:ARG:CB	1:-3:A:ARG:CG	1:-3:A:ARG:CD	3	18.1
(1,301)	1:66:A:LEU:CA	1:66:A:LEU:CB	1:66:A:LEU:CG	1:66:A:LEU:CD1	4	18.09
(1,264)	1:56:A:ASP:C	1:57:A:GLN:N	1:57:A:GLN:CA	1:57:A:GLN:C	5	18.09
(1,216)	1:43:A:THR:C	1:44:A:ASN:N	1:44:A:ASN:CA	1:44:A:ASN:C	6	18.03
(1,296)	1:65:A:GLU:CA	1:65:A:GLU:CB	1:65:A:GLU:CG	1:65:A:GLU:CD	12	18.0
(1,127)	1:19:A:ASP:CA	1:19:A:ASP:CB	1:19:A:ASP:CG	1:19:A:ASP:OD1	5	17.99
(1,282)	1:61:A:ILE:N	1:61:A:ILE:CA	1:61:A:ILE:C	1:62:A:THR:N	3	17.95
(1,323)	1:72:A:LYS:N	1:72:A:LYS:CA	1:72:A:LYS:CB	1:72:A:LYS:CG	1	17.94
(1,62)	1:3:A:THR:CA	1:3:A:THR:C	1:4:A:GLU:N	1:4:A:GLU:CA	8	17.84
(1,288)	1:63:A:PHE:CA	1:63:A:PHE:CB	1:63:A:PHE:CG	1:63:A:PHE:CD1	11	17.83
(1,324)	1:72:A:LYS:CA	1:72:A:LYS:CB	1:72:A:LYS:CG	1:72:A:LYS:CD	7	17.81
(1,184)	1:35:A:ALA:N	1:35:A:ALA:CA	1:35:A:ALA:C	1:36:A:VAL:N	5	17.8
(1,172)	1:30:A:SER:CA	1:30:A:SER:C	1:31:A:PRO:N	1:31:A:PRO:CA	3	17.8
(1,328)	1:73:A:ALA:CA	1:73:A:ALA:C	1:74:A:SER:N	1:74:A:SER:CA	5	17.72
(1,283)	1:61:A:ILE:CA	1:61:A:ILE:C	1:62:A:THR:N	1:62:A:THR:CA	6	17.69
(1,259)	1:55:A:SER:C	1:56:A:ASP:N	1:56:A:ASP:CA	1:56:A:ASP:C	11	17.64
(1,111)	1:15:A:ASP:CA	1:15:A:ASP:C	1:16:A:ARG:N	1:16:A:ARG:CA	1	17.59
(1,3)	1:-17:A:SER:CA	1:-17:A:SER:C	1:-16:A:SER:N	1:-16:A:SER:CA	6	17.5
(1,40)	1:-5:A:VAL:N	1:-5:A:VAL:CA	1:-5:A:VAL:CB	1:-5:A:VAL:CG1	2	17.45
(1,170)	1:29:A:LEU:C	1:30:A:SER:N	1:30:A:SER:CA	1:30:A:SER:C	2	17.4
(1,123)	1:18:A:GLN:N	1:18:A:GLN:CA	1:18:A:GLN:C	1:19:A:ASP:N	12	17.4
(1,64)	1:4:A:GLU:N	1:4:A:GLU:CA	1:4:A:GLU:CB	1:4:A:GLU:CG	9	17.3
(1,131)	1:20:A:GLY:N	1:20:A:GLY:CA	1:20:A:GLY:C	1:21:A:LYS:N	2	17.24
(1,155)	1:26:A:GLU:N	1:26:A:GLU:CA	1:26:A:GLU:CB	1:26:A:GLU:CG	12	17.15
(1,24)	1:-11:A:HIS:C	1:-10:A:HIS:N	1:-10:A:HIS:CA	1:-10:A:HIS:C	2	17.15
(1,139)	1:22:A:ILE:N	1:22:A:ILE:CA	1:22:A:ILE:CB	1:22:A:ILE:CG1	11	17.14
(1,234)	1:49:A:LEU:N	1:49:A:LEU:CA	1:49:A:LEU:CB	1:49:A:LEU:CG	11	17.11
(1,103)	1:13:A:THR:C	1:14:A:LEU:N	1:14:A:LEU:CA	1:14:A:LEU:C	11	17.05
(1,110)	1:15:A:ASP:N	1:15:A:ASP:CA	1:15:A:ASP:C	1:16:A:ARG:N	9	17.04
(1,166)	1:28:A:PHE:C	1:29:A:LEU:N	1:29:A:LEU:CA	1:29:A:LEU:C	10	17.02

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,127)	1:19:A:ASP:CA	1:19:A:ASP:CB	1:19:A:ASP:CG	1:19:A:ASP:OD1	8	17.02
(1,229)	1:48:A:GLU:N	1:48:A:GLU:CA	1:48:A:GLU:CB	1:48:A:GLU:CG	3	17.01
(1,111)	1:15:A:ASP:CA	1:15:A:ASP:C	1:16:A:ARG:N	1:16:A:ARG:CA	10	16.98
(1,64)	1:4:A:GLU:N	1:4:A:GLU:CA	1:4:A:GLU:CB	1:4:A:GLU:CG	10	16.98
(1,96)	1:11:A:PHE:C	1:12:A:ASN:N	1:12:A:ASN:CA	1:12:A:ASN:C	3	16.96
(1,41)	1:-5:A:VAL:CA	1:-5:A:VAL:C	1:-4:A:PRO:N	1:-4:A:PRO:CA	2	16.94
(1,264)	1:56:A:ASP:C	1:57:A:GLN:N	1:57:A:GLN:CA	1:57:A:GLN:C	9	16.9
(1,275)	1:59:A:GLY:C	1:60:A:SER:N	1:60:A:SER:CA	1:60:A:SER:C	3	16.87
(1,282)	1:61:A:ILE:N	1:61:A:ILE:CA	1:61:A:ILE:C	1:62:A:THR:N	8	16.84
(1,166)	1:28:A:PHE:C	1:29:A:LEU:N	1:29:A:LEU:CA	1:29:A:LEU:C	8	16.84
(1,64)	1:4:A:GLU:N	1:4:A:GLU:CA	1:4:A:GLU:CB	1:4:A:GLU:CG	8	16.84
(1,252)	1:54:A:ASP:CA	1:54:A:ASP:CB	1:54:A:ASP:CG	1:54:A:ASP:OD1	4	16.82
(1,131)	1:20:A:GLY:N	1:20:A:GLY:CA	1:20:A:GLY:C	1:21:A:LYS:N	3	16.81
(1,127)	1:19:A:ASP:CA	1:19:A:ASP:CB	1:19:A:ASP:CG	1:19:A:ASP:OD1	10	16.81
(1,127)	1:19:A:ASP:CA	1:19:A:ASP:CB	1:19:A:ASP:CG	1:19:A:ASP:OD1	6	16.8
(1,211)	1:42:A:ASN:CA	1:42:A:ASN:C	1:43:A:THR:N	1:43:A:THR:CA	7	16.78
(1,214)	1:43:A:THR:N	1:43:A:THR:CA	1:43:A:THR:C	1:44:A:ASN:N	12	16.76
(1,250)	1:53:A:TYR:C	1:54:A:ASP:N	1:54:A:ASP:CA	1:54:A:ASP:C	10	16.73
(1,210)	1:42:A:ASN:N	1:42:A:ASN:CA	1:42:A:ASN:C	1:43:A:THR:N	12	16.66
(1,107)	1:14:A:LEU:C	1:15:A:ASP:N	1:15:A:ASP:CA	1:15:A:ASP:C	2	16.57
(1,225)	1:47:A:GLN:N	1:47:A:GLN:CA	1:47:A:GLN:CB	1:47:A:GLN:CG	7	16.56
(1,214)	1:43:A:THR:N	1:43:A:THR:CA	1:43:A:THR:C	1:44:A:ASN:N	10	16.53
(1,166)	1:28:A:PHE:C	1:29:A:LEU:N	1:29:A:LEU:CA	1:29:A:LEU:C	9	16.53
(1,229)	1:48:A:GLU:N	1:48:A:GLU:CA	1:48:A:GLU:CB	1:48:A:GLU:CG	5	16.52
(1,162)	1:27:A:LEU:C	1:28:A:PHE:N	1:28:A:PHE:CA	1:28:A:PHE:C	3	16.49
(1,323)	1:72:A:LYS:N	1:72:A:LYS:CA	1:72:A:LYS:CB	1:72:A:LYS:CG	4	16.44
(1,301)	1:66:A:LEU:CA	1:66:A:LEU:CB	1:66:A:LEU:CG	1:66:A:LEU:CD1	11	16.4
(1,219)	1:44:A:ASN:C	1:45:A:SER:N	1:45:A:SER:CA	1:45:A:SER:C	1	16.21
(1,102)	1:13:A:THR:CA	1:13:A:THR:C	1:14:A:LEU:N	1:14:A:LEU:CA	8	16.21
(1,314)	1:69:A:ALA:C	1:70:A:VAL:N	1:70:A:VAL:CA	1:70:A:VAL:C	5	16.17
(1,221)	1:45:A:SER:CA	1:45:A:SER:C	1:46:A:PRO:N	1:46:A:PRO:CA	12	16.17
(1,118)	1:17:A:ASP:N	1:17:A:ASP:CA	1:17:A:ASP:CB	1:17:A:ASP:CG	4	16.17
(1,26)	1:-10:A:HIS:CA	1:-10:A:HIS:CB	1:-10:A:HIS:CG	1:-10:A:HIS:ND1	9	16.17
(1,37)	1:-7:A:GLY:C	1:-6:A:LEU:N	1:-6:A:LEU:CA	1:-6:A:LEU:C	4	16.15
(1,107)	1:14:A:LEU:C	1:15:A:ASP:N	1:15:A:ASP:CA	1:15:A:ASP:C	6	16.14
(1,209)	1:41:A:THR:C	1:42:A:ASN:N	1:42:A:ASN:CA	1:42:A:ASN:C	3	16.07
(1,112)	1:15:A:ASP:C	1:16:A:ARG:N	1:16:A:ARG:CA	1:16:A:ARG:C	11	16.07
(1,40)	1:-5:A:VAL:N	1:-5:A:VAL:CA	1:-5:A:VAL:CB	1:-5:A:VAL:CG1	7	16.06
(1,283)	1:61:A:ILE:CA	1:61:A:ILE:C	1:62:A:THR:N	1:62:A:THR:CA	10	16.03
(1,200)	1:39:A:SER:N	1:39:A:SER:CA	1:39:A:SER:C	1:40:A:GLU:N	4	16.02
(1,217)	1:44:A:ASN:N	1:44:A:ASN:CA	1:44:A:ASN:C	1:45:A:SER:N	2	15.98
(1,172)	1:30:A:SER:CA	1:30:A:SER:C	1:31:A:PRO:N	1:31:A:PRO:CA	10	15.96
(1,153)	1:25:A:ASN:CA	1:25:A:ASN:C	1:26:A:GLU:N	1:26:A:GLU:CA	2	15.93
(1,223)	1:46:A:PRO:CA	1:46:A:PRO:C	1:47:A:GLN:N	1:47:A:GLN:CA	7	15.9
(1,13)	1:-14:A:HIS:N	1:-14:A:HIS:CA	1:-14:A:HIS:C	1:-13:A:HIS:N	4	15.8
(1,242)	1:51:A:VAL:N	1:51:A:VAL:CA	1:51:A:VAL:CB	1:51:A:VAL:CG1	8	15.79
(1,239)	1:50:A:LEU:N	1:50:A:LEU:CA	1:50:A:LEU:C	1:51:A:VAL:N	3	15.77
(1,252)	1:54:A:ASP:CA	1:54:A:ASP:CB	1:54:A:ASP:CG	1:54:A:ASP:OD1	12	15.74
(1,47)	1:-2:A:GLY:N	1:-2:A:GLY:CA	1:-2:A:GLY:C	1:-1:A:SER:N	12	15.74
(1,241)	1:50:A:LEU:C	1:51:A:VAL:N	1:51:A:VAL:CA	1:51:A:VAL:C	8	15.68
(1,196)	1:38:A:SER:N	1:38:A:SER:CA	1:38:A:SER:C	1:39:A:SER:N	10	15.68

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,261)	1:56:A:ASP:CA	1:56:A:ASP:CB	1:56:A:ASP:CG	1:56:A:ASP:OD1	1	15.62
(1,305)	1:67:A:LYS:CA	1:67:A:LYS:CB	1:67:A:LYS:CG	1:67:A:LYS:CD	8	15.6
(1,268)	1:58:A:ASP:N	1:58:A:ASP:CA	1:58:A:ASP:CB	1:58:A:ASP:CG	2	15.6
(1,96)	1:11:A:PHE:C	1:12:A:ASN:N	1:12:A:ASN:CA	1:12:A:ASN:C	1	15.58
(1,126)	1:19:A:ASP:N	1:19:A:ASP:CA	1:19:A:ASP:CB	1:19:A:ASP:CG	9	15.57
(1,72)	1:5:A:GLN:C	1:6:A:GLU:N	1:6:A:GLU:CA	1:6:A:GLU:C	11	15.57
(1,156)	1:26:A:GLU:CA	1:26:A:GLU:CB	1:26:A:GLU:CG	1:26:A:GLU:CD	6	15.56
(1,105)	1:14:A:LEU:N	1:14:A:LEU:CA	1:14:A:LEU:C	1:15:A:ASP:N	3	15.5
(1,166)	1:28:A:PHE:C	1:29:A:LEU:N	1:29:A:LEU:CA	1:29:A:LEU:C	3	15.48
(1,136)	1:21:A:LYS:N	1:21:A:LYS:CA	1:21:A:LYS:C	1:22:A:ILE:N	11	15.45
(1,123)	1:18:A:GLN:N	1:18:A:GLN:CA	1:18:A:GLN:C	1:19:A:ASP:N	8	15.42
(1,280)	1:61:A:ILE:N	1:61:A:ILE:CA	1:61:A:ILE:CB	1:61:A:ILE:CG1	7	15.37
(1,110)	1:15:A:ASP:N	1:15:A:ASP:CA	1:15:A:ASP:C	1:16:A:ARG:N	12	15.31
(1,63)	1:3:A:THR:C	1:4:A:GLU:N	1:4:A:GLU:CA	1:4:A:GLU:C	7	15.31
(1,282)	1:61:A:ILE:N	1:61:A:ILE:CA	1:61:A:ILE:C	1:62:A:THR:N	5	15.26
(1,57)	1:1:A:MET:CA	1:1:A:MET:C	1:2:A:ALA:N	1:2:A:ALA:CA	11	15.25
(1,122)	1:17:A:ASP:C	1:18:A:GLN:N	1:18:A:GLN:CA	1:18:A:GLN:C	11	15.18
(1,199)	1:39:A:SER:N	1:39:A:SER:CA	1:39:A:SER:CB	1:39:A:SER:OG	7	15.17
(1,111)	1:15:A:ASP:CA	1:15:A:ASP:C	1:16:A:ARG:N	1:16:A:ARG:CA	8	15.16
(1,8)	1:15:A:HIS:CA	1:15:A:HIS:CB	1:15:A:HIS:CG	1:15:A:HIS:ND1	12	15.15
(1,243)	1:51:A:VAL:N	1:51:A:VAL:CA	1:51:A:VAL:C	1:52:A:GLN:N	6	15.11
(1,230)	1:48:A:GLU:CA	1:48:A:GLU:CB	1:48:A:GLU:CG	1:48:A:GLU:CD	12	15.09
(1,286)	1:62:A:THR:CA	1:62:A:THR:C	1:63:A:PHE:N	1:63:A:PHE:CA	3	15.06
(1,120)	1:17:A:ASP:N	1:17:A:ASP:CA	1:17:A:ASP:C	1:18:A:GLN:N	3	15.04
(1,134)	1:21:A:LYS:N	1:21:A:LYS:CA	1:21:A:LYS:CB	1:21:A:LYS:CG	8	15.03
(1,211)	1:42:A:ASN:CA	1:42:A:ASN:C	1:43:A:THR:N	1:43:A:THR:CA	11	15.0
(1,223)	1:46:A:PRO:CA	1:46:A:PRO:C	1:47:A:GLN:N	1:47:A:GLN:CA	1	14.99
(1,225)	1:47:A:GLN:N	1:47:A:GLN:CA	1:47:A:GLN:CB	1:47:A:GLN:CG	10	14.96
(1,273)	1:59:A:GLY:N	1:59:A:GLY:CA	1:59:A:GLY:C	1:60:A:SER:N	5	14.94
(1,250)	1:53:A:TYR:C	1:54:A:ASP:N	1:54:A:ASP:CA	1:54:A:ASP:C	12	14.91
(1,3)	1:17:A:SER:CA	1:17:A:SER:C	1:16:A:SER:N	1:16:A:SER:CA	9	14.87
(1,288)	1:63:A:PHE:CA	1:63:A:PHE:CB	1:63:A:PHE:CG	1:63:A:PHE:CD1	9	14.85
(1,260)	1:56:A:ASP:N	1:56:A:ASP:CA	1:56:A:ASP:CB	1:56:A:ASP:CG	10	14.85
(1,135)	1:21:A:LYS:CA	1:21:A:LYS:CB	1:21:A:LYS:CG	1:21:A:LYS:CD	5	14.82
(1,5)	1:16:A:SER:N	1:16:A:SER:CA	1:16:A:SER:C	1:15:A:HIS:N	1	14.81
(1,194)	1:37:A:ILE:CA	1:37:A:ILE:C	1:38:A:SER:N	1:38:A:SER:CA	11	14.8
(1,105)	1:14:A:LEU:N	1:14:A:LEU:CA	1:14:A:LEU:C	1:15:A:ASP:N	4	14.8
(1,219)	1:44:A:ASN:C	1:45:A:SER:N	1:45:A:SER:CA	1:45:A:SER:C	9	14.78
(1,274)	1:59:A:GLY:CA	1:59:A:GLY:C	1:60:A:SER:N	1:60:A:SER:CA	6	14.75
(1,106)	1:14:A:LEU:CA	1:14:A:LEU:C	1:15:A:ASP:N	1:15:A:ASP:CA	5	14.74
(1,254)	1:54:A:ASP:CA	1:54:A:ASP:C	1:55:A:SER:N	1:55:A:SER:CA	1	14.71
(1,117)	1:16:A:ARG:C	1:17:A:ASP:N	1:17:A:ASP:CA	1:17:A:ASP:C	7	14.7
(1,324)	1:72:A:LYS:CA	1:72:A:LYS:CB	1:72:A:LYS:CG	1:72:A:LYS:CD	11	14.61
(1,155)	1:26:A:GLU:N	1:26:A:GLU:CA	1:26:A:GLU:CB	1:26:A:GLU:CG	3	14.6
(1,122)	1:17:A:ASP:C	1:18:A:GLN:N	1:18:A:GLN:CA	1:18:A:GLN:C	6	14.6
(1,218)	1:44:A:ASN:CA	1:44:A:ASN:C	1:45:A:SER:N	1:45:A:SER:CA	4	14.59
(1,119)	1:17:A:ASP:CA	1:17:A:ASP:CB	1:17:A:ASP:CG	1:17:A:ASP:OD1	10	14.58
(1,328)	1:73:A:ALA:CA	1:73:A:ALA:C	1:74:A:SER:N	1:74:A:SER:CA	7	14.57
(1,246)	1:52:A:GLN:N	1:52:A:GLN:CA	1:52:A:GLN:C	1:53:A:TYR:N	3	14.57
(1,265)	1:57:A:GLN:N	1:57:A:GLN:CA	1:57:A:GLN:C	1:58:A:ASP:N	12	14.55
(1,300)	1:66:A:LEU:N	1:66:A:LEU:CA	1:66:A:LEU:CB	1:66:A:LEU:CG	4	14.54

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,145)	1:23:A:SER:CA	1:23:A:SER:C	1:24:A:ILE:N	1:24:A:ILE:CA	9	14.53
(1,245)	1:51:A:VAL:C	1:52:A:GLN:N	1:52:A:GLN:CA	1:52:A:GLN:C	12	14.51
(1,234)	1:49:A:LEU:N	1:49:A:LEU:CA	1:49:A:LEU:CB	1:49:A:LEU:CG	12	14.51
(1,278)	1:60:A:SER:CA	1:60:A:SER:C	1:61:A:ILE:N	1:61:A:ILE:CA	3	14.5
(1,135)	1:21:A:LYS:CA	1:21:A:LYS:CB	1:21:A:LYS:CG	1:21:A:LYS:CD	12	14.49
(1,125)	1:18:A:GLN:C	1:19:A:ASP:N	1:19:A:ASP:CA	1:19:A:ASP:C	8	14.48
(1,109)	1:15:A:ASP:CA	1:15:A:ASP:CB	1:15:A:ASP:CG	1:15:A:ASP:OD1	7	14.43
(1,79)	1:7:A:LEU:C	1:8:A:GLN:N	1:8:A:GLN:CA	1:8:A:GLN:C	12	14.43
(1,264)	1:56:A:ASP:C	1:57:A:GLN:N	1:57:A:GLN:CA	1:57:A:GLN:C	6	14.41
(1,223)	1:46:A:PRO:CA	1:46:A:PRO:C	1:47:A:GLN:N	1:47:A:GLN:CA	6	14.39
(1,161)	1:27:A:LEU:CA	1:27:A:LEU:C	1:28:A:PHE:N	1:28:A:PHE:CA	7	14.35
(1,103)	1:13:A:THR:C	1:14:A:LEU:N	1:14:A:LEU:CA	1:14:A:LEU:C	4	14.33
(1,235)	1:49:A:LEU:CA	1:49:A:LEU:CB	1:49:A:LEU:CG	1:49:A:LEU:CD1	3	14.25
(1,133)	1:20:A:GLY:C	1:21:A:LYS:N	1:21:A:LYS:CA	1:21:A:LYS:C	9	14.23
(1,72)	1:5:A:GLN:C	1:6:A:GLU:N	1:6:A:GLU:CA	1:6:A:GLU:C	5	14.19
(1,250)	1:53:A:TYR:C	1:54:A:ASP:N	1:54:A:ASP:CA	1:54:A:ASP:C	1	14.17
(1,95)	1:11:A:PHE:CA	1:11:A:PHE:C	1:12:A:ASN:N	1:12:A:ASN:CA	7	14.17
(1,199)	1:39:A:SER:N	1:39:A:SER:CA	1:39:A:SER:CB	1:39:A:SER:OG	10	14.15
(1,288)	1:63:A:PHE:CA	1:63:A:PHE:CB	1:63:A:PHE:CG	1:63:A:PHE:CD1	1	14.13
(1,132)	1:20:A:GLY:CA	1:20:A:GLY:C	1:21:A:LYS:N	1:21:A:LYS:CA	1	14.12
(1,245)	1:51:A:VAL:C	1:52:A:GLN:N	1:52:A:GLN:CA	1:52:A:GLN:C	9	14.11
(1,154)	1:25:A:ASN:C	1:26:A:GLU:N	1:26:A:GLU:CA	1:26:A:GLU:C	9	14.1
(1,21)	1:12:A:HIS:CA	1:12:A:HIS:C	1:11:A:HIS:N	1:11:A:HIS:CA	9	14.1
(1,219)	1:44:A:ASN:C	1:45:A:SER:N	1:45:A:SER:CA	1:45:A:SER:C	4	14.09
(1,110)	1:15:A:ASP:N	1:15:A:ASP:CA	1:15:A:ASP:C	1:16:A:ARG:N	8	14.09
(1,221)	1:45:A:SER:CA	1:45:A:SER:C	1:46:A:PRO:N	1:46:A:PRO:CA	9	14.08
(1,106)	1:14:A:LEU:CA	1:14:A:LEU:C	1:15:A:ASP:N	1:15:A:ASP:CA	8	14.08
(1,198)	1:38:A:SER:C	1:39:A:SER:N	1:39:A:SER:CA	1:39:A:SER:C	4	14.06
(1,145)	1:23:A:SER:CA	1:23:A:SER:C	1:24:A:ILE:N	1:24:A:ILE:CA	4	14.03
(1,259)	1:55:A:SER:C	1:56:A:ASP:N	1:56:A:ASP:CA	1:56:A:ASP:C	7	14.0
(1,135)	1:21:A:LYS:CA	1:21:A:LYS:CB	1:21:A:LYS:CG	1:21:A:LYS:CD	1	14.0
(1,116)	1:16:A:ARG:CA	1:16:A:ARG:C	1:17:A:ASP:N	1:17:A:ASP:CA	4	13.92
(1,67)	1:4:A:GLU:CA	1:4:A:GLU:C	1:5:A:GLN:N	1:5:A:GLN:CA	4	13.91
(1,234)	1:49:A:LEU:N	1:49:A:LEU:CA	1:49:A:LEU:CB	1:49:A:LEU:CG	10	13.9
(1,234)	1:49:A:LEU:N	1:49:A:LEU:CA	1:49:A:LEU:CB	1:49:A:LEU:CG	3	13.86
(1,211)	1:42:A:ASN:CA	1:42:A:ASN:C	1:43:A:THR:N	1:43:A:THR:CA	4	13.86
(1,65)	1:4:A:GLU:CA	1:4:A:GLU:CB	1:4:A:GLU:CG	1:4:A:GLU:CD	11	13.83
(1,255)	1:54:A:ASP:C	1:55:A:SER:N	1:55:A:SER:CA	1:55:A:SER:C	9	13.79
(1,117)	1:16:A:ARG:C	1:17:A:ASP:N	1:17:A:ASP:CA	1:17:A:ASP:C	2	13.79
(1,315)	1:70:A:VAL:N	1:70:A:VAL:CA	1:70:A:VAL:CB	1:70:A:VAL:CG1	2	13.77
(1,198)	1:38:A:SER:C	1:39:A:SER:N	1:39:A:SER:CA	1:39:A:SER:C	5	13.77
(1,214)	1:43:A:THR:N	1:43:A:THR:CA	1:43:A:THR:C	1:44:A:ASN:N	7	13.76
(1,106)	1:14:A:LEU:CA	1:14:A:LEU:C	1:15:A:ASP:N	1:15:A:ASP:CA	4	13.72
(1,78)	1:7:A:LEU:CA	1:7:A:LEU:C	1:8:A:GLN:N	1:8:A:GLN:CA	7	13.71
(1,222)	1:46:A:PRO:N	1:46:A:PRO:CA	1:46:A:PRO:C	1:47:A:GLN:N	7	13.7
(1,286)	1:62:A:THR:CA	1:62:A:THR:C	1:63:A:PHE:N	1:63:A:PHE:CA	12	13.69
(1,99)	1:12:A:ASN:C	1:13:A:THR:N	1:13:A:THR:CA	1:13:A:THR:C	6	13.64
(1,103)	1:13:A:THR:C	1:14:A:LEU:N	1:14:A:LEU:CA	1:14:A:LEU:C	10	13.62
(1,160)	1:27:A:LEU:N	1:27:A:LEU:CA	1:27:A:LEU:C	1:28:A:PHE:N	12	13.6
(1,142)	1:22:A:ILE:CA	1:22:A:ILE:C	1:23:A:SER:N	1:23:A:SER:CA	6	13.59
(1,261)	1:56:A:ASP:CA	1:56:A:ASP:CB	1:56:A:ASP:CG	1:56:A:ASP:OD1	3	13.58

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,312)	1:69:A:ALA:N	1:69:A:ALA:CA	1:69:A:ALA:C	1:70:A:VAL:N	7	13.56
(1,301)	1:66:A:LEU:CA	1:66:A:LEU:CB	1:66:A:LEU:CG	1:66:A:LEU:CD1	2	13.52
(1,62)	1:3:A:THR:CA	1:3:A:THR:C	1:4:A:GLU:N	1:4:A:GLU:CA	10	13.51
(1,219)	1:44:A:ASN:C	1:45:A:SER:N	1:45:A:SER:CA	1:45:A:SER:C	7	13.49
(1,232)	1:48:A:GLU:CA	1:48:A:GLU:C	1:49:A:LEU:N	1:49:A:LEU:CA	6	13.48
(1,228)	1:47:A:GLN:C	1:48:A:GLU:N	1:48:A:GLU:CA	1:48:A:GLU:C	2	13.45
(1,250)	1:53:A:TYR:C	1:54:A:ASP:N	1:54:A:ASP:CA	1:54:A:ASP:C	8	13.41
(1,318)	1:70:A:VAL:C	1:71:A:LYS:N	1:71:A:LYS:CA	1:71:A:LYS:C	9	13.39
(1,268)	1:58:A:ASP:N	1:58:A:ASP:CA	1:58:A:ASP:CB	1:58:A:ASP:CG	4	13.39
(1,13)	1:-14:A:HIS:N	1:-14:A:HIS:CA	1:-14:A:HIS:C	1:-13:A:HIS:N	10	13.39
(1,38)	1:-6:A:LEU:CA	1:-6:A:LEU:C	1:-5:A:VAL:N	1:-5:A:VAL:CA	3	13.35
(1,238)	1:49:A:LEU:C	1:50:A:LEU:N	1:50:A:LEU:CA	1:50:A:LEU:C	1	13.34
(1,139)	1:22:A:ILE:N	1:22:A:ILE:CA	1:22:A:ILE:CB	1:22:A:ILE:CG1	4	13.32
(1,33)	1:-8:A:SER:N	1:-8:A:SER:CA	1:-8:A:SER:C	1:-7:A:GLY:N	1	13.31
(1,263)	1:56:A:ASP:CA	1:56:A:ASP:C	1:57:A:GLN:N	1:57:A:GLN:CA	2	13.28
(1,158)	1:26:A:GLU:CA	1:26:A:GLU:C	1:27:A:LEU:N	1:27:A:LEU:CA	1	13.27
(1,115)	1:16:A:ARG:N	1:16:A:ARG:CA	1:16:A:ARG:C	1:17:A:ASP:N	9	13.27
(1,33)	1:-8:A:SER:N	1:-8:A:SER:CA	1:-8:A:SER:C	1:-7:A:GLY:N	11	13.27
(1,111)	1:15:A:ASP:CA	1:15:A:ASP:C	1:16:A:ARG:N	1:16:A:ARG:CA	9	13.26
(1,103)	1:13:A:THR:C	1:14:A:LEU:N	1:14:A:LEU:CA	1:14:A:LEU:C	3	13.25
(1,261)	1:56:A:ASP:CA	1:56:A:ASP:CB	1:56:A:ASP:CG	1:56:A:ASP:OD1	11	13.21
(1,170)	1:29:A:LEU:C	1:30:A:SER:N	1:30:A:SER:CA	1:30:A:SER:C	3	13.21
(1,138)	1:21:A:LYS:C	1:22:A:ILE:N	1:22:A:ILE:CA	1:22:A:ILE:C	1	13.18
(1,223)	1:46:A:PRO:CA	1:46:A:PRO:C	1:47:A:GLN:N	1:47:A:GLN:CA	4	13.16
(1,123)	1:18:A:GLN:N	1:18:A:GLN:CA	1:18:A:GLN:C	1:19:A:ASP:N	5	13.15
(1,73)	1:6:A:GLU:N	1:6:A:GLU:CA	1:6:A:GLU:CB	1:6:A:GLU:CG	7	13.15
(1,1)	1:-18:A:GLY:CA	1:-18:A:GLY:C	1:-17:A:SER:N	1:-17:A:SER:CA	4	13.14
(1,96)	1:11:A:PHE:C	1:12:A:ASN:N	1:12:A:ASN:CA	1:12:A:ASN:C	5	13.09
(1,252)	1:54:A:ASP:CA	1:54:A:ASP:CB	1:54:A:ASP:CG	1:54:A:ASP:OD1	10	13.07
(1,61)	1:3:A:THR:N	1:3:A:THR:CA	1:3:A:THR:C	1:4:A:GLU:N	2	13.07
(1,80)	1:8:A:GLN:CA	1:8:A:GLN:CB	1:8:A:GLN:CG	1:8:A:GLN:CD	2	13.05
(1,323)	1:72:A:LYS:N	1:72:A:LYS:CA	1:72:A:LYS:CB	1:72:A:LYS:CG	5	13.0
(1,210)	1:42:A:ASN:N	1:42:A:ASN:CA	1:42:A:ASN:C	1:43:A:THR:N	11	12.97
(1,5)	1:-16:A:SER:N	1:-16:A:SER:CA	1:-16:A:SER:C	1:-15:A:HIS:N	4	12.97
(1,262)	1:56:A:ASP:N	1:56:A:ASP:CA	1:56:A:ASP:C	1:57:A:GLN:N	9	12.93
(1,249)	1:53:A:TYR:CA	1:53:A:TYR:C	1:54:A:ASP:N	1:54:A:ASP:CA	5	12.93
(1,280)	1:61:A:ILE:N	1:61:A:ILE:CA	1:61:A:ILE:CB	1:61:A:ILE:CG1	1	12.9
(1,257)	1:55:A:SER:N	1:55:A:SER:CA	1:55:A:SER:C	1:56:A:ASP:N	4	12.9
(1,192)	1:37:A:ILE:CA	1:37:A:ILE:CB	1:37:A:ILE:CG1	1:37:A:ILE:CD1	11	12.9
(1,152)	1:25:A:ASN:N	1:25:A:ASN:CA	1:25:A:ASN:C	1:26:A:GLU:N	2	12.88
(1,70)	1:5:A:GLN:N	1:5:A:GLN:CA	1:5:A:GLN:C	1:6:A:GLU:N	5	12.88
(1,220)	1:45:A:SER:N	1:45:A:SER:CA	1:45:A:SER:CB	1:45:A:SER:OG	5	12.87
(1,277)	1:60:A:SER:N	1:60:A:SER:CA	1:60:A:SER:C	1:61:A:ILE:N	9	12.82
(1,1)	1:-18:A:GLY:CA	1:-18:A:GLY:C	1:-17:A:SER:N	1:-17:A:SER:CA	8	12.81
(1,74)	1:6:A:GLU:N	1:6:A:GLU:CA	1:6:A:GLU:C	1:7:A:LEU:N	5	12.8
(1,138)	1:21:A:LYS:C	1:22:A:ILE:N	1:22:A:ILE:CA	1:22:A:ILE:C	6	12.77
(1,21)	1:-12:A:HIS:CA	1:-12:A:HIS:C	1:-11:A:HIS:N	1:-11:A:HIS:CA	12	12.77
(1,296)	1:65:A:GLU:CA	1:65:A:GLU:CB	1:65:A:GLU:CG	1:65:A:GLU:CD	1	12.74
(1,283)	1:61:A:ILE:CA	1:61:A:ILE:C	1:62:A:THR:N	1:62:A:THR:CA	5	12.74
(1,64)	1:4:A:GLU:N	1:4:A:GLU:CA	1:4:A:GLU:CB	1:4:A:GLU:CG	5	12.73
(1,210)	1:42:A:ASN:N	1:42:A:ASN:CA	1:42:A:ASN:C	1:43:A:THR:N	2	12.67

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,186)	1:35:A:ALA:C	1:36:A:VAL:N	1:36:A:VAL:CA	1:36:A:VAL:C	8	12.67
(1,157)	1:26:A:GLU:N	1:26:A:GLU:CA	1:26:A:GLU:C	1:27:A:LEU:N	9	12.67
(1,9)	1:-15:A:HIS:N	1:-15:A:HIS:CA	1:-15:A:HIS:C	1:-14:A:HIS:N	12	12.66
(1,174)	1:31:A:PRO:C	1:32:A:GLY:N	1:32:A:GLY:CA	1:32:A:GLY:C	9	12.65
(1,5)	1:-16:A:SER:N	1:-16:A:SER:CA	1:-16:A:SER:C	1:-15:A:HIS:N	8	12.64
(1,225)	1:47:A:GLN:N	1:47:A:GLN:CA	1:47:A:GLN:CB	1:47:A:GLN:CG	6	12.57
(1,3)	1:-17:A:SER:CA	1:-17:A:SER:C	1:-16:A:SER:N	1:-16:A:SER:CA	1	12.57
(1,64)	1:4:A:GLU:N	1:4:A:GLU:CA	1:4:A:GLU:CB	1:4:A:GLU:CG	4	12.55
(1,39)	1:-6:A:LEU:C	1:-5:A:VAL:N	1:-5:A:VAL:CA	1:-5:A:VAL:C	7	12.51
(1,106)	1:14:A:LEU:CA	1:14:A:LEU:C	1:15:A:ASP:N	1:15:A:ASP:CA	1	12.48
(1,63)	1:3:A:THR:C	1:4:A:GLU:N	1:4:A:GLU:CA	1:4:A:GLU:C	9	12.48
(1,42)	1:-4:A:PRO:N	1:-4:A:PRO:CA	1:-4:A:PRO:C	1:-3:A:ARG:N	3	12.46
(1,158)	1:26:A:GLU:CA	1:26:A:GLU:C	1:27:A:LEU:N	1:27:A:LEU:CA	2	12.45
(1,65)	1:4:A:GLU:CA	1:4:A:GLU:CB	1:4:A:GLU:CG	1:4:A:GLU:CD	5	12.44
(1,100)	1:13:A:THR:N	1:13:A:THR:CA	1:13:A:THR:CB	1:13:A:THR:OG1	3	12.42
(1,155)	1:26:A:GLU:N	1:26:A:GLU:CA	1:26:A:GLU:CB	1:26:A:GLU:CG	7	12.41
(1,211)	1:42:A:ASN:CA	1:42:A:ASN:C	1:43:A:THR:N	1:43:A:THR:CA	1	12.4
(1,283)	1:61:A:ILE:CA	1:61:A:ILE:C	1:62:A:THR:N	1:62:A:THR:CA	11	12.39
(1,156)	1:26:A:GLU:CA	1:26:A:GLU:CB	1:26:A:GLU:CG	1:26:A:GLU:CD	8	12.35
(1,81)	1:8:A:GLN:N	1:8:A:GLN:CA	1:8:A:GLN:C	1:9:A:SER:N	3	12.35
(1,277)	1:60:A:SER:N	1:60:A:SER:CA	1:60:A:SER:C	1:61:A:ILE:N	8	12.34
(1,259)	1:55:A:SER:C	1:56:A:ASP:N	1:56:A:ASP:CA	1:56:A:ASP:C	9	12.33
(1,195)	1:37:A:ILE:C	1:38:A:SER:N	1:38:A:SER:CA	1:38:A:SER:C	6	12.33
(1,157)	1:26:A:GLU:N	1:26:A:GLU:CA	1:26:A:GLU:C	1:27:A:LEU:N	12	12.3
(1,42)	1:-4:A:PRO:N	1:-4:A:PRO:CA	1:-4:A:PRO:C	1:-3:A:ARG:N	12	12.25
(1,118)	1:17:A:ASP:N	1:17:A:ASP:CA	1:17:A:ASP:CB	1:17:A:ASP:CG	3	12.24
(1,268)	1:58:A:ASP:N	1:58:A:ASP:CA	1:58:A:ASP:CB	1:58:A:ASP:CG	10	12.21
(1,222)	1:46:A:PRO:N	1:46:A:PRO:CA	1:46:A:PRO:C	1:47:A:GLN:N	10	12.18
(1,165)	1:28:A:PHE:CA	1:28:A:PHE:C	1:29:A:LEU:N	1:29:A:LEU:CA	2	12.18
(1,116)	1:16:A:ARG:CA	1:16:A:ARG:C	1:17:A:ASP:N	1:17:A:ASP:CA	3	12.18
(1,282)	1:61:A:ILE:N	1:61:A:ILE:CA	1:61:A:ILE:C	1:62:A:THR:N	10	12.17
(1,215)	1:43:A:THR:CA	1:43:A:THR:C	1:44:A:ASN:N	1:44:A:ASN:CA	3	12.16
(1,96)	1:11:A:PHE:C	1:12:A:ASN:N	1:12:A:ASN:CA	1:12:A:ASN:C	12	12.16
(1,326)	1:72:A:LYS:CA	1:72:A:LYS:C	1:73:A:ALA:N	1:73:A:ALA:CA	10	12.15
(1,142)	1:22:A:ILE:CA	1:22:A:ILE:C	1:23:A:SER:N	1:23:A:SER:CA	9	12.12
(1,244)	1:51:A:VAL:CA	1:51:A:VAL:C	1:52:A:GLN:N	1:52:A:GLN:CA	2	12.09
(1,179)	1:33:A:LEU:CA	1:33:A:LEU:C	1:34:A:SER:N	1:34:A:SER:CA	5	12.09
(1,151)	1:24:A:ILE:C	1:25:A:ASN:N	1:25:A:ASN:CA	1:25:A:ASN:C	6	12.08
(1,56)	1:1:A:MET:N	1:1:A:MET:CA	1:1:A:MET:C	1:2:A:ALA:N	8	12.07
(1,136)	1:21:A:LYS:N	1:21:A:LYS:CA	1:21:A:LYS:C	1:22:A:ILE:N	6	12.05
(1,312)	1:69:A:ALA:N	1:69:A:ALA:CA	1:69:A:ALA:C	1:70:A:VAL:N	6	12.02
(1,131)	1:20:A:GLY:N	1:20:A:GLY:CA	1:20:A:GLY:C	1:21:A:LYS:N	5	12.02
(1,200)	1:39:A:SER:N	1:39:A:SER:CA	1:39:A:SER:C	1:40:A:GLU:N	12	12.0
(1,214)	1:43:A:THR:N	1:43:A:THR:CA	1:43:A:THR:C	1:44:A:ASN:N	2	11.99
(1,229)	1:48:A:GLU:N	1:48:A:GLU:CA	1:48:A:GLU:CB	1:48:A:GLU:CG	7	11.97
(1,206)	1:40:A:GLU:C	1:41:A:THR:N	1:41:A:THR:CA	1:41:A:THR:C	9	11.93
(1,308)	1:67:A:LYS:C	1:68:A:LYS:N	1:68:A:LYS:CA	1:68:A:LYS:C	6	11.92
(1,222)	1:46:A:PRO:N	1:46:A:PRO:CA	1:46:A:PRO:C	1:47:A:GLN:N	6	11.9
(1,204)	1:40:A:GLU:N	1:40:A:GLU:CA	1:40:A:GLU:C	1:41:A:THR:N	2	11.89
(1,181)	1:34:A:SER:N	1:34:A:SER:CA	1:34:A:SER:C	1:35:A:ALA:N	1	11.88
(1,315)	1:70:A:VAL:N	1:70:A:VAL:CA	1:70:A:VAL:CB	1:70:A:VAL:CG1	1	11.87

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,136)	1:21:A:LYS:N	1:21:A:LYS:CA	1:21:A:LYS:C	1:22:A:ILE:N	1	11.86
(1,204)	1:40:A:GLU:N	1:40:A:GLU:CA	1:40:A:GLU:C	1:41:A:THR:N	9	11.84
(1,137)	1:21:A:LYS:CA	1:21:A:LYS:C	1:22:A:ILE:N	1:22:A:ILE:CA	4	11.82
(1,293)	1:64:A:GLU:CA	1:64:A:GLU:C	1:65:A:GLU:N	1:65:A:GLU:CA	3	11.8
(1,156)	1:26:A:GLU:CA	1:26:A:GLU:CB	1:26:A:GLU:CG	1:26:A:GLU:CD	4	11.79
(1,126)	1:19:A:ASP:N	1:19:A:ASP:CA	1:19:A:ASP:CB	1:19:A:ASP:CG	3	11.79
(1,319)	1:71:A:LYS:CA	1:71:A:LYS:CB	1:71:A:LYS:CG	1:71:A:LYS:CD	8	11.78
(1,261)	1:56:A:ASP:CA	1:56:A:ASP:CB	1:56:A:ASP:CG	1:56:A:ASP:OD1	8	11.77
(1,64)	1:4:A:GLU:N	1:4:A:GLU:CA	1:4:A:GLU:CB	1:4:A:GLU:CG	3	11.76
(1,288)	1:63:A:PHE:CA	1:63:A:PHE:CB	1:63:A:PHE:CG	1:63:A:PHE:CD1	5	11.75
(1,179)	1:33:A:LEU:CA	1:33:A:LEU:C	1:34:A:SER:N	1:34:A:SER:CA	2	11.75
(1,130)	1:19:A:ASP:C	1:20:A:GLY:N	1:20:A:GLY:CA	1:20:A:GLY:C	3	11.74
(1,217)	1:44:A:ASN:N	1:44:A:ASN:CA	1:44:A:ASN:C	1:45:A:SER:N	10	11.72
(1,160)	1:27:A:LEU:N	1:27:A:LEU:CA	1:27:A:LEU:C	1:28:A:PHE:N	6	11.71
(1,122)	1:17:A:ASP:C	1:18:A:GLN:N	1:18:A:GLN:CA	1:18:A:GLN:C	8	11.71
(1,3)	1:-17:A:SER:CA	1:-17:A:SER:C	1:-16:A:SER:N	1:-16:A:SER:CA	3	11.71
(1,154)	1:25:A:ASN:C	1:26:A:GLU:N	1:26:A:GLU:CA	1:26:A:GLU:C	12	11.69
(1,246)	1:52:A:GLN:N	1:52:A:GLN:CA	1:52:A:GLN:C	1:53:A:TYR:N	9	11.65
(1,170)	1:29:A:LEU:C	1:30:A:SER:N	1:30:A:SER:CA	1:30:A:SER:C	8	11.64
(1,274)	1:59:A:GLY:CA	1:59:A:GLY:C	1:60:A:SER:N	1:60:A:SER:CA	9	11.63
(1,170)	1:29:A:LEU:C	1:30:A:SER:N	1:30:A:SER:CA	1:30:A:SER:C	1	11.62
(1,122)	1:17:A:ASP:C	1:18:A:GLN:N	1:18:A:GLN:CA	1:18:A:GLN:C	7	11.62
(1,309)	1:68:A:LYS:N	1:68:A:LYS:CA	1:68:A:LYS:C	1:69:A:ALA:N	12	11.61
(1,336)	1:76:A:LEU:CA	1:76:A:LEU:C	1:77:A:THR:N	1:77:A:THR:CA	1	11.58
(1,168)	1:29:A:LEU:N	1:29:A:LEU:CA	1:29:A:LEU:C	1:30:A:SER:N	4	11.56
(1,176)	1:32:A:GLY:CA	1:32:A:GLY:C	1:33:A:LEU:N	1:33:A:LEU:CA	9	11.55
(1,250)	1:53:A:TYR:C	1:54:A:ASP:N	1:54:A:ASP:CA	1:54:A:ASP:C	2	11.53
(1,74)	1:6:A:GLU:N	1:6:A:GLU:CA	1:6:A:GLU:C	1:7:A:LEU:N	12	11.53
(1,263)	1:56:A:ASP:CA	1:56:A:ASP:C	1:57:A:GLN:N	1:57:A:GLN:CA	3	11.51
(1,295)	1:65:A:GLU:N	1:65:A:GLU:CA	1:65:A:GLU:CB	1:65:A:GLU:CG	8	11.5
(1,277)	1:60:A:SER:N	1:60:A:SER:CA	1:60:A:SER:C	1:61:A:ILE:N	7	11.5
(1,240)	1:50:A:LEU:CA	1:50:A:LEU:C	1:51:A:VAL:N	1:51:A:VAL:CA	1	11.5
(1,300)	1:66:A:LEU:N	1:66:A:LEU:CA	1:66:A:LEU:CB	1:66:A:LEU:CG	7	11.45
(1,122)	1:17:A:ASP:C	1:18:A:GLN:N	1:18:A:GLN:CA	1:18:A:GLN:C	2	11.45
(1,67)	1:4:A:GLU:CA	1:4:A:GLU:C	1:5:A:GLN:N	1:5:A:GLN:CA	12	11.45
(1,291)	1:63:A:PHE:C	1:64:A:GLU:N	1:64:A:GLU:CA	1:64:A:GLU:C	11	11.44
(1,253)	1:54:A:ASP:N	1:54:A:ASP:CA	1:54:A:ASP:C	1:55:A:SER:N	9	11.4
(1,187)	1:36:A:VAL:N	1:36:A:VAL:CA	1:36:A:VAL:CB	1:36:A:VAL:CG1	11	11.4
(1,142)	1:22:A:ILE:CA	1:22:A:ILE:C	1:23:A:SER:N	1:23:A:SER:CA	8	11.39
(1,189)	1:36:A:VAL:CA	1:36:A:VAL:C	1:37:A:ILE:N	1:37:A:ILE:CA	11	11.38
(1,101)	1:13:A:THR:N	1:13:A:THR:CA	1:13:A:THR:C	1:14:A:LEU:N	6	11.38
(1,279)	1:60:A:SER:C	1:61:A:ILE:N	1:61:A:ILE:CA	1:61:A:ILE:C	4	11.36
(1,80)	1:8:A:GLN:CA	1:8:A:GLN:CB	1:8:A:GLN:CG	1:8:A:GLN:CD	12	11.36
(1,273)	1:59:A:GLY:N	1:59:A:GLY:CA	1:59:A:GLY:C	1:60:A:SER:N	1	11.31
(1,195)	1:37:A:ILE:C	1:38:A:SER:N	1:38:A:SER:CA	1:38:A:SER:C	10	11.29
(1,202)	1:39:A:SER:C	1:40:A:GLU:N	1:40:A:GLU:CA	1:40:A:GLU:C	9	11.28
(1,267)	1:57:A:GLN:C	1:58:A:ASP:N	1:58:A:ASP:CA	1:58:A:ASP:C	3	11.26
(1,139)	1:22:A:ILE:N	1:22:A:ILE:CA	1:22:A:ILE:CB	1:22:A:ILE:CG1	2	11.26
(1,111)	1:15:A:ASP:CA	1:15:A:ASP:C	1:16:A:ARG:N	1:16:A:ARG:CA	11	11.26
(1,300)	1:66:A:LEU:N	1:66:A:LEU:CA	1:66:A:LEU:CB	1:66:A:LEU:CG	9	11.23
(1,184)	1:35:A:ALA:N	1:35:A:ALA:CA	1:35:A:ALA:C	1:36:A:VAL:N	7	11.23

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,169)	1:29:A:LEU:CA	1:29:A:LEU:C	1:30:A:SER:N	1:30:A:SER:CA	6	11.2
(1,245)	1:51:A:VAL:C	1:52:A:GLN:N	1:52:A:GLN:CA	1:52:A:GLN:C	7	11.18
(1,218)	1:44:A:ASN:CA	1:44:A:ASN:C	1:45:A:SER:N	1:45:A:SER:CA	2	11.17
(1,238)	1:49:A:LEU:C	1:50:A:LEU:N	1:50:A:LEU:CA	1:50:A:LEU:C	4	11.15
(1,205)	1:40:A:GLU:CA	1:40:A:GLU:C	1:41:A:THR:N	1:41:A:THR:CA	7	11.15
(1,118)	1:17:A:ASP:N	1:17:A:ASP:CA	1:17:A:ASP:CB	1:17:A:ASP:CG	6	11.15
(1,41)	1:-5:A:VAL:CA	1:-5:A:VAL:C	1:-4:A:PRO:N	1:-4:A:PRO:CA	10	11.15
(1,229)	1:48:A:GLU:N	1:48:A:GLU:CA	1:48:A:GLU:CB	1:48:A:GLU:CG	4	11.11
(1,132)	1:20:A:GLY:CA	1:20:A:GLY:C	1:21:A:LYS:N	1:21:A:LYS:CA	12	11.11
(1,301)	1:66:A:LEU:CA	1:66:A:LEU:CB	1:66:A:LEU:CG	1:66:A:LEU:CD1	5	11.1
(1,261)	1:56:A:ASP:CA	1:56:A:ASP:CB	1:56:A:ASP:CG	1:56:A:ASP:OD1	12	11.08
(1,66)	1:4:A:GLU:N	1:4:A:GLU:CA	1:4:A:GLU:C	1:5:A:GLN:N	7	11.08
(1,258)	1:55:A:SER:CA	1:55:A:SER:C	1:56:A:ASP:N	1:56:A:ASP:CA	7	11.07
(1,13)	1:-14:A:HIS:N	1:-14:A:HIS:CA	1:-14:A:HIS:C	1:-13:A:HIS:N	9	11.06
(1,334)	1:76:A:LEU:N	1:76:A:LEU:CA	1:76:A:LEU:CB	1:76:A:LEU:CG	12	11.04
(1,82)	1:8:A:GLN:CA	1:8:A:GLN:C	1:9:A:SER:N	1:9:A:SER:CA	3	11.04
(1,188)	1:36:A:VAL:N	1:36:A:VAL:CA	1:36:A:VAL:C	1:37:A:ILE:N	2	11.03
(1,63)	1:3:A:THR:C	1:4:A:GLU:N	1:4:A:GLU:CA	1:4:A:GLU:C	12	11.03
(1,71)	1:5:A:GLN:CA	1:5:A:GLN:C	1:6:A:GLU:N	1:6:A:GLU:CA	2	11.01
(1,62)	1:3:A:THR:CA	1:3:A:THR:C	1:4:A:GLU:N	1:4:A:GLU:CA	11	11.01
(1,199)	1:39:A:SER:N	1:39:A:SER:CA	1:39:A:SER:CB	1:39:A:SER:OG	5	11.0
(1,295)	1:65:A:GLU:N	1:65:A:GLU:CA	1:65:A:GLU:CB	1:65:A:GLU:CG	9	10.97
(1,279)	1:60:A:SER:C	1:61:A:ILE:N	1:61:A:ILE:CA	1:61:A:ILE:C	9	10.97
(1,261)	1:56:A:ASP:CA	1:56:A:ASP:CB	1:56:A:ASP:CG	1:56:A:ASP:OD1	4	10.96
(1,222)	1:46:A:PRO:N	1:46:A:PRO:CA	1:46:A:PRO:C	1:47:A:GLN:N	1	10.95
(1,220)	1:45:A:SER:N	1:45:A:SER:CA	1:45:A:SER:CB	1:45:A:SER:OG	10	10.95
(1,229)	1:48:A:GLU:N	1:48:A:GLU:CA	1:48:A:GLU:CB	1:48:A:GLU:CG	9	10.94
(1,41)	1:-5:A:VAL:CA	1:-5:A:VAL:C	1:-4:A:PRO:N	1:-4:A:PRO:CA	11	10.91
(1,95)	1:11:A:PHE:CA	1:11:A:PHE:C	1:12:A:ASN:N	1:12:A:ASN:CA	10	10.88
(1,145)	1:23:A:SER:CA	1:23:A:SER:C	1:24:A:ILE:N	1:24:A:ILE:CA	6	10.87
(1,202)	1:39:A:SER:C	1:40:A:GLU:N	1:40:A:GLU:CA	1:40:A:GLU:C	3	10.86
(1,174)	1:31:A:PRO:C	1:32:A:GLY:N	1:32:A:GLY:CA	1:32:A:GLY:C	6	10.85
(1,312)	1:69:A:ALA:N	1:69:A:ALA:CA	1:69:A:ALA:C	1:70:A:VAL:N	3	10.83
(1,268)	1:58:A:ASP:N	1:58:A:ASP:CA	1:58:A:ASP:CB	1:58:A:ASP:CG	1	10.83
(1,143)	1:22:A:ILE:C	1:23:A:SER:N	1:23:A:SER:CA	1:23:A:SER:C	4	10.83
(1,132)	1:20:A:GLY:CA	1:20:A:GLY:C	1:21:A:LYS:N	1:21:A:LYS:CA	10	10.83
(1,299)	1:65:A:GLU:C	1:66:A:LEU:N	1:66:A:LEU:CA	1:66:A:LEU:C	5	10.81
(1,246)	1:52:A:GLN:N	1:52:A:GLN:CA	1:52:A:GLN:C	1:53:A:TYR:N	7	10.79
(1,135)	1:21:A:LYS:CA	1:21:A:LYS:CB	1:21:A:LYS:CG	1:21:A:LYS:CD	2	10.79
(1,211)	1:42:A:ASN:CA	1:42:A:ASN:C	1:43:A:THR:N	1:43:A:THR:CA	2	10.78
(1,210)	1:42:A:ASN:N	1:42:A:ASN:CA	1:42:A:ASN:C	1:43:A:THR:N	6	10.76
(1,131)	1:20:A:GLY:N	1:20:A:GLY:CA	1:20:A:GLY:C	1:21:A:LYS:N	6	10.76
(1,132)	1:20:A:GLY:CA	1:20:A:GLY:C	1:21:A:LYS:N	1:21:A:LYS:CA	11	10.75
(1,47)	1:-2:A:GLY:N	1:-2:A:GLY:CA	1:-2:A:GLY:C	1:-1:A:SER:N	8	10.75
(1,294)	1:64:A:GLU:C	1:65:A:GLU:N	1:65:A:GLU:CA	1:65:A:GLU:C	3	10.74
(1,274)	1:59:A:GLY:CA	1:59:A:GLY:C	1:60:A:SER:N	1:60:A:SER:CA	8	10.74
(1,267)	1:57:A:GLN:C	1:58:A:ASP:N	1:58:A:ASP:CA	1:58:A:ASP:C	1	10.74
(1,310)	1:68:A:LYS:CA	1:68:A:LYS:C	1:69:A:ALA:N	1:69:A:ALA:CA	6	10.72
(1,151)	1:24:A:ILE:C	1:25:A:ASN:N	1:25:A:ASN:CA	1:25:A:ASN:C	4	10.72
(1,78)	1:7:A:LEU:CA	1:7:A:LEU:C	1:8:A:GLN:N	1:8:A:GLN:CA	5	10.65
(1,20)	1:-12:A:HIS:N	1:-12:A:HIS:CA	1:-12:A:HIS:C	1:-11:A:HIS:N	6	10.65

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,5)	1:-16:A:SER:N	1:-16:A:SER:CA	1:-16:A:SER:C	1:-15:A:HIS:N	5	10.65
(1,204)	1:40:A:GLU:N	1:40:A:GLU:CA	1:40:A:GLU:C	1:41:A:THR:N	3	10.64
(1,134)	1:21:A:LYS:N	1:21:A:LYS:CA	1:21:A:LYS:CB	1:21:A:LYS:CG	5	10.64
(1,332)	1:75:A:ASN:CA	1:75:A:ASN:C	1:76:A:LEU:N	1:76:A:LEU:CA	10	10.62
(1,118)	1:17:A:ASP:N	1:17:A:ASP:CA	1:17:A:ASP:CB	1:17:A:ASP:CG	1	10.62
(1,218)	1:44:A:ASN:CA	1:44:A:ASN:C	1:45:A:SER:N	1:45:A:SER:CA	1	10.6
(1,187)	1:36:A:VAL:N	1:36:A:VAL:CA	1:36:A:VAL:CB	1:36:A:VAL:CG1	8	10.58
(1,194)	1:37:A:ILE:CA	1:37:A:ILE:C	1:38:A:SER:N	1:38:A:SER:CA	2	10.56
(1,65)	1:4:A:GLU:CA	1:4:A:GLU:CB	1:4:A:GLU:CG	1:4:A:GLU:CD	6	10.52
(1,321)	1:71:A:LYS:CA	1:71:A:LYS:C	1:72:A:LYS:N	1:72:A:LYS:CA	3	10.46
(1,319)	1:71:A:LYS:CA	1:71:A:LYS:CB	1:71:A:LYS:CG	1:71:A:LYS:CD	3	10.44
(1,283)	1:61:A:ILE:CA	1:61:A:ILE:C	1:62:A:THR:N	1:62:A:THR:CA	9	10.44
(1,111)	1:15:A:ASP:CA	1:15:A:ASP:C	1:16:A:ARG:N	1:16:A:ARG:CA	3	10.44
(1,42)	1:-4:A:PRO:N	1:-4:A:PRO:CA	1:-4:A:PRO:C	1:-3:A:ARG:N	5	10.44
(1,268)	1:58:A:ASP:N	1:58:A:ASP:CA	1:58:A:ASP:CB	1:58:A:ASP:CG	9	10.41
(1,218)	1:44:A:ASN:CA	1:44:A:ASN:C	1:45:A:SER:N	1:45:A:SER:CA	6	10.41
(1,223)	1:46:A:PRO:CA	1:46:A:PRO:C	1:47:A:GLN:N	1:47:A:GLN:CA	12	10.4
(1,191)	1:37:A:ILE:N	1:37:A:ILE:CA	1:37:A:ILE:CB	1:37:A:ILE:CG1	4	10.4
(1,254)	1:54:A:ASP:CA	1:54:A:ASP:C	1:55:A:SER:N	1:55:A:SER:CA	11	10.39
(1,191)	1:37:A:ILE:N	1:37:A:ILE:CA	1:37:A:ILE:CB	1:37:A:ILE:CG1	6	10.39
(1,115)	1:16:A:ARG:N	1:16:A:ARG:CA	1:16:A:ARG:C	1:17:A:ASP:N	3	10.39
(1,92)	1:11:A:PHE:N	1:11:A:PHE:CA	1:11:A:PHE:CB	1:11:A:PHE:CG	4	10.39
(1,192)	1:37:A:ILE:CA	1:37:A:ILE:CB	1:37:A:ILE:CG1	1:37:A:ILE:CD1	5	10.37
(1,120)	1:17:A:ASP:N	1:17:A:ASP:CA	1:17:A:ASP:C	1:18:A:GLN:N	6	10.37
(1,98)	1:12:A:ASN:CA	1:12:A:ASN:C	1:13:A:THR:N	1:13:A:THR:CA	12	10.37
(1,104)	1:14:A:LEU:CA	1:14:A:LEU:CB	1:14:A:LEU:CG	1:14:A:LEU:CD1	4	10.35
(1,35)	1:-7:A:GLY:N	1:-7:A:GLY:CA	1:-7:A:GLY:C	1:-6:A:LEU:N	5	10.34
(1,236)	1:49:A:LEU:N	1:49:A:LEU:CA	1:49:A:LEU:C	1:50:A:LEU:N	4	10.33
(1,241)	1:50:A:LEU:C	1:51:A:VAL:N	1:51:A:VAL:CA	1:51:A:VAL:C	6	10.32
(1,132)	1:20:A:GLY:CA	1:20:A:GLY:C	1:21:A:LYS:N	1:21:A:LYS:CA	5	10.27
(1,234)	1:49:A:LEU:N	1:49:A:LEU:CA	1:49:A:LEU:CB	1:49:A:LEU:CG	1	10.26
(1,72)	1:5:A:GLN:C	1:6:A:GLU:N	1:6:A:GLU:CA	1:6:A:GLU:C	12	10.26
(1,242)	1:51:A:VAL:N	1:51:A:VAL:CA	1:51:A:VAL:CB	1:51:A:VAL:CG1	6	10.24
(1,37)	1:-7:A:GLY:C	1:-6:A:LEU:N	1:-6:A:LEU:CA	1:-6:A:LEU:C	7	10.24
(1,82)	1:8:A:GLN:CA	1:8:A:GLN:C	1:9:A:SER:N	1:9:A:SER:CA	8	10.23
(1,266)	1:57:A:GLN:CA	1:57:A:GLN:C	1:58:A:ASP:N	1:58:A:ASP:CA	7	10.21
(1,259)	1:55:A:SER:C	1:56:A:ASP:N	1:56:A:ASP:CA	1:56:A:ASP:C	2	10.2
(1,80)	1:8:A:GLN:CA	1:8:A:GLN:CB	1:8:A:GLN:CG	1:8:A:GLN:CD	8	10.2
(1,253)	1:54:A:ASP:N	1:54:A:ASP:CA	1:54:A:ASP:C	1:55:A:SER:N	5	10.17
(1,172)	1:30:A:SER:CA	1:30:A:SER:C	1:31:A:PRO:N	1:31:A:PRO:CA	5	10.17
(1,130)	1:19:A:ASP:C	1:20:A:GLY:N	1:20:A:GLY:CA	1:20:A:GLY:C	6	10.17
(1,308)	1:67:A:LYS:C	1:68:A:LYS:N	1:68:A:LYS:CA	1:68:A:LYS:C	12	10.16
(1,215)	1:43:A:THR:CA	1:43:A:THR:C	1:44:A:ASN:N	1:44:A:ASN:CA	1	10.16
(1,170)	1:29:A:LEU:C	1:30:A:SER:N	1:30:A:SER:CA	1:30:A:SER:C	12	10.16
(1,155)	1:26:A:GLU:N	1:26:A:GLU:CA	1:26:A:GLU:CB	1:26:A:GLU:CG	9	10.12
(1,78)	1:7:A:LEU:CA	1:7:A:LEU:C	1:8:A:GLN:N	1:8:A:GLN:CA	1	10.12
(1,303)	1:66:A:LEU:CA	1:66:A:LEU:C	1:67:A:LYS:N	1:67:A:LYS:CA	2	10.11
(1,274)	1:59:A:GLY:CA	1:59:A:GLY:C	1:60:A:SER:N	1:60:A:SER:CA	5	10.09
(1,258)	1:55:A:SER:CA	1:55:A:SER:C	1:56:A:ASP:N	1:56:A:ASP:CA	6	10.09
(1,71)	1:5:A:GLN:CA	1:5:A:GLN:C	1:6:A:GLU:N	1:6:A:GLU:CA	3	10.06
(1,66)	1:4:A:GLU:N	1:4:A:GLU:CA	1:4:A:GLU:C	1:5:A:GLN:N	12	10.06

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,40)	1:-5:A:VAL:N	1:-5:A:VAL:CA	1:-5:A:VAL:CB	1:-5:A:VAL:CG1	12	10.06
(1,173)	1:31:A:PRO:CA	1:31:A:PRO:C	1:32:A:GLY:N	1:32:A:GLY:CA	3	10.04
(1,109)	1:15:A:ASP:CA	1:15:A:ASP:CB	1:15:A:ASP:CG	1:15:A:ASP:OD1	6	10.02
(1,154)	1:25:A:ASN:C	1:26:A:GLU:N	1:26:A:GLU:CA	1:26:A:GLU:C	4	10.01
(1,292)	1:64:A:GLU:N	1:64:A:GLU:CA	1:64:A:GLU:C	1:65:A:GLU:N	12	9.99
(1,283)	1:61:A:ILE:CA	1:61:A:ILE:C	1:62:A:THR:N	1:62:A:THR:CA	8	9.99
(1,211)	1:42:A:ASN:CA	1:42:A:ASN:C	1:43:A:THR:N	1:43:A:THR:CA	12	9.99
(1,186)	1:35:A:ALA:C	1:36:A:VAL:N	1:36:A:VAL:CA	1:36:A:VAL:C	1	9.95
(1,108)	1:15:A:ASP:N	1:15:A:ASP:CA	1:15:A:ASP:CB	1:15:A:ASP:CG	2	9.94
(1,288)	1:63:A:PHE:CA	1:63:A:PHE:CB	1:63:A:PHE:CG	1:63:A:PHE:CD1	7	9.92
(1,302)	1:66:A:LEU:N	1:66:A:LEU:CA	1:66:A:LEU:C	1:67:A:LYS:N	9	9.88
(1,241)	1:50:A:LEU:C	1:51:A:VAL:N	1:51:A:VAL:CA	1:51:A:VAL:C	12	9.87
(1,98)	1:12:A:ASN:CA	1:12:A:ASN:C	1:13:A:THR:N	1:13:A:THR:CA	4	9.87
(1,80)	1:8:A:GLN:CA	1:8:A:GLN:CB	1:8:A:GLN:CG	1:8:A:GLN:CD	7	9.87
(1,97)	1:12:A:ASN:N	1:12:A:ASN:CA	1:12:A:ASN:C	1:13:A:THR:N	12	9.86
(1,160)	1:27:A:LEU:N	1:27:A:LEU:CA	1:27:A:LEU:C	1:28:A:PHE:N	2	9.83
(1,218)	1:44:A:ASN:CA	1:44:A:ASN:C	1:45:A:SER:N	1:45:A:SER:CA	12	9.82
(1,268)	1:58:A:ASP:N	1:58:A:ASP:CA	1:58:A:ASP:CB	1:58:A:ASP:CG	12	9.78
(1,238)	1:49:A:LEU:C	1:50:A:LEU:N	1:50:A:LEU:CA	1:50:A:LEU:C	7	9.78
(1,68)	1:4:A:GLU:C	1:5:A:GLN:N	1:5:A:GLN:CA	1:5:A:GLN:C	9	9.76
(1,281)	1:61:A:ILE:CA	1:61:A:ILE:CB	1:61:A:ILE:CG1	1:61:A:ILE:CD1	6	9.74
(1,181)	1:34:A:SER:N	1:34:A:SER:CA	1:34:A:SER:C	1:35:A:ALA:N	4	9.74
(1,58)	1:1:A:MET:C	1:2:A:ALA:N	1:2:A:ALA:CA	1:2:A:ALA:C	9	9.73
(1,251)	1:54:A:ASP:N	1:54:A:ASP:CA	1:54:A:ASP:CB	1:54:A:ASP:CG	1	9.68
(1,187)	1:36:A:VAL:N	1:36:A:VAL:CA	1:36:A:VAL:CB	1:36:A:VAL:CG1	6	9.68
(1,105)	1:14:A:LEU:N	1:14:A:LEU:CA	1:14:A:LEU:C	1:15:A:ASP:N	10	9.68
(1,133)	1:20:A:GLY:C	1:21:A:LYS:N	1:21:A:LYS:CA	1:21:A:LYS:C	10	9.66
(1,85)	1:9:A:SER:N	1:9:A:SER:CA	1:9:A:SER:C	1:10:A:LEU:N	8	9.66
(1,223)	1:46:A:PRO:CA	1:46:A:PRO:C	1:47:A:GLN:N	1:47:A:GLN:CA	2	9.64
(1,118)	1:17:A:ASP:N	1:17:A:ASP:CA	1:17:A:ASP:CB	1:17:A:ASP:CG	11	9.64
(1,111)	1:15:A:ASP:CA	1:15:A:ASP:C	1:16:A:ARG:N	1:16:A:ARG:CA	7	9.64
(1,92)	1:11:A:PHE:N	1:11:A:PHE:CA	1:11:A:PHE:CB	1:11:A:PHE:CG	10	9.64
(1,257)	1:55:A:SER:N	1:55:A:SER:CA	1:55:A:SER:C	1:56:A:ASP:N	12	9.63
(1,325)	1:72:A:LYS:N	1:72:A:LYS:CA	1:72:A:LYS:C	1:73:A:ALA:N	2	9.62
(1,131)	1:20:A:GLY:N	1:20:A:GLY:CA	1:20:A:GLY:C	1:21:A:LYS:N	7	9.61
(1,65)	1:4:A:GLU:CA	1:4:A:GLU:CB	1:4:A:GLU:CG	1:4:A:GLU:CD	7	9.6
(1,34)	1:-8:A:SER:CA	1:-8:A:SER:C	1:-7:A:GLY:N	1:-7:A:GLY:CA	1	9.56
(1,252)	1:54:A:ASP:CA	1:54:A:ASP:CB	1:54:A:ASP:CG	1:54:A:ASP:OD1	6	9.53
(1,245)	1:51:A:VAL:C	1:52:A:GLN:N	1:52:A:GLN:CA	1:52:A:GLN:C	11	9.53
(1,107)	1:14:A:LEU:C	1:15:A:ASP:N	1:15:A:ASP:CA	1:15:A:ASP:C	8	9.52
(1,145)	1:23:A:SER:CA	1:23:A:SER:C	1:24:A:ILE:N	1:24:A:ILE:CA	10	9.51
(1,294)	1:64:A:GLU:C	1:65:A:GLU:N	1:65:A:GLU:CA	1:65:A:GLU:C	1	9.5
(1,223)	1:46:A:PRO:CA	1:46:A:PRO:C	1:47:A:GLN:N	1:47:A:GLN:CA	10	9.5
(1,222)	1:46:A:PRO:N	1:46:A:PRO:CA	1:46:A:PRO:C	1:47:A:GLN:N	2	9.49
(1,116)	1:16:A:ARG:CA	1:16:A:ARG:C	1:17:A:ASP:N	1:17:A:ASP:CA	11	9.49
(1,120)	1:17:A:ASP:N	1:17:A:ASP:CA	1:17:A:ASP:C	1:18:A:GLN:N	9	9.48
(1,134)	1:21:A:LYS:N	1:21:A:LYS:CA	1:21:A:LYS:CB	1:21:A:LYS:CG	12	9.46
(1,292)	1:64:A:GLU:N	1:64:A:GLU:CA	1:64:A:GLU:C	1:65:A:GLU:N	11	9.38
(1,151)	1:24:A:ILE:C	1:25:A:ASN:N	1:25:A:ASN:CA	1:25:A:ASN:C	3	9.37
(1,235)	1:49:A:LEU:CA	1:49:A:LEU:CB	1:49:A:LEU:CG	1:49:A:LEU:CD1	10	9.35
(1,68)	1:4:A:GLU:C	1:5:A:GLN:N	1:5:A:GLN:CA	1:5:A:GLN:C	5	9.32

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,145)	1:23:A:SER:CA	1:23:A:SER:C	1:24:A:ILE:N	1:24:A:ILE:CA	5	9.31
(1,140)	1:22:A:ILE:CA	1:22:A:ILE:CB	1:22:A:ILE:CG1	1:22:A:ILE:CD1	7	9.3
(1,320)	1:71:A:LYS:N	1:71:A:LYS:CA	1:71:A:LYS:C	1:72:A:LYS:N	9	9.27
(1,185)	1:35:A:ALA:CA	1:35:A:ALA:C	1:36:A:VAL:N	1:36:A:VAL:CA	1	9.26
(1,48)	1:-2:A:GLY:CA	1:-2:A:GLY:C	1:-1:A:SER:N	1:-1:A:SER:CA	11	9.25
(1,75)	1:6:A:GLU:CA	1:6:A:GLU:C	1:7:A:LEU:N	1:7:A:LEU:CA	5	9.23
(1,79)	1:7:A:LEU:C	1:8:A:GLN:N	1:8:A:GLN:CA	1:8:A:GLN:C	8	9.22
(1,109)	1:15:A:ASP:CA	1:15:A:ASP:CB	1:15:A:ASP:CG	1:15:A:ASP:OD1	2	9.21
(1,106)	1:14:A:LEU:CA	1:14:A:LEU:C	1:15:A:ASP:N	1:15:A:ASP:CA	2	9.21
(1,108)	1:15:A:ASP:N	1:15:A:ASP:CA	1:15:A:ASP:CB	1:15:A:ASP:CG	11	9.2
(1,251)	1:54:A:ASP:N	1:54:A:ASP:CA	1:54:A:ASP:CB	1:54:A:ASP:CG	10	9.19
(1,242)	1:51:A:VAL:N	1:51:A:VAL:CA	1:51:A:VAL:CB	1:51:A:VAL:CG1	7	9.18
(1,233)	1:48:A:GLU:C	1:49:A:LEU:N	1:49:A:LEU:CA	1:49:A:LEU:C	6	9.12
(1,131)	1:20:A:GLY:N	1:20:A:GLY:CA	1:20:A:GLY:C	1:21:A:LYS:N	8	9.12
(1,204)	1:40:A:GLU:N	1:40:A:GLU:CA	1:40:A:GLU:C	1:41:A:THR:N	7	9.09
(1,111)	1:15:A:ASP:CA	1:15:A:ASP:C	1:16:A:ARG:N	1:16:A:ARG:CA	12	9.07
(1,50)	1:-1:A:SER:N	1:-1:A:SER:CA	1:-1:A:SER:CB	1:-1:A:SER:OG	4	9.07
(1,219)	1:44:A:ASN:C	1:45:A:SER:N	1:45:A:SER:CA	1:45:A:SER:C	12	9.06
(1,211)	1:42:A:ASN:CA	1:42:A:ASN:C	1:43:A:THR:N	1:43:A:THR:CA	8	9.05
(1,212)	1:42:A:ASN:C	1:43:A:THR:N	1:43:A:THR:CA	1:43:A:THR:C	2	9.03
(1,137)	1:21:A:LYS:CA	1:21:A:LYS:C	1:22:A:ILE:N	1:22:A:ILE:CA	2	9.03
(1,134)	1:21:A:LYS:N	1:21:A:LYS:CA	1:21:A:LYS:CB	1:21:A:LYS:CG	10	9.03
(1,225)	1:47:A:GLN:N	1:47:A:GLN:CA	1:47:A:GLN:CB	1:47:A:GLN:CG	5	9.01
(1,309)	1:68:A:LYS:N	1:68:A:LYS:CA	1:68:A:LYS:C	1:69:A:ALA:N	6	9.0
(1,71)	1:5:A:GLN:CA	1:5:A:GLN:C	1:6:A:GLU:N	1:6:A:GLU:CA	11	8.99
(1,78)	1:7:A:LEU:CA	1:7:A:LEU:C	1:8:A:GLN:N	1:8:A:GLN:CA	9	8.98
(1,180)	1:33:A:LEU:C	1:34:A:SER:N	1:34:A:SER:CA	1:34:A:SER:C	1	8.96
(1,292)	1:64:A:GLU:N	1:64:A:GLU:CA	1:64:A:GLU:C	1:65:A:GLU:N	1	8.94
(1,226)	1:47:A:GLN:N	1:47:A:GLN:CA	1:47:A:GLN:C	1:48:A:GLU:N	2	8.93
(1,217)	1:44:A:ASN:N	1:44:A:ASN:CA	1:44:A:ASN:C	1:45:A:SER:N	11	8.93
(1,86)	1:9:A:SER:CA	1:9:A:SER:C	1:10:A:LEU:N	1:10:A:LEU:CA	9	8.93
(1,164)	1:28:A:PHE:N	1:28:A:PHE:CA	1:28:A:PHE:C	1:29:A:LEU:N	5	8.92
(1,210)	1:42:A:ASN:N	1:42:A:ASN:CA	1:42:A:ASN:C	1:43:A:THR:N	8	8.9
(1,68)	1:4:A:GLU:C	1:5:A:GLN:N	1:5:A:GLN:CA	1:5:A:GLN:C	1	8.9
(1,328)	1:73:A:ALA:CA	1:73:A:ALA:C	1:74:A:SER:N	1:74:A:SER:CA	11	8.89
(1,273)	1:59:A:GLY:N	1:59:A:GLY:CA	1:59:A:GLY:C	1:60:A:SER:N	10	8.87
(1,220)	1:45:A:SER:N	1:45:A:SER:CA	1:45:A:SER:CB	1:45:A:SER:OG	9	8.87
(1,152)	1:25:A:ASN:N	1:25:A:ASN:CA	1:25:A:ASN:C	1:26:A:GLU:N	3	8.86
(1,183)	1:34:A:SER:C	1:35:A:ALA:N	1:35:A:ALA:CA	1:35:A:ALA:C	5	8.85
(1,77)	1:7:A:LEU:N	1:7:A:LEU:CA	1:7:A:LEU:C	1:8:A:GLN:N	2	8.85
(1,202)	1:39:A:SER:C	1:40:A:GLU:N	1:40:A:GLU:CA	1:40:A:GLU:C	6	8.84
(1,21)	1:-12:A:HIS:CA	1:-12:A:HIS:C	1:-11:A:HIS:N	1:-11:A:HIS:CA	4	8.84
(1,336)	1:76:A:LEU:CA	1:76:A:LEU:C	1:77:A:THR:N	1:77:A:THR:CA	10	8.83
(1,182)	1:34:A:SER:CA	1:34:A:SER:C	1:35:A:ALA:N	1:35:A:ALA:CA	7	8.81
(1,251)	1:54:A:ASP:N	1:54:A:ASP:CA	1:54:A:ASP:CB	1:54:A:ASP:CG	6	8.8
(1,323)	1:72:A:LYS:N	1:72:A:LYS:CA	1:72:A:LYS:CB	1:72:A:LYS:CG	7	8.77
(1,88)	1:10:A:LEU:CA	1:10:A:LEU:CB	1:10:A:LEU:CG	1:10:A:LEU:CD1	8	8.77
(1,244)	1:51:A:VAL:CA	1:51:A:VAL:C	1:52:A:GLN:N	1:52:A:GLN:CA	6	8.76
(1,284)	1:61:A:ILE:C	1:62:A:THR:N	1:62:A:THR:CA	1:62:A:THR:C	3	8.74
(1,87)	1:9:A:SER:C	1:10:A:LEU:N	1:10:A:LEU:CA	1:10:A:LEU:C	8	8.74
(1,260)	1:56:A:ASP:N	1:56:A:ASP:CA	1:56:A:ASP:CB	1:56:A:ASP:CG	4	8.72

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,231)	1:48:A:GLU:N	1:48:A:GLU:CA	1:48:A:GLU:C	1:49:A:LEU:N	2	8.71
(1,263)	1:56:A:ASP:CA	1:56:A:ASP:C	1:57:A:GLN:N	1:57:A:GLN:CA	6	8.69
(1,179)	1:33:A:LEU:CA	1:33:A:LEU:C	1:34:A:SER:N	1:34:A:SER:CA	4	8.69
(1,107)	1:14:A:LEU:C	1:15:A:ASP:N	1:15:A:ASP:CA	1:15:A:ASP:C	3	8.66
(1,303)	1:66:A:LEU:CA	1:66:A:LEU:C	1:67:A:LYS:N	1:67:A:LYS:CA	4	8.65
(1,173)	1:31:A:PRO:CA	1:31:A:PRO:C	1:32:A:GLY:N	1:32:A:GLY:CA	9	8.65
(1,138)	1:21:A:LYS:C	1:22:A:ILE:N	1:22:A:ILE:CA	1:22:A:ILE:C	10	8.65
(1,120)	1:17:A:ASP:N	1:17:A:ASP:CA	1:17:A:ASP:C	1:18:A:GLN:N	10	8.64
(1,160)	1:27:A:LEU:N	1:27:A:LEU:CA	1:27:A:LEU:C	1:28:A:PHE:N	11	8.63
(1,268)	1:58:A:ASP:N	1:58:A:ASP:CA	1:58:A:ASP:CB	1:58:A:ASP:CG	6	8.58
(1,277)	1:60:A:SER:N	1:60:A:SER:CA	1:60:A:SER:C	1:61:A:ILE:N	12	8.57
(1,230)	1:48:A:GLU:CA	1:48:A:GLU:CB	1:48:A:GLU:CG	1:48:A:GLU:CD	7	8.57
(1,205)	1:40:A:GLU:CA	1:40:A:GLU:C	1:41:A:THR:N	1:41:A:THR:CA	4	8.56
(1,185)	1:35:A:ALA:CA	1:35:A:ALA:C	1:36:A:VAL:N	1:36:A:VAL:CA	8	8.56
(1,81)	1:8:A:GLN:N	1:8:A:GLN:CA	1:8:A:GLN:C	1:9:A:SER:N	4	8.56
(1,214)	1:43:A:THR:N	1:43:A:THR:CA	1:43:A:THR:C	1:44:A:ASN:N	6	8.55
(1,321)	1:71:A:LYS:CA	1:71:A:LYS:C	1:72:A:LYS:N	1:72:A:LYS:CA	5	8.54
(1,18)	1:12:A:HIS:N	1:12:A:HIS:CA	1:12:A:HIS:CB	1:12:A:HIS:CG	5	8.53
(1,283)	1:61:A:ILE:CA	1:61:A:ILE:C	1:62:A:THR:N	1:62:A:THR:CA	4	8.5
(1,62)	1:3:A:THR:CA	1:3:A:THR:C	1:4:A:GLU:N	1:4:A:GLU:CA	2	8.5
(1,251)	1:54:A:ASP:N	1:54:A:ASP:CA	1:54:A:ASP:CB	1:54:A:ASP:CG	2	8.49
(1,284)	1:61:A:ILE:C	1:62:A:THR:N	1:62:A:THR:CA	1:62:A:THR:C	10	8.48
(1,281)	1:61:A:ILE:CA	1:61:A:ILE:CB	1:61:A:ILE:CG1	1:61:A:ILE:CD1	4	8.48
(1,283)	1:61:A:ILE:CA	1:61:A:ILE:C	1:62:A:THR:N	1:62:A:THR:CA	3	8.47
(1,246)	1:52:A:GLN:N	1:52:A:GLN:CA	1:52:A:GLN:C	1:53:A:TYR:N	8	8.46
(1,326)	1:72:A:LYS:CA	1:72:A:LYS:C	1:73:A:ALA:N	1:73:A:ALA:CA	9	8.45
(1,251)	1:54:A:ASP:N	1:54:A:ASP:CA	1:54:A:ASP:CB	1:54:A:ASP:CG	4	8.45
(1,210)	1:42:A:ASN:N	1:42:A:ASN:CA	1:42:A:ASN:C	1:43:A:THR:N	1	8.44
(1,286)	1:62:A:THR:CA	1:62:A:THR:C	1:63:A:PHE:N	1:63:A:PHE:CA	6	8.42
(1,330)	1:74:A:SER:CA	1:74:A:SER:C	1:75:A:ASN:N	1:75:A:ASN:CA	5	8.41
(1,202)	1:39:A:SER:C	1:40:A:GLU:N	1:40:A:GLU:CA	1:40:A:GLU:C	10	8.39
(1,135)	1:21:A:LYS:CA	1:21:A:LYS:CB	1:21:A:LYS:CG	1:21:A:LYS:CD	8	8.39
(1,62)	1:3:A:THR:CA	1:3:A:THR:C	1:4:A:GLU:N	1:4:A:GLU:CA	9	8.38
(1,156)	1:26:A:GLU:CA	1:26:A:GLU:CB	1:26:A:GLU:CG	1:26:A:GLU:CD	5	8.36
(1,142)	1:22:A:ILE:CA	1:22:A:ILE:C	1:23:A:SER:N	1:23:A:SER:CA	1	8.36
(1,262)	1:56:A:ASP:N	1:56:A:ASP:CA	1:56:A:ASP:C	1:57:A:GLN:N	5	8.35
(1,223)	1:46:A:PRO:CA	1:46:A:PRO:C	1:47:A:GLN:N	1:47:A:GLN:CA	9	8.33
(1,189)	1:36:A:VAL:CA	1:36:A:VAL:C	1:37:A:ILE:N	1:37:A:ILE:CA	8	8.33
(1,61)	1:3:A:THR:N	1:3:A:THR:CA	1:3:A:THR:C	1:4:A:GLU:N	5	8.31
(1,155)	1:26:A:GLU:N	1:26:A:GLU:CA	1:26:A:GLU:CB	1:26:A:GLU:CG	6	8.29
(1,96)	1:11:A:PHE:C	1:12:A:ASN:N	1:12:A:ASN:CA	1:12:A:ASN:C	6	8.28
(1,87)	1:9:A:SER:C	1:10:A:LEU:N	1:10:A:LEU:CA	1:10:A:LEU:C	6	8.28
(1,179)	1:33:A:LEU:CA	1:33:A:LEU:C	1:34:A:SER:N	1:34:A:SER:CA	9	8.26
(1,282)	1:61:A:ILE:N	1:61:A:ILE:CA	1:61:A:ILE:C	1:62:A:THR:N	1	8.23
(1,71)	1:5:A:GLN:CA	1:5:A:GLN:C	1:6:A:GLU:N	1:6:A:GLU:CA	4	8.23
(1,65)	1:4:A:GLU:CA	1:4:A:GLU:CB	1:4:A:GLU:CG	1:4:A:GLU:CD	10	8.23
(1,299)	1:65:A:GLU:C	1:66:A:LEU:N	1:66:A:LEU:CA	1:66:A:LEU:C	8	8.19
(1,278)	1:60:A:SER:CA	1:60:A:SER:C	1:61:A:ILE:N	1:61:A:ILE:CA	5	8.19
(1,310)	1:68:A:LYS:CA	1:68:A:LYS:C	1:69:A:ALA:N	1:69:A:ALA:CA	3	8.18
(1,274)	1:59:A:GLY:CA	1:59:A:GLY:C	1:60:A:SER:N	1:60:A:SER:CA	3	8.18
(1,121)	1:17:A:ASP:CA	1:17:A:ASP:C	1:18:A:GLN:N	1:18:A:GLN:CA	7	8.18

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,89)	1:10:A:LEU:N	1:10:A:LEU:CA	1:10:A:LEU:C	1:11:A:PHE:N	2	8.18
(1,226)	1:47:A:GLN:N	1:47:A:GLN:CA	1:47:A:GLN:C	1:48:A:GLU:N	4	8.14
(1,291)	1:63:A:PHE:C	1:64:A:GLU:N	1:64:A:GLU:CA	1:64:A:GLU:C	9	8.13
(1,17)	1:-13:A:HIS:C	1:-12:A:HIS:N	1:-12:A:HIS:CA	1:-12:A:HIS:C	6	8.13
(1,181)	1:34:A:SER:N	1:34:A:SER:CA	1:34:A:SER:C	1:35:A:ALA:N	9	8.12
(1,251)	1:54:A:ASP:N	1:54:A:ASP:CA	1:54:A:ASP:CB	1:54:A:ASP:CG	3	8.11
(1,212)	1:42:A:ASN:C	1:43:A:THR:N	1:43:A:THR:CA	1:43:A:THR:C	1	8.08
(1,96)	1:11:A:PHE:C	1:12:A:ASN:N	1:12:A:ASN:CA	1:12:A:ASN:C	11	8.05
(1,231)	1:48:A:GLU:N	1:48:A:GLU:CA	1:48:A:GLU:C	1:49:A:LEU:N	5	8.04
(1,63)	1:3:A:THR:C	1:4:A:GLU:N	1:4:A:GLU:CA	1:4:A:GLU:C	8	8.04
(1,227)	1:47:A:GLN:CA	1:47:A:GLN:C	1:48:A:GLU:N	1:48:A:GLU:CA	7	8.03
(1,59)	1:2:A:ALA:CA	1:2:A:ALA:C	1:3:A:THR:N	1:3:A:THR:CA	6	8.03
(1,312)	1:69:A:ALA:N	1:69:A:ALA:CA	1:69:A:ALA:C	1:70:A:VAL:N	9	8.01
(1,214)	1:43:A:THR:N	1:43:A:THR:CA	1:43:A:THR:C	1:44:A:ASN:N	3	8.01
(1,239)	1:50:A:LEU:N	1:50:A:LEU:CA	1:50:A:LEU:C	1:51:A:VAL:N	7	8.0
(1,328)	1:73:A:ALA:CA	1:73:A:ALA:C	1:74:A:SER:N	1:74:A:SER:CA	3	7.98
(1,283)	1:61:A:ILE:CA	1:61:A:ILE:C	1:62:A:THR:N	1:62:A:THR:CA	7	7.97
(1,258)	1:55:A:SER:CA	1:55:A:SER:C	1:56:A:ASP:N	1:56:A:ASP:CA	1	7.97
(1,153)	1:25:A:ASN:CA	1:25:A:ASN:C	1:26:A:GLU:N	1:26:A:GLU:CA	5	7.97
(1,336)	1:76:A:LEU:CA	1:76:A:LEU:C	1:77:A:THR:N	1:77:A:THR:CA	2	7.96
(1,282)	1:61:A:ILE:N	1:61:A:ILE:CA	1:61:A:ILE:C	1:62:A:THR:N	6	7.96
(1,135)	1:21:A:LYS:CA	1:21:A:LYS:CB	1:21:A:LYS:CG	1:21:A:LYS:CD	6	7.96
(1,92)	1:11:A:PHE:N	1:11:A:PHE:CA	1:11:A:PHE:CB	1:11:A:PHE:CG	5	7.96
(1,300)	1:66:A:LEU:N	1:66:A:LEU:CA	1:66:A:LEU:CB	1:66:A:LEU:CG	6	7.95
(1,125)	1:18:A:GLN:C	1:19:A:ASP:N	1:19:A:ASP:CA	1:19:A:ASP:C	5	7.95
(1,75)	1:6:A:GLU:CA	1:6:A:GLU:C	1:7:A:LEU:N	1:7:A:LEU:CA	12	7.95
(1,134)	1:21:A:LYS:N	1:21:A:LYS:CA	1:21:A:LYS:CB	1:21:A:LYS:CG	9	7.94
(1,182)	1:34:A:SER:CA	1:34:A:SER:C	1:35:A:ALA:N	1:35:A:ALA:CA	1	7.92
(1,325)	1:72:A:LYS:N	1:72:A:LYS:CA	1:72:A:LYS:C	1:73:A:ALA:N	4	7.9
(1,73)	1:6:A:GLU:N	1:6:A:GLU:CA	1:6:A:GLU:CB	1:6:A:GLU:CG	8	7.86
(1,66)	1:4:A:GLU:N	1:4:A:GLU:CA	1:4:A:GLU:C	1:5:A:GLN:N	1	7.86
(1,37)	1:-7:A:GLY:C	1:-6:A:LEU:N	1:-6:A:LEU:CA	1:-6:A:LEU:C	8	7.85
(1,279)	1:60:A:SER:C	1:61:A:ILE:N	1:61:A:ILE:CA	1:61:A:ILE:C	5	7.84
(1,200)	1:39:A:SER:N	1:39:A:SER:CA	1:39:A:SER:C	1:40:A:GLU:N	9	7.84
(1,133)	1:20:A:GLY:C	1:21:A:LYS:N	1:21:A:LYS:CA	1:21:A:LYS:C	8	7.84
(1,170)	1:29:A:LEU:C	1:30:A:SER:N	1:30:A:SER:CA	1:30:A:SER:C	10	7.83
(1,38)	1:-6:A:LEU:CA	1:-6:A:LEU:C	1:-5:A:VAL:N	1:-5:A:VAL:CA	11	7.82
(1,35)	1:-7:A:GLY:N	1:-7:A:GLY:CA	1:-7:A:GLY:C	1:-6:A:LEU:N	7	7.82
(1,189)	1:36:A:VAL:CA	1:36:A:VAL:C	1:37:A:ILE:N	1:37:A:ILE:CA	2	7.77
(1,214)	1:43:A:THR:N	1:43:A:THR:CA	1:43:A:THR:C	1:44:A:ASN:N	9	7.74
(1,253)	1:54:A:ASP:N	1:54:A:ASP:CA	1:54:A:ASP:C	1:55:A:SER:N	11	7.73
(1,240)	1:50:A:LEU:CA	1:50:A:LEU:C	1:51:A:VAL:N	1:51:A:VAL:CA	3	7.72
(1,102)	1:13:A:THR:CA	1:13:A:THR:C	1:14:A:LEU:N	1:14:A:LEU:CA	3	7.72
(1,87)	1:9:A:SER:C	1:10:A:LEU:N	1:10:A:LEU:CA	1:10:A:LEU:C	9	7.72
(1,182)	1:34:A:SER:CA	1:34:A:SER:C	1:35:A:ALA:N	1:35:A:ALA:CA	2	7.71
(1,295)	1:65:A:GLU:N	1:65:A:GLU:CA	1:65:A:GLU:CB	1:65:A:GLU:CG	5	7.7
(1,215)	1:43:A:THR:CA	1:43:A:THR:C	1:44:A:ASN:N	1:44:A:ASN:CA	6	7.7
(1,142)	1:22:A:ILE:CA	1:22:A:ILE:C	1:23:A:SER:N	1:23:A:SER:CA	11	7.7
(1,322)	1:71:A:LYS:C	1:72:A:LYS:N	1:72:A:LYS:CA	1:72:A:LYS:C	9	7.68
(1,266)	1:57:A:GLN:CA	1:57:A:GLN:C	1:58:A:ASP:N	1:58:A:ASP:CA	5	7.66
(1,155)	1:26:A:GLU:N	1:26:A:GLU:CA	1:26:A:GLU:CB	1:26:A:GLU:CG	2	7.65

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,232)	1:48:A:GLU:CA	1:48:A:GLU:C	1:49:A:LEU:N	1:49:A:LEU:CA	12	7.63
(1,153)	1:25:A:ASN:CA	1:25:A:ASN:C	1:26:A:GLU:N	1:26:A:GLU:CA	6	7.62
(1,79)	1:7:A:LEU:C	1:8:A:GLN:N	1:8:A:GLN:CA	1:8:A:GLN:C	3	7.62
(1,56)	1:1:A:MET:N	1:1:A:MET:CA	1:1:A:MET:C	1:2:A:ALA:N	6	7.62
(1,286)	1:62:A:THR:CA	1:62:A:THR:C	1:63:A:PHE:N	1:63:A:PHE:CA	11	7.61
(1,254)	1:54:A:ASP:CA	1:54:A:ASP:C	1:55:A:SER:N	1:55:A:SER:CA	4	7.61
(1,188)	1:36:A:VAL:N	1:36:A:VAL:CA	1:36:A:VAL:C	1:37:A:ILE:N	8	7.61
(1,66)	1:4:A:GLU:N	1:4:A:GLU:CA	1:4:A:GLU:C	1:5:A:GLN:N	9	7.59
(1,293)	1:64:A:GLU:CA	1:64:A:GLU:C	1:65:A:GLU:N	1:65:A:GLU:CA	12	7.58
(1,223)	1:46:A:PRO:CA	1:46:A:PRO:C	1:47:A:GLN:N	1:47:A:GLN:CA	8	7.58
(1,211)	1:42:A:ASN:CA	1:42:A:ASN:C	1:43:A:THR:N	1:43:A:THR:CA	6	7.58
(1,139)	1:22:A:ILE:N	1:22:A:ILE:CA	1:22:A:ILE:CB	1:22:A:ILE:CG1	6	7.58
(1,250)	1:53:A:TYR:C	1:54:A:ASP:N	1:54:A:ASP:CA	1:54:A:ASP:C	11	7.57
(1,155)	1:26:A:GLU:N	1:26:A:GLU:CA	1:26:A:GLU:CB	1:26:A:GLU:CG	4	7.57
(1,294)	1:64:A:GLU:C	1:65:A:GLU:N	1:65:A:GLU:CA	1:65:A:GLU:C	6	7.56
(1,308)	1:67:A:LYS:C	1:68:A:LYS:N	1:68:A:LYS:CA	1:68:A:LYS:C	9	7.54
(1,231)	1:48:A:GLU:N	1:48:A:GLU:CA	1:48:A:GLU:C	1:49:A:LEU:N	12	7.54
(1,191)	1:37:A:ILE:N	1:37:A:ILE:CA	1:37:A:ILE:CB	1:37:A:ILE:CG1	5	7.54
(1,121)	1:17:A:ASP:CA	1:17:A:ASP:C	1:18:A:GLN:N	1:18:A:GLN:CA	11	7.53
(1,101)	1:13:A:THR:N	1:13:A:THR:CA	1:13:A:THR:C	1:14:A:LEU:N	1	7.52
(1,85)	1:9:A:SER:N	1:9:A:SER:CA	1:9:A:SER:C	1:10:A:LEU:N	3	7.52
(1,179)	1:33:A:LEU:CA	1:33:A:LEU:C	1:34:A:SER:N	1:34:A:SER:CA	1	7.5
(1,76)	1:6:A:GLU:C	1:7:A:LEU:N	1:7:A:LEU:CA	1:7:A:LEU:C	2	7.49
(1,178)	1:33:A:LEU:N	1:33:A:LEU:CA	1:33:A:LEU:C	1:34:A:SER:N	11	7.48
(1,88)	1:10:A:LEU:CA	1:10:A:LEU:CB	1:10:A:LEU:CG	1:10:A:LEU:CD1	7	7.48
(1,61)	1:3:A:THR:N	1:3:A:THR:CA	1:3:A:THR:C	1:4:A:GLU:N	3	7.47
(1,60)	1:2:A:ALA:C	1:3:A:THR:N	1:3:A:THR:CA	1:3:A:THR:C	2	7.47
(1,312)	1:69:A:ALA:N	1:69:A:ALA:CA	1:69:A:ALA:C	1:70:A:VAL:N	10	7.46
(1,184)	1:35:A:ALA:N	1:35:A:ALA:CA	1:35:A:ALA:C	1:36:A:VAL:N	3	7.46
(1,303)	1:66:A:LEU:CA	1:66:A:LEU:C	1:67:A:LYS:N	1:67:A:LYS:CA	6	7.45
(1,290)	1:63:A:PHE:CA	1:63:A:PHE:C	1:64:A:GLU:N	1:64:A:GLU:CA	12	7.45
(1,111)	1:15:A:ASP:CA	1:15:A:ASP:C	1:16:A:ARG:N	1:16:A:ARG:CA	6	7.45
(1,3)	1:-17:A:SER:CA	1:-17:A:SER:C	1:-16:A:SER:N	1:-16:A:SER:CA	8	7.44
(1,282)	1:61:A:ILE:N	1:61:A:ILE:CA	1:61:A:ILE:C	1:62:A:THR:N	9	7.43
(1,277)	1:60:A:SER:N	1:60:A:SER:CA	1:60:A:SER:C	1:61:A:ILE:N	4	7.43
(1,259)	1:55:A:SER:C	1:56:A:ASP:N	1:56:A:ASP:CA	1:56:A:ASP:C	8	7.43
(1,169)	1:29:A:LEU:CA	1:29:A:LEU:C	1:30:A:SER:N	1:30:A:SER:CA	1	7.42
(1,205)	1:40:A:GLU:CA	1:40:A:GLU:C	1:41:A:THR:N	1:41:A:THR:CA	1	7.41
(1,172)	1:30:A:SER:CA	1:30:A:SER:C	1:31:A:PRO:N	1:31:A:PRO:CA	4	7.4
(1,153)	1:25:A:ASN:CA	1:25:A:ASN:C	1:26:A:GLU:N	1:26:A:GLU:CA	12	7.4
(1,296)	1:65:A:GLU:CA	1:65:A:GLU:CB	1:65:A:GLU:CG	1:65:A:GLU:CD	8	7.39
(1,168)	1:29:A:LEU:N	1:29:A:LEU:CA	1:29:A:LEU:C	1:30:A:SER:N	2	7.39
(1,268)	1:58:A:ASP:N	1:58:A:ASP:CA	1:58:A:ASP:CB	1:58:A:ASP:CG	8	7.38
(1,283)	1:61:A:ILE:CA	1:61:A:ILE:C	1:62:A:THR:N	1:62:A:THR:CA	1	7.37
(1,266)	1:57:A:GLN:CA	1:57:A:GLN:C	1:58:A:ASP:N	1:58:A:ASP:CA	4	7.37
(1,200)	1:39:A:SER:N	1:39:A:SER:CA	1:39:A:SER:C	1:40:A:GLU:N	8	7.37
(1,236)	1:49:A:LEU:N	1:49:A:LEU:CA	1:49:A:LEU:C	1:50:A:LEU:N	2	7.36
(1,160)	1:27:A:LEU:N	1:27:A:LEU:CA	1:27:A:LEU:C	1:28:A:PHE:N	4	7.35
(1,223)	1:46:A:PRO:CA	1:46:A:PRO:C	1:47:A:GLN:N	1:47:A:GLN:CA	3	7.32
(1,80)	1:8:A:GLN:CA	1:8:A:GLN:CB	1:8:A:GLN:CG	1:8:A:GLN:CD	4	7.29
(1,152)	1:25:A:ASN:N	1:25:A:ASN:CA	1:25:A:ASN:C	1:26:A:GLU:N	8	7.27

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,183)	1:34:A:SER:C	1:35:A:ALA:N	1:35:A:ALA:CA	1:35:A:ALA:C	6	7.26
(1,71)	1:5:A:GLN:CA	1:5:A:GLN:C	1:6:A:GLU:N	1:6:A:GLU:CA	6	7.26
(1,306)	1:67:A:LYS:N	1:67:A:LYS:CA	1:67:A:LYS:C	1:68:A:LYS:N	8	7.25
(1,183)	1:34:A:SER:C	1:35:A:ALA:N	1:35:A:ALA:CA	1:35:A:ALA:C	3	7.22
(1,222)	1:46:A:PRO:N	1:46:A:PRO:CA	1:46:A:PRO:C	1:47:A:GLN:N	12	7.21
(1,110)	1:15:A:ASP:N	1:15:A:ASP:CA	1:15:A:ASP:C	1:16:A:ARG:N	5	7.21
(1,327)	1:72:A:LYS:C	1:73:A:ALA:N	1:73:A:ALA:CA	1:73:A:ALA:C	4	7.2
(1,286)	1:62:A:THR:CA	1:62:A:THR:C	1:63:A:PHE:N	1:63:A:PHE:CA	5	7.2
(1,5)	1:-16:A:SER:N	1:-16:A:SER:CA	1:-16:A:SER:C	1:-15:A:HIS:N	3	7.19
(1,188)	1:36:A:VAL:N	1:36:A:VAL:CA	1:36:A:VAL:C	1:37:A:ILE:N	9	7.18
(1,328)	1:73:A:ALA:CA	1:73:A:ALA:C	1:74:A:SER:N	1:74:A:SER:CA	12	7.17
(1,315)	1:70:A:VAL:N	1:70:A:VAL:CA	1:70:A:VAL:CB	1:70:A:VAL:CG1	12	7.15
(1,152)	1:25:A:ASN:N	1:25:A:ASN:CA	1:25:A:ASN:C	1:26:A:GLU:N	9	7.15
(1,71)	1:5:A:GLN:CA	1:5:A:GLN:C	1:6:A:GLU:N	1:6:A:GLU:CA	12	7.15
(1,65)	1:4:A:GLU:CA	1:4:A:GLU:CB	1:4:A:GLU:CG	1:4:A:GLU:CD	9	7.15
(1,325)	1:72:A:LYS:N	1:72:A:LYS:CA	1:72:A:LYS:C	1:73:A:ALA:N	1	7.14
(1,89)	1:10:A:LEU:N	1:10:A:LEU:CA	1:10:A:LEU:C	1:11:A:PHE:N	1	7.13
(1,116)	1:16:A:ARG:CA	1:16:A:ARG:C	1:17:A:ASP:N	1:17:A:ASP:CA	8	7.11
(1,51)	1:-1:A:SER:N	1:-1:A:SER:CA	1:-1:A:SER:C	1:0:A:HIS:N	11	7.1
(1,134)	1:21:A:LYS:N	1:21:A:LYS:CA	1:21:A:LYS:CB	1:21:A:LYS:CG	3	7.06
(1,300)	1:66:A:LEU:N	1:66:A:LEU:CA	1:66:A:LEU:CB	1:66:A:LEU:CG	10	7.03
(1,38)	1:-6:A:LEU:CA	1:-6:A:LEU:C	1:-5:A:VAL:N	1:-5:A:VAL:CA	1	7.03
(1,323)	1:72:A:LYS:N	1:72:A:LYS:CA	1:72:A:LYS:CB	1:72:A:LYS:CG	9	7.02
(1,279)	1:60:A:SER:C	1:61:A:ILE:N	1:61:A:ILE:CA	1:61:A:ILE:C	10	7.02
(1,78)	1:7:A:LEU:CA	1:7:A:LEU:C	1:8:A:GLN:N	1:8:A:GLN:CA	6	7.02
(1,54)	1:0:A:HIS:CA	1:0:A:HIS:C	1:1:A:MET:N	1:1:A:MET:CA	6	7.02
(1,56)	1:1:A:MET:N	1:1:A:MET:CA	1:1:A:MET:C	1:2:A:ALA:N	10	6.99
(1,122)	1:17:A:ASP:C	1:18:A:GLN:N	1:18:A:GLN:CA	1:18:A:GLN:C	4	6.98
(1,95)	1:11:A:PHE:CA	1:11:A:PHE:C	1:12:A:ASN:N	1:12:A:ASN:CA	3	6.98
(1,86)	1:9:A:SER:CA	1:9:A:SER:C	1:10:A:LEU:N	1:10:A:LEU:CA	10	6.98
(1,65)	1:4:A:GLU:CA	1:4:A:GLU:CB	1:4:A:GLU:CG	1:4:A:GLU:CD	4	6.97
(1,310)	1:68:A:LYS:CA	1:68:A:LYS:C	1:69:A:ALA:N	1:69:A:ALA:CA	12	6.96
(1,97)	1:12:A:ASN:N	1:12:A:ASN:CA	1:12:A:ASN:C	1:13:A:THR:N	3	6.96
(1,64)	1:4:A:GLU:N	1:4:A:GLU:CA	1:4:A:GLU:CB	1:4:A:GLU:CG	2	6.96
(1,59)	1:2:A:ALA:CA	1:2:A:ALA:C	1:3:A:THR:N	1:3:A:THR:CA	5	6.95
(1,14)	1:-14:A:HIS:CA	1:-14:A:HIS:C	1:-13:A:HIS:N	1:-13:A:HIS:CA	6	6.95
(1,310)	1:68:A:LYS:CA	1:68:A:LYS:C	1:69:A:ALA:N	1:69:A:ALA:CA	8	6.92
(1,165)	1:28:A:PHE:CA	1:28:A:PHE:C	1:29:A:LEU:N	1:29:A:LEU:CA	3	6.92
(1,267)	1:57:A:GLN:C	1:58:A:ASP:N	1:58:A:ASP:CA	1:58:A:ASP:C	9	6.91
(1,228)	1:47:A:GLN:C	1:48:A:GLU:N	1:48:A:GLU:CA	1:48:A:GLU:C	4	6.9
(1,78)	1:7:A:LEU:CA	1:7:A:LEU:C	1:8:A:GLN:N	1:8:A:GLN:CA	4	6.9
(1,47)	1:-2:A:GLY:N	1:-2:A:GLY:CA	1:-2:A:GLY:C	1:-1:A:SER:N	11	6.9
(1,3)	1:-17:A:SER:CA	1:-17:A:SER:C	1:-16:A:SER:N	1:-16:A:SER:CA	2	6.9
(1,116)	1:16:A:ARG:CA	1:16:A:ARG:C	1:17:A:ASP:N	1:17:A:ASP:CA	7	6.87
(1,90)	1:10:A:LEU:CA	1:10:A:LEU:C	1:11:A:PHE:N	1:11:A:PHE:CA	1	6.87
(1,280)	1:61:A:ILE:N	1:61:A:ILE:CA	1:61:A:ILE:CB	1:61:A:ILE:CG1	12	6.86
(1,204)	1:40:A:GLU:N	1:40:A:GLU:CA	1:40:A:GLU:C	1:41:A:THR:N	10	6.86
(1,125)	1:18:A:GLN:C	1:19:A:ASP:N	1:19:A:ASP:CA	1:19:A:ASP:C	12	6.85
(1,318)	1:70:A:VAL:C	1:71:A:LYS:N	1:71:A:LYS:CA	1:71:A:LYS:C	3	6.84
(1,91)	1:10:A:LEU:C	1:11:A:PHE:N	1:11:A:PHE:CA	1:11:A:PHE:C	5	6.84
(1,81)	1:8:A:GLN:N	1:8:A:GLN:CA	1:8:A:GLN:C	1:9:A:SER:N	1	6.84

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,189)	1:36:A:VAL:CA	1:36:A:VAL:C	1:37:A:ILE:N	1:37:A:ILE:CA	10	6.83
(1,278)	1:60:A:SER:CA	1:60:A:SER:C	1:61:A:ILE:N	1:61:A:ILE:CA	4	6.82
(1,134)	1:21:A:LYS:N	1:21:A:LYS:CA	1:21:A:LYS:CB	1:21:A:LYS:CG	11	6.82
(1,321)	1:71:A:LYS:CA	1:71:A:LYS:C	1:72:A:LYS:N	1:72:A:LYS:CA	4	6.78
(1,71)	1:5:A:GLN:CA	1:5:A:GLN:C	1:6:A:GLU:N	1:6:A:GLU:CA	5	6.77
(1,290)	1:63:A:PHE:CA	1:63:A:PHE:C	1:64:A:GLU:N	1:64:A:GLU:CA	9	6.76
(1,186)	1:35:A:ALA:C	1:36:A:VAL:N	1:36:A:VAL:CA	1:36:A:VAL:C	5	6.76
(1,114)	1:16:A:ARG:CA	1:16:A:ARG:CB	1:16:A:ARG:CG	1:16:A:ARG:CD	10	6.74
(1,225)	1:47:A:GLN:N	1:47:A:GLN:CA	1:47:A:GLN:CB	1:47:A:GLN:CG	3	6.73
(1,192)	1:37:A:ILE:CA	1:37:A:ILE:CB	1:37:A:ILE:CG1	1:37:A:ILE:CD1	10	6.73
(1,116)	1:16:A:ARG:CA	1:16:A:ARG:C	1:17:A:ASP:N	1:17:A:ASP:CA	12	6.73
(1,130)	1:19:A:ASP:C	1:20:A:GLY:N	1:20:A:GLY:CA	1:20:A:GLY:C	7	6.71
(1,132)	1:20:A:GLY:CA	1:20:A:GLY:C	1:21:A:LYS:N	1:21:A:LYS:CA	6	6.7
(1,41)	1:5:A:VAL:CA	1:5:A:VAL:C	1:4:A:PRO:N	1:4:A:PRO:CA	12	6.7
(1,234)	1:49:A:LEU:N	1:49:A:LEU:CA	1:49:A:LEU:CB	1:49:A:LEU:CG	5	6.69
(1,98)	1:12:A:ASN:CA	1:12:A:ASN:C	1:13:A:THR:N	1:13:A:THR:CA	2	6.69
(1,283)	1:61:A:ILE:CA	1:61:A:ILE:C	1:62:A:THR:N	1:62:A:THR:CA	2	6.68
(1,100)	1:13:A:THR:N	1:13:A:THR:CA	1:13:A:THR:CB	1:13:A:THR:OG1	10	6.68
(1,282)	1:61:A:ILE:N	1:61:A:ILE:CA	1:61:A:ILE:C	1:62:A:THR:N	7	6.67
(1,82)	1:8:A:GLN:CA	1:8:A:GLN:C	1:9:A:SER:N	1:9:A:SER:CA	5	6.66
(1,28)	1:10:A:HIS:CA	1:10:A:HIS:C	1:9:A:SER:N	1:9:A:SER:CA	11	6.66
(1,311)	1:68:A:LYS:C	1:69:A:ALA:N	1:69:A:ALA:CA	1:69:A:ALA:C	6	6.65
(1,202)	1:39:A:SER:C	1:40:A:GLU:N	1:40:A:GLU:CA	1:40:A:GLU:C	5	6.65
(1,109)	1:15:A:ASP:CA	1:15:A:ASP:CB	1:15:A:ASP:CG	1:15:A:ASP:OD1	12	6.63
(1,252)	1:54:A:ASP:CA	1:54:A:ASP:CB	1:54:A:ASP:CG	1:54:A:ASP:OD1	1	6.61
(1,264)	1:56:A:ASP:C	1:57:A:GLN:N	1:57:A:GLN:CA	1:57:A:GLN:C	12	6.58
(1,89)	1:10:A:LEU:N	1:10:A:LEU:CA	1:10:A:LEU:C	1:11:A:PHE:N	3	6.57
(1,296)	1:65:A:GLU:CA	1:65:A:GLU:CB	1:65:A:GLU:CG	1:65:A:GLU:CD	2	6.56
(1,241)	1:50:A:LEU:C	1:51:A:VAL:N	1:51:A:VAL:CA	1:51:A:VAL:C	3	6.56
(1,175)	1:32:A:GLY:N	1:32:A:GLY:CA	1:32:A:GLY:C	1:33:A:LEU:N	8	6.56
(1,62)	1:3:A:THR:CA	1:3:A:THR:C	1:4:A:GLU:N	1:4:A:GLU:CA	4	6.56
(1,66)	1:4:A:GLU:N	1:4:A:GLU:CA	1:4:A:GLU:C	1:5:A:GLN:N	8	6.55
(1,231)	1:48:A:GLU:N	1:48:A:GLU:CA	1:48:A:GLU:C	1:49:A:LEU:N	9	6.54
(1,260)	1:56:A:ASP:N	1:56:A:ASP:CA	1:56:A:ASP:CB	1:56:A:ASP:CG	5	6.53
(1,293)	1:64:A:GLU:CA	1:64:A:GLU:C	1:65:A:GLU:N	1:65:A:GLU:CA	1	6.52
(1,206)	1:40:A:GLU:C	1:41:A:THR:N	1:41:A:THR:CA	1:41:A:THR:C	11	6.52
(1,40)	1:5:A:VAL:N	1:5:A:VAL:CA	1:5:A:VAL:CB	1:5:A:VAL:CG1	1	6.52
(1,315)	1:70:A:VAL:N	1:70:A:VAL:CA	1:70:A:VAL:CB	1:70:A:VAL:CG1	5	6.51
(1,232)	1:48:A:GLU:CA	1:48:A:GLU:C	1:49:A:LEU:N	1:49:A:LEU:CA	1	6.51
(1,82)	1:8:A:GLN:CA	1:8:A:GLN:C	1:9:A:SER:N	1:9:A:SER:CA	7	6.51
(1,238)	1:49:A:LEU:C	1:50:A:LEU:N	1:50:A:LEU:CA	1:50:A:LEU:C	11	6.5
(1,54)	1:0:A:HIS:CA	1:0:A:HIS:C	1:1:A:MET:N	1:1:A:MET:CA	12	6.5
(1,62)	1:3:A:THR:CA	1:3:A:THR:C	1:4:A:GLU:N	1:4:A:GLU:CA	7	6.49
(1,254)	1:54:A:ASP:CA	1:54:A:ASP:C	1:55:A:SER:N	1:55:A:SER:CA	5	6.48
(1,240)	1:50:A:LEU:CA	1:50:A:LEU:C	1:51:A:VAL:N	1:51:A:VAL:CA	6	6.48
(1,57)	1:1:A:MET:CA	1:1:A:MET:C	1:2:A:ALA:N	1:2:A:ALA:CA	10	6.48
(1,309)	1:68:A:LYS:N	1:68:A:LYS:CA	1:68:A:LYS:C	1:69:A:ALA:N	3	6.47
(1,310)	1:68:A:LYS:CA	1:68:A:LYS:C	1:69:A:ALA:N	1:69:A:ALA:CA	11	6.46
(1,320)	1:71:A:LYS:N	1:71:A:LYS:CA	1:71:A:LYS:C	1:72:A:LYS:N	3	6.45
(1,316)	1:70:A:VAL:N	1:70:A:VAL:CA	1:70:A:VAL:C	1:71:A:LYS:N	4	6.44
(1,200)	1:39:A:SER:N	1:39:A:SER:CA	1:39:A:SER:C	1:40:A:GLU:N	5	6.43

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,5)	1:-16:A:SER:N	1:-16:A:SER:CA	1:-16:A:SER:C	1:-15:A:HIS:N	10	6.42
(1,137)	1:21:A:LYS:CA	1:21:A:LYS:C	1:22:A:ILE:N	1:22:A:ILE:CA	10	6.41
(1,122)	1:17:A:ASP:C	1:18:A:GLN:N	1:18:A:GLN:CA	1:18:A:GLN:C	1	6.41
(1,73)	1:6:A:GLU:N	1:6:A:GLU:CA	1:6:A:GLU:CB	1:6:A:GLU:CG	3	6.39
(1,183)	1:34:A:SER:C	1:35:A:ALA:N	1:35:A:ALA:CA	1:35:A:ALA:C	7	6.38
(1,155)	1:26:A:GLU:N	1:26:A:GLU:CA	1:26:A:GLU:CB	1:26:A:GLU:CG	10	6.37
(1,67)	1:4:A:GLU:CA	1:4:A:GLU:C	1:5:A:GLN:N	1:5:A:GLN:CA	8	6.36
(1,325)	1:72:A:LYS:N	1:72:A:LYS:CA	1:72:A:LYS:C	1:73:A:ALA:N	5	6.35
(1,278)	1:60:A:SER:CA	1:60:A:SER:C	1:61:A:ILE:N	1:61:A:ILE:CA	11	6.35
(1,312)	1:69:A:ALA:N	1:69:A:ALA:CA	1:69:A:ALA:C	1:70:A:VAL:N	8	6.34
(1,181)	1:34:A:SER:N	1:34:A:SER:CA	1:34:A:SER:C	1:35:A:ALA:N	2	6.34
(1,311)	1:68:A:LYS:C	1:69:A:ALA:N	1:69:A:ALA:CA	1:69:A:ALA:C	3	6.33
(1,145)	1:23:A:SER:CA	1:23:A:SER:C	1:24:A:ILE:N	1:24:A:ILE:CA	2	6.33
(1,325)	1:72:A:LYS:N	1:72:A:LYS:CA	1:72:A:LYS:C	1:73:A:ALA:N	9	6.32
(1,159)	1:26:A:GLU:C	1:27:A:LEU:N	1:27:A:LEU:CA	1:27:A:LEU:C	3	6.32
(1,85)	1:9:A:SER:N	1:9:A:SER:CA	1:9:A:SER:C	1:10:A:LEU:N	6	6.32
(1,328)	1:73:A:ALA:CA	1:73:A:ALA:C	1:74:A:SER:N	1:74:A:SER:CA	8	6.31
(1,241)	1:50:A:LEU:C	1:51:A:VAL:N	1:51:A:VAL:CA	1:51:A:VAL:C	1	6.31
(1,134)	1:21:A:LYS:N	1:21:A:LYS:CA	1:21:A:LYS:CB	1:21:A:LYS:CG	7	6.29
(1,117)	1:16:A:ARG:C	1:17:A:ASP:N	1:17:A:ASP:CA	1:17:A:ASP:C	11	6.28
(1,145)	1:23:A:SER:CA	1:23:A:SER:C	1:24:A:ILE:N	1:24:A:ILE:CA	1	6.26
(1,121)	1:17:A:ASP:CA	1:17:A:ASP:C	1:18:A:GLN:N	1:18:A:GLN:CA	9	6.26
(1,295)	1:65:A:GLU:N	1:65:A:GLU:CA	1:65:A:GLU:CB	1:65:A:GLU:CG	7	6.24
(1,67)	1:4:A:GLU:CA	1:4:A:GLU:C	1:5:A:GLN:N	1:5:A:GLN:CA	7	6.24
(1,218)	1:44:A:ASN:CA	1:44:A:ASN:C	1:45:A:SER:N	1:45:A:SER:CA	7	6.23
(1,200)	1:39:A:SER:N	1:39:A:SER:CA	1:39:A:SER:C	1:40:A:GLU:N	7	6.21
(1,233)	1:48:A:GLU:C	1:49:A:LEU:N	1:49:A:LEU:CA	1:49:A:LEU:C	9	6.2
(1,247)	1:52:A:GLN:CA	1:52:A:GLN:C	1:53:A:TYR:N	1:53:A:TYR:CA	12	6.19
(1,74)	1:6:A:GLU:N	1:6:A:GLU:CA	1:6:A:GLU:C	1:7:A:LEU:N	3	6.19
(1,126)	1:19:A:ASP:N	1:19:A:ASP:CA	1:19:A:ASP:CB	1:19:A:ASP:CG	11	6.18
(1,301)	1:66:A:LEU:CA	1:66:A:LEU:CB	1:66:A:LEU:CG	1:66:A:LEU:CD1	1	6.16
(1,284)	1:61:A:ILE:C	1:62:A:THR:N	1:62:A:THR:CA	1:62:A:THR:C	11	6.14
(1,227)	1:47:A:GLN:CA	1:47:A:GLN:C	1:48:A:GLU:N	1:48:A:GLU:CA	6	6.14
(1,70)	1:5:A:GLN:N	1:5:A:GLN:CA	1:5:A:GLN:C	1:6:A:GLU:N	4	6.14
(1,319)	1:71:A:LYS:CA	1:71:A:LYS:CB	1:71:A:LYS:CG	1:71:A:LYS:CD	4	6.13
(1,92)	1:11:A:PHE:N	1:11:A:PHE:CA	1:11:A:PHE:CB	1:11:A:PHE:CG	11	6.13
(1,267)	1:57:A:GLN:C	1:58:A:ASP:N	1:58:A:ASP:CA	1:58:A:ASP:C	12	6.12
(1,230)	1:48:A:GLU:CA	1:48:A:GLU:CB	1:48:A:GLU:CG	1:48:A:GLU:CD	11	6.11
(1,266)	1:57:A:GLN:CA	1:57:A:GLN:C	1:58:A:ASP:N	1:58:A:ASP:CA	12	6.08
(1,122)	1:17:A:ASP:C	1:18:A:GLN:N	1:18:A:GLN:CA	1:18:A:GLN:C	5	6.08
(1,83)	1:8:A:GLN:C	1:9:A:SER:N	1:9:A:SER:CA	1:9:A:SER:C	1	6.07
(1,156)	1:26:A:GLU:CA	1:26:A:GLU:CB	1:26:A:GLU:CG	1:26:A:GLU:CD	10	6.05
(1,116)	1:16:A:ARG:CA	1:16:A:ARG:C	1:17:A:ASP:N	1:17:A:ASP:CA	9	6.05
(1,78)	1:7:A:LEU:CA	1:7:A:LEU:C	1:8:A:GLN:N	1:8:A:GLN:CA	3	6.05
(1,159)	1:26:A:GLU:C	1:27:A:LEU:N	1:27:A:LEU:CA	1:27:A:LEU:C	7	6.04
(1,130)	1:19:A:ASP:C	1:20:A:GLY:N	1:20:A:GLY:CA	1:20:A:GLY:C	2	6.04
(1,111)	1:15:A:ASP:CA	1:15:A:ASP:C	1:16:A:ARG:N	1:16:A:ARG:CA	2	6.04
(1,302)	1:66:A:LEU:N	1:66:A:LEU:CA	1:66:A:LEU:C	1:67:A:LYS:N	4	6.03
(1,293)	1:64:A:GLU:CA	1:64:A:GLU:C	1:65:A:GLU:N	1:65:A:GLU:CA	2	6.02
(1,187)	1:36:A:VAL:N	1:36:A:VAL:CA	1:36:A:VAL:CB	1:36:A:VAL:CG1	3	6.02
(1,310)	1:68:A:LYS:CA	1:68:A:LYS:C	1:69:A:ALA:N	1:69:A:ALA:CA	1	6.01

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,304)	1:66:A:LEU:C	1:67:A:LYS:N	1:67:A:LYS:CA	1:67:A:LYS:C	8	6.0
(1,291)	1:63:A:PHE:C	1:64:A:GLU:N	1:64:A:GLU:CA	1:64:A:GLU:C	6	6.0
(1,38)	1:-6:A:LEU:CA	1:-6:A:LEU:C	1:-5:A:VAL:N	1:-5:A:VAL:CA	12	6.0
(1,296)	1:65:A:GLU:CA	1:65:A:GLU:CB	1:65:A:GLU:CG	1:65:A:GLU:CD	9	5.99
(1,70)	1:5:A:GLN:N	1:5:A:GLN:CA	1:5:A:GLN:C	1:6:A:GLU:N	8	5.99
(1,267)	1:57:A:GLN:C	1:58:A:ASP:N	1:58:A:ASP:CA	1:58:A:ASP:C	11	5.98
(1,70)	1:5:A:GLN:N	1:5:A:GLN:CA	1:5:A:GLN:C	1:6:A:GLU:N	9	5.98
(1,336)	1:76:A:LEU:CA	1:76:A:LEU:C	1:77:A:THR:N	1:77:A:THR:CA	8	5.97
(1,284)	1:61:A:ILE:C	1:62:A:THR:N	1:62:A:THR:CA	1:62:A:THR:C	4	5.97
(1,225)	1:47:A:GLN:N	1:47:A:GLN:CA	1:47:A:GLN:CB	1:47:A:GLN:CG	1	5.97
(1,292)	1:64:A:GLU:N	1:64:A:GLU:CA	1:64:A:GLU:C	1:65:A:GLU:N	10	5.95
(1,226)	1:47:A:GLN:N	1:47:A:GLN:CA	1:47:A:GLN:C	1:48:A:GLU:N	1	5.95
(1,3)	1:-17:A:SER:CA	1:-17:A:SER:C	1:-16:A:SER:N	1:-16:A:SER:CA	12	5.95
(1,312)	1:69:A:ALA:N	1:69:A:ALA:CA	1:69:A:ALA:C	1:70:A:VAL:N	11	5.93
(1,63)	1:3:A:THR:C	1:4:A:GLU:N	1:4:A:GLU:CA	1:4:A:GLU:C	6	5.93
(1,122)	1:17:A:ASP:C	1:18:A:GLN:N	1:18:A:GLN:CA	1:18:A:GLN:C	12	5.92
(1,97)	1:12:A:ASN:N	1:12:A:ASN:CA	1:12:A:ASN:C	1:13:A:THR:N	11	5.92
(1,3)	1:-17:A:SER:CA	1:-17:A:SER:C	1:-16:A:SER:N	1:-16:A:SER:CA	11	5.92
(1,5)	1:-16:A:SER:N	1:-16:A:SER:CA	1:-16:A:SER:C	1:-15:A:HIS:N	6	5.89
(1,326)	1:72:A:LYS:CA	1:72:A:LYS:C	1:73:A:ALA:N	1:73:A:ALA:CA	8	5.88
(1,272)	1:58:A:ASP:C	1:59:A:GLY:N	1:59:A:GLY:CA	1:59:A:GLY:C	12	5.88
(1,174)	1:31:A:PRO:C	1:32:A:GLY:N	1:32:A:GLY:CA	1:32:A:GLY:C	2	5.88
(1,137)	1:21:A:LYS:CA	1:21:A:LYS:C	1:22:A:ILE:N	1:22:A:ILE:CA	5	5.87
(1,190)	1:36:A:VAL:C	1:37:A:ILE:N	1:37:A:ILE:CA	1:37:A:ILE:C	2	5.85
(1,180)	1:33:A:LEU:C	1:34:A:SER:N	1:34:A:SER:CA	1:34:A:SER:C	4	5.84
(1,117)	1:16:A:ARG:C	1:17:A:ASP:N	1:17:A:ASP:CA	1:17:A:ASP:C	3	5.84
(1,106)	1:14:A:LEU:CA	1:14:A:LEU:C	1:15:A:ASP:N	1:15:A:ASP:CA	12	5.84
(1,258)	1:55:A:SER:CA	1:55:A:SER:C	1:56:A:ASP:N	1:56:A:ASP:CA	9	5.83
(1,230)	1:48:A:GLU:CA	1:48:A:GLU:CB	1:48:A:GLU:CG	1:48:A:GLU:CD	9	5.83
(1,266)	1:57:A:GLN:CA	1:57:A:GLN:C	1:58:A:ASP:N	1:58:A:ASP:CA	1	5.82
(1,68)	1:4:A:GLU:C	1:5:A:GLN:N	1:5:A:GLN:CA	1:5:A:GLN:C	4	5.82
(1,240)	1:50:A:LEU:CA	1:50:A:LEU:C	1:51:A:VAL:N	1:51:A:VAL:CA	12	5.81
(1,192)	1:37:A:ILE:CA	1:37:A:ILE:CB	1:37:A:ILE:CG1	1:37:A:ILE:CD1	12	5.78
(1,252)	1:54:A:ASP:CA	1:54:A:ASP:CB	1:54:A:ASP:CG	1:54:A:ASP:OD1	9	5.77
(1,210)	1:42:A:ASN:N	1:42:A:ASN:CA	1:42:A:ASN:C	1:43:A:THR:N	5	5.77
(1,65)	1:4:A:GLU:CA	1:4:A:GLU:CB	1:4:A:GLU:CG	1:4:A:GLU:CD	12	5.77
(1,180)	1:33:A:LEU:C	1:34:A:SER:N	1:34:A:SER:CA	1:34:A:SER:C	5	5.76
(1,75)	1:6:A:GLU:CA	1:6:A:GLU:C	1:7:A:LEU:N	1:7:A:LEU:CA	6	5.73
(1,281)	1:61:A:ILE:CA	1:61:A:ILE:CB	1:61:A:ILE:CG1	1:61:A:ILE:CD1	8	5.71
(1,278)	1:60:A:SER:CA	1:60:A:SER:C	1:61:A:ILE:N	1:61:A:ILE:CA	7	5.71
(1,78)	1:7:A:LEU:CA	1:7:A:LEU:C	1:8:A:GLN:N	1:8:A:GLN:CA	12	5.71
(1,195)	1:37:A:ILE:C	1:38:A:SER:N	1:38:A:SER:CA	1:38:A:SER:C	4	5.7
(1,139)	1:22:A:ILE:N	1:22:A:ILE:CA	1:22:A:ILE:CB	1:22:A:ILE:CG1	9	5.7
(1,79)	1:7:A:LEU:C	1:8:A:GLN:N	1:8:A:GLN:CA	1:8:A:GLN:C	4	5.7
(1,92)	1:11:A:PHE:N	1:11:A:PHE:CA	1:11:A:PHE:CB	1:11:A:PHE:CG	1	5.69
(1,71)	1:5:A:GLN:CA	1:5:A:GLN:C	1:6:A:GLU:N	1:6:A:GLU:CA	9	5.68
(1,109)	1:15:A:ASP:CA	1:15:A:ASP:CB	1:15:A:ASP:CG	1:15:A:ASP:OD1	10	5.67
(1,307)	1:67:A:LYS:CA	1:67:A:LYS:C	1:68:A:LYS:N	1:68:A:LYS:CA	4	5.66
(1,236)	1:49:A:LEU:N	1:49:A:LEU:CA	1:49:A:LEU:C	1:50:A:LEU:N	9	5.64
(1,155)	1:26:A:GLU:N	1:26:A:GLU:CA	1:26:A:GLU:CB	1:26:A:GLU:CG	1	5.61
(1,118)	1:17:A:ASP:N	1:17:A:ASP:CA	1:17:A:ASP:CB	1:17:A:ASP:CG	10	5.61

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,182)	1:34:A:SER:CA	1:34:A:SER:C	1:35:A:ALA:N	1:35:A:ALA:CA	6	5.6
(1,310)	1:68:A:LYS:CA	1:68:A:LYS:C	1:69:A:ALA:N	1:69:A:ALA:CA	9	5.59
(1,155)	1:26:A:GLU:N	1:26:A:GLU:CA	1:26:A:GLU:CB	1:26:A:GLU:CG	8	5.58
(1,186)	1:35:A:ALA:C	1:36:A:VAL:N	1:36:A:VAL:CA	1:36:A:VAL:C	4	5.57
(1,152)	1:25:A:ASN:N	1:25:A:ASN:CA	1:25:A:ASN:C	1:26:A:GLU:N	7	5.56
(1,197)	1:38:A:SER:CA	1:38:A:SER:C	1:39:A:SER:N	1:39:A:SER:CA	7	5.55
(1,95)	1:11:A:PHE:CA	1:11:A:PHE:C	1:12:A:ASN:N	1:12:A:ASN:CA	9	5.55
(1,139)	1:22:A:ILE:N	1:22:A:ILE:CA	1:22:A:ILE:CB	1:22:A:ILE:CG1	8	5.52
(1,89)	1:10:A:LEU:N	1:10:A:LEU:CA	1:10:A:LEU:C	1:11:A:PHE:N	6	5.51
(1,234)	1:49:A:LEU:N	1:49:A:LEU:CA	1:49:A:LEU:CB	1:49:A:LEU:CG	4	5.49
(1,156)	1:26:A:GLU:CA	1:26:A:GLU:CB	1:26:A:GLU:CG	1:26:A:GLU:CD	3	5.49
(1,299)	1:65:A:GLU:C	1:66:A:LEU:N	1:66:A:LEU:CA	1:66:A:LEU:C	4	5.48
(1,228)	1:47:A:GLN:C	1:48:A:GLU:N	1:48:A:GLU:CA	1:48:A:GLU:C	6	5.47
(1,67)	1:4:A:GLU:CA	1:4:A:GLU:C	1:5:A:GLN:N	1:5:A:GLN:CA	6	5.47
(1,223)	1:46:A:PRO:CA	1:46:A:PRO:C	1:47:A:GLN:N	1:47:A:GLN:CA	5	5.46
(1,142)	1:22:A:ILE:CA	1:22:A:ILE:C	1:23:A:SER:N	1:23:A:SER:CA	7	5.46
(1,133)	1:20:A:GLY:C	1:21:A:LYS:N	1:21:A:LYS:CA	1:21:A:LYS:C	5	5.45
(1,322)	1:71:A:LYS:C	1:72:A:LYS:N	1:72:A:LYS:CA	1:72:A:LYS:C	3	5.44
(1,102)	1:13:A:THR:CA	1:13:A:THR:C	1:14:A:LEU:N	1:14:A:LEU:CA	1	5.44
(1,13)	1:-14:A:HIS:N	1:-14:A:HIS:CA	1:-14:A:HIS:C	1:-13:A:HIS:N	6	5.43
(1,60)	1:2:A:ALA:C	1:3:A:THR:N	1:3:A:THR:CA	1:3:A:THR:C	6	5.42
(1,141)	1:22:A:ILE:N	1:22:A:ILE:CA	1:22:A:ILE:C	1:23:A:SER:N	10	5.41
(1,138)	1:21:A:LYS:C	1:22:A:ILE:N	1:22:A:ILE:CA	1:22:A:ILE:C	7	5.41
(1,89)	1:10:A:LEU:N	1:10:A:LEU:CA	1:10:A:LEU:C	1:11:A:PHE:N	7	5.41
(1,77)	1:7:A:LEU:N	1:7:A:LEU:CA	1:7:A:LEU:C	1:8:A:GLN:N	7	5.41
(1,176)	1:32:A:GLY:CA	1:32:A:GLY:C	1:33:A:LEU:N	1:33:A:LEU:CA	7	5.4
(1,67)	1:4:A:GLU:CA	1:4:A:GLU:C	1:5:A:GLN:N	1:5:A:GLN:CA	11	5.4
(1,253)	1:54:A:ASP:N	1:54:A:ASP:CA	1:54:A:ASP:C	1:55:A:SER:N	10	5.39
(1,76)	1:6:A:GLU:C	1:7:A:LEU:N	1:7:A:LEU:CA	1:7:A:LEU:C	5	5.39
(1,209)	1:41:A:THR:C	1:42:A:ASN:N	1:42:A:ASN:CA	1:42:A:ASN:C	1	5.38
(1,260)	1:56:A:ASP:N	1:56:A:ASP:CA	1:56:A:ASP:CB	1:56:A:ASP:CG	9	5.37
(1,239)	1:50:A:LEU:N	1:50:A:LEU:CA	1:50:A:LEU:C	1:51:A:VAL:N	12	5.36
(1,212)	1:42:A:ASN:C	1:43:A:THR:N	1:43:A:THR:CA	1:43:A:THR:C	6	5.35
(1,105)	1:14:A:LEU:N	1:14:A:LEU:CA	1:14:A:LEU:C	1:15:A:ASP:N	9	5.34
(1,190)	1:36:A:VAL:C	1:37:A:ILE:N	1:37:A:ILE:CA	1:37:A:ILE:C	6	5.33
(1,182)	1:34:A:SER:CA	1:34:A:SER:C	1:35:A:ALA:N	1:35:A:ALA:CA	10	5.33
(1,244)	1:51:A:VAL:CA	1:51:A:VAL:C	1:52:A:GLN:N	1:52:A:GLN:CA	8	5.31
(1,186)	1:35:A:ALA:C	1:36:A:VAL:N	1:36:A:VAL:CA	1:36:A:VAL:C	7	5.3
(1,221)	1:45:A:SER:CA	1:45:A:SER:C	1:46:A:PRO:N	1:46:A:PRO:CA	1	5.29
(1,65)	1:4:A:GLU:CA	1:4:A:GLU:CB	1:4:A:GLU:CG	1:4:A:GLU:CD	1	5.29
(1,173)	1:31:A:PRO:CA	1:31:A:PRO:C	1:32:A:GLY:N	1:32:A:GLY:CA	2	5.27
(1,106)	1:14:A:LEU:CA	1:14:A:LEU:C	1:15:A:ASP:N	1:15:A:ASP:CA	6	5.26
(1,183)	1:34:A:SER:C	1:35:A:ALA:N	1:35:A:ALA:CA	1:35:A:ALA:C	12	5.25
(1,313)	1:69:A:ALA:CA	1:69:A:ALA:C	1:70:A:VAL:N	1:70:A:VAL:CA	4	5.24
(1,307)	1:67:A:LYS:CA	1:67:A:LYS:C	1:68:A:LYS:N	1:68:A:LYS:CA	12	5.24
(1,279)	1:60:A:SER:C	1:61:A:ILE:N	1:61:A:ILE:CA	1:61:A:ILE:C	8	5.24
(1,232)	1:48:A:GLU:CA	1:48:A:GLU:C	1:49:A:LEU:N	1:49:A:LEU:CA	7	5.24
(1,251)	1:54:A:ASP:N	1:54:A:ASP:CA	1:54:A:ASP:CB	1:54:A:ASP:CG	12	5.23
(1,214)	1:43:A:THR:N	1:43:A:THR:CA	1:43:A:THR:C	1:44:A:ASN:N	4	5.22
(1,138)	1:21:A:LYS:C	1:22:A:ILE:N	1:22:A:ILE:CA	1:22:A:ILE:C	8	5.22
(1,92)	1:11:A:PHE:N	1:11:A:PHE:CA	1:11:A:PHE:CB	1:11:A:PHE:CG	9	5.22

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,5)	1:-16:A:SER:N	1:-16:A:SER:CA	1:-16:A:SER:C	1:-15:A:HIS:N	2	5.2
(1,220)	1:45:A:SER:N	1:45:A:SER:CA	1:45:A:SER:CB	1:45:A:SER:OG	1	5.18
(1,77)	1:7:A:LEU:N	1:7:A:LEU:CA	1:7:A:LEU:C	1:8:A:GLN:N	1	5.18
(1,75)	1:6:A:GLU:CA	1:6:A:GLU:C	1:7:A:LEU:N	1:7:A:LEU:CA	1	5.15
(1,78)	1:7:A:LEU:CA	1:7:A:LEU:C	1:8:A:GLN:N	1:8:A:GLN:CA	11	5.13
(1,242)	1:51:A:VAL:N	1:51:A:VAL:CA	1:51:A:VAL:CB	1:51:A:VAL:CG1	2	5.1
(1,205)	1:40:A:GLU:CA	1:40:A:GLU:C	1:41:A:THR:N	1:41:A:THR:CA	3	5.08
(1,165)	1:28:A:PHE:CA	1:28:A:PHE:C	1:29:A:LEU:N	1:29:A:LEU:CA	1	5.08
(1,134)	1:21:A:LYS:N	1:21:A:LYS:CA	1:21:A:LYS:CB	1:21:A:LYS:CG	6	5.08
(1,231)	1:48:A:GLU:N	1:48:A:GLU:CA	1:48:A:GLU:C	1:49:A:LEU:N	6	5.05
(1,127)	1:19:A:ASP:CA	1:19:A:ASP:CB	1:19:A:ASP:CG	1:19:A:ASP:OD1	2	5.05
(1,242)	1:51:A:VAL:N	1:51:A:VAL:CA	1:51:A:VAL:CB	1:51:A:VAL:CG1	10	5.04
(1,165)	1:28:A:PHE:CA	1:28:A:PHE:C	1:29:A:LEU:N	1:29:A:LEU:CA	11	5.04
(1,138)	1:21:A:LYS:C	1:22:A:ILE:N	1:22:A:ILE:CA	1:22:A:ILE:C	11	5.04
(1,72)	1:5:A:GLN:C	1:6:A:GLU:N	1:6:A:GLU:CA	1:6:A:GLU:C	4	5.03
(1,291)	1:63:A:PHE:C	1:64:A:GLU:N	1:64:A:GLU:CA	1:64:A:GLU:C	12	5.02
(1,279)	1:60:A:SER:C	1:61:A:ILE:N	1:61:A:ILE:CA	1:61:A:ILE:C	7	5.02
(1,263)	1:56:A:ASP:CA	1:56:A:ASP:C	1:57:A:GLN:N	1:57:A:GLN:CA	10	5.02
(1,156)	1:26:A:GLU:CA	1:26:A:GLU:CB	1:26:A:GLU:CG	1:26:A:GLU:CD	11	5.01
(1,223)	1:46:A:PRO:CA	1:46:A:PRO:C	1:47:A:GLN:N	1:47:A:GLN:CA	11	5.0
(1,133)	1:20:A:GLY:C	1:21:A:LYS:N	1:21:A:LYS:CA	1:21:A:LYS:C	12	5.0
(1,107)	1:14:A:LEU:C	1:15:A:ASP:N	1:15:A:ASP:CA	1:15:A:ASP:C	7	5.0
(1,314)	1:69:A:ALA:C	1:70:A:VAL:N	1:70:A:VAL:CA	1:70:A:VAL:C	8	4.97
(1,292)	1:64:A:GLU:N	1:64:A:GLU:CA	1:64:A:GLU:C	1:65:A:GLU:N	9	4.97
(1,247)	1:52:A:GLN:CA	1:52:A:GLN:C	1:53:A:TYR:N	1:53:A:TYR:CA	4	4.97
(1,185)	1:35:A:ALA:CA	1:35:A:ALA:C	1:36:A:VAL:N	1:36:A:VAL:CA	2	4.97
(1,152)	1:25:A:ASN:N	1:25:A:ASN:CA	1:25:A:ASN:C	1:26:A:GLU:N	6	4.97
(1,37)	1:-7:A:GLY:C	1:-6:A:LEU:N	1:-6:A:LEU:CA	1:-6:A:LEU:C	6	4.97
(1,292)	1:64:A:GLU:N	1:64:A:GLU:CA	1:64:A:GLU:C	1:65:A:GLU:N	3	4.95
(1,183)	1:34:A:SER:C	1:35:A:ALA:N	1:35:A:ALA:CA	1:35:A:ALA:C	10	4.95
(1,295)	1:65:A:GLU:N	1:65:A:GLU:CA	1:65:A:GLU:CB	1:65:A:GLU:CG	2	4.94
(1,290)	1:63:A:PHE:CA	1:63:A:PHE:C	1:64:A:GLU:N	1:64:A:GLU:CA	3	4.94
(1,249)	1:53:A:TYR:CA	1:53:A:TYR:C	1:54:A:ASP:N	1:54:A:ASP:CA	9	4.94
(1,204)	1:40:A:GLU:N	1:40:A:GLU:CA	1:40:A:GLU:C	1:41:A:THR:N	4	4.94
(1,121)	1:17:A:ASP:CA	1:17:A:ASP:C	1:18:A:GLN:N	1:18:A:GLN:CA	4	4.94
(1,152)	1:25:A:ASN:N	1:25:A:ASN:CA	1:25:A:ASN:C	1:26:A:GLU:N	1	4.93
(1,319)	1:71:A:LYS:CA	1:71:A:LYS:CB	1:71:A:LYS:CG	1:71:A:LYS:CD	10	4.92
(1,251)	1:54:A:ASP:N	1:54:A:ASP:CA	1:54:A:ASP:CB	1:54:A:ASP:CG	7	4.9
(1,184)	1:35:A:ALA:N	1:35:A:ALA:CA	1:35:A:ALA:C	1:36:A:VAL:N	6	4.9
(1,119)	1:17:A:ASP:CA	1:17:A:ASP:CB	1:17:A:ASP:CG	1:17:A:ASP:OD1	8	4.9
(1,80)	1:8:A:GLN:CA	1:8:A:GLN:CB	1:8:A:GLN:CG	1:8:A:GLN:CD	1	4.9
(1,97)	1:12:A:ASN:N	1:12:A:ASN:CA	1:12:A:ASN:C	1:13:A:THR:N	7	4.89
(1,161)	1:27:A:LEU:CA	1:27:A:LEU:C	1:28:A:PHE:N	1:28:A:PHE:CA	5	4.87
(1,109)	1:15:A:ASP:CA	1:15:A:ASP:CB	1:15:A:ASP:CG	1:15:A:ASP:OD1	3	4.87
(1,261)	1:56:A:ASP:CA	1:56:A:ASP:CB	1:56:A:ASP:CG	1:56:A:ASP:OD1	2	4.86
(1,169)	1:29:A:LEU:CA	1:29:A:LEU:C	1:30:A:SER:N	1:30:A:SER:CA	12	4.86
(1,224)	1:46:A:PRO:C	1:47:A:GLN:N	1:47:A:GLN:CA	1:47:A:GLN:C	3	4.85
(1,185)	1:35:A:ALA:CA	1:35:A:ALA:C	1:36:A:VAL:N	1:36:A:VAL:CA	9	4.85
(1,313)	1:69:A:ALA:CA	1:69:A:ALA:C	1:70:A:VAL:N	1:70:A:VAL:CA	5	4.84
(1,277)	1:60:A:SER:N	1:60:A:SER:CA	1:60:A:SER:C	1:61:A:ILE:N	10	4.84
(1,221)	1:45:A:SER:CA	1:45:A:SER:C	1:46:A:PRO:N	1:46:A:PRO:CA	11	4.83

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,179)	1:33:A:LEU:CA	1:33:A:LEU:C	1:34:A:SER:N	1:34:A:SER:CA	12	4.83
(1,294)	1:64:A:GLU:C	1:65:A:GLU:N	1:65:A:GLU:CA	1:65:A:GLU:C	10	4.82
(1,275)	1:59:A:GLY:C	1:60:A:SER:N	1:60:A:SER:CA	1:60:A:SER:C	1	4.82
(1,66)	1:4:A:GLU:N	1:4:A:GLU:CA	1:4:A:GLU:C	1:5:A:GLN:N	10	4.82
(1,3)	1:-17:A:SER:CA	1:-17:A:SER:C	1:-16:A:SER:N	1:-16:A:SER:CA	10	4.82
(1,169)	1:29:A:LEU:CA	1:29:A:LEU:C	1:30:A:SER:N	1:30:A:SER:CA	7	4.81
(1,41)	1:-5:A:VAL:CA	1:-5:A:VAL:C	1:-4:A:PRO:N	1:-4:A:PRO:CA	5	4.8
(1,88)	1:10:A:LEU:CA	1:10:A:LEU:CB	1:10:A:LEU:CG	1:10:A:LEU:CD1	12	4.79
(1,246)	1:52:A:GLN:N	1:52:A:GLN:CA	1:52:A:GLN:C	1:53:A:TYR:N	11	4.78
(1,242)	1:51:A:VAL:N	1:51:A:VAL:CA	1:51:A:VAL:CB	1:51:A:VAL:CG1	1	4.78
(1,81)	1:8:A:GLN:N	1:8:A:GLN:CA	1:8:A:GLN:C	1:9:A:SER:N	12	4.78
(1,181)	1:34:A:SER:N	1:34:A:SER:CA	1:34:A:SER:C	1:35:A:ALA:N	7	4.75
(1,160)	1:27:A:LEU:N	1:27:A:LEU:CA	1:27:A:LEU:C	1:28:A:PHE:N	10	4.75
(1,83)	1:8:A:GLN:C	1:9:A:SER:N	1:9:A:SER:CA	1:9:A:SER:C	11	4.75
(1,78)	1:7:A:LEU:CA	1:7:A:LEU:C	1:8:A:GLN:N	1:8:A:GLN:CA	10	4.75
(1,14)	1:-14:A:HIS:CA	1:-14:A:HIS:C	1:-13:A:HIS:N	1:-13:A:HIS:CA	4	4.75
(1,21)	1:-12:A:HIS:CA	1:-12:A:HIS:C	1:-11:A:HIS:N	1:-11:A:HIS:CA	2	4.72
(1,73)	1:6:A:GLU:N	1:6:A:GLU:CA	1:6:A:GLU:CB	1:6:A:GLU:CG	11	4.71
(1,211)	1:42:A:ASN:CA	1:42:A:ASN:C	1:43:A:THR:N	1:43:A:THR:CA	5	4.7
(1,126)	1:19:A:ASP:N	1:19:A:ASP:CA	1:19:A:ASP:CB	1:19:A:ASP:CG	4	4.69
(1,326)	1:72:A:LYS:CA	1:72:A:LYS:C	1:73:A:ALA:N	1:73:A:ALA:CA	12	4.68
(1,160)	1:27:A:LEU:N	1:27:A:LEU:CA	1:27:A:LEU:C	1:28:A:PHE:N	5	4.68
(1,330)	1:74:A:SER:CA	1:74:A:SER:C	1:75:A:ASN:N	1:75:A:ASN:CA	9	4.67
(1,284)	1:61:A:ILE:C	1:62:A:THR:N	1:62:A:THR:CA	1:62:A:THR:C	9	4.67
(1,325)	1:72:A:LYS:N	1:72:A:LYS:CA	1:72:A:LYS:C	1:73:A:ALA:N	6	4.66
(1,204)	1:40:A:GLU:N	1:40:A:GLU:CA	1:40:A:GLU:C	1:41:A:THR:N	8	4.66
(1,132)	1:20:A:GLY:CA	1:20:A:GLY:C	1:21:A:LYS:N	1:21:A:LYS:CA	3	4.66
(1,70)	1:5:A:GLN:N	1:5:A:GLN:CA	1:5:A:GLN:C	1:6:A:GLU:N	7	4.66
(1,323)	1:72:A:LYS:N	1:72:A:LYS:CA	1:72:A:LYS:CB	1:72:A:LYS:CG	2	4.65
(1,189)	1:36:A:VAL:CA	1:36:A:VAL:C	1:37:A:ILE:N	1:37:A:ILE:CA	12	4.65
(1,183)	1:34:A:SER:C	1:35:A:ALA:N	1:35:A:ALA:CA	1:35:A:ALA:C	11	4.65
(1,120)	1:17:A:ASP:N	1:17:A:ASP:CA	1:17:A:ASP:C	1:18:A:GLN:N	11	4.65
(1,158)	1:26:A:GLU:CA	1:26:A:GLU:C	1:27:A:LEU:N	1:27:A:LEU:CA	8	4.63
(1,17)	1:-13:A:HIS:C	1:-12:A:HIS:N	1:-12:A:HIS:CA	1:-12:A:HIS:C	9	4.63
(1,218)	1:44:A:ASN:CA	1:44:A:ASN:C	1:45:A:SER:N	1:45:A:SER:CA	3	4.61
(1,178)	1:33:A:LEU:N	1:33:A:LEU:CA	1:33:A:LEU:C	1:34:A:SER:N	6	4.61
(1,151)	1:24:A:ILE:C	1:25:A:ASN:N	1:25:A:ASN:CA	1:25:A:ASN:C	8	4.6
(1,67)	1:4:A:GLU:CA	1:4:A:GLU:C	1:5:A:GLN:N	1:5:A:GLN:CA	3	4.58
(1,27)	1:-10:A:HIS:N	1:-10:A:HIS:CA	1:-10:A:HIS:C	1:-9:A:SER:N	2	4.58
(1,336)	1:76:A:LEU:CA	1:76:A:LEU:C	1:77:A:THR:N	1:77:A:THR:CA	4	4.57
(1,294)	1:64:A:GLU:C	1:65:A:GLU:N	1:65:A:GLU:CA	1:65:A:GLU:C	9	4.57
(1,188)	1:36:A:VAL:N	1:36:A:VAL:CA	1:36:A:VAL:C	1:37:A:ILE:N	5	4.57
(1,135)	1:21:A:LYS:CA	1:21:A:LYS:CB	1:21:A:LYS:CG	1:21:A:LYS:CD	3	4.57
(1,272)	1:58:A:ASP:C	1:59:A:GLY:N	1:59:A:GLY:CA	1:59:A:GLY:C	1	4.56
(1,176)	1:32:A:GLY:CA	1:32:A:GLY:C	1:33:A:LEU:N	1:33:A:LEU:CA	5	4.55
(1,258)	1:55:A:SER:CA	1:55:A:SER:C	1:56:A:ASP:N	1:56:A:ASP:CA	11	4.54
(1,155)	1:26:A:GLU:N	1:26:A:GLU:CA	1:26:A:GLU:CB	1:26:A:GLU:CG	5	4.5
(1,101)	1:13:A:THR:N	1:13:A:THR:CA	1:13:A:THR:C	1:14:A:LEU:N	4	4.5
(1,303)	1:66:A:LEU:CA	1:66:A:LEU:C	1:67:A:LYS:N	1:67:A:LYS:CA	11	4.49
(1,239)	1:50:A:LEU:N	1:50:A:LEU:CA	1:50:A:LEU:C	1:51:A:VAL:N	2	4.49
(1,6)	1:-16:A:SER:CA	1:-16:A:SER:C	1:-15:A:HIS:N	1:-15:A:HIS:CA	5	4.49

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,305)	1:67:A:LYS:CA	1:67:A:LYS:CB	1:67:A:LYS:CG	1:67:A:LYS:CD	6	4.48
(1,220)	1:45:A:SER:N	1:45:A:SER:CA	1:45:A:SER:CB	1:45:A:SER:OG	7	4.48
(1,312)	1:69:A:ALA:N	1:69:A:ALA:CA	1:69:A:ALA:C	1:70:A:VAL:N	1	4.45
(1,307)	1:67:A:LYS:CA	1:67:A:LYS:C	1:68:A:LYS:N	1:68:A:LYS:CA	2	4.44
(1,317)	1:70:A:VAL:CA	1:70:A:VAL:C	1:71:A:LYS:N	1:71:A:LYS:CA	8	4.43
(1,202)	1:39:A:SER:C	1:40:A:GLU:N	1:40:A:GLU:CA	1:40:A:GLU:C	2	4.43
(1,159)	1:26:A:GLU:C	1:27:A:LEU:N	1:27:A:LEU:CA	1:27:A:LEU:C	8	4.43
(1,284)	1:61:A:ILE:C	1:62:A:THR:N	1:62:A:THR:CA	1:62:A:THR:C	7	4.42
(1,278)	1:60:A:SER:CA	1:60:A:SER:C	1:61:A:ILE:N	1:61:A:ILE:CA	9	4.42
(1,259)	1:55:A:SER:C	1:56:A:ASP:N	1:56:A:ASP:CA	1:56:A:ASP:C	5	4.42
(1,71)	1:5:A:GLN:CA	1:5:A:GLN:C	1:6:A:GLU:N	1:6:A:GLU:CA	10	4.42
(1,157)	1:26:A:GLU:N	1:26:A:GLU:CA	1:26:A:GLU:C	1:27:A:LEU:N	10	4.41
(1,220)	1:45:A:SER:N	1:45:A:SER:CA	1:45:A:SER:CB	1:45:A:SER:OG	12	4.4
(1,107)	1:14:A:LEU:C	1:15:A:ASP:N	1:15:A:ASP:CA	1:15:A:ASP:C	10	4.4
(1,133)	1:20:A:GLY:C	1:21:A:LYS:N	1:21:A:LYS:CA	1:21:A:LYS:C	3	4.38
(1,336)	1:76:A:LEU:CA	1:76:A:LEU:C	1:77:A:THR:N	1:77:A:THR:CA	5	4.36
(1,308)	1:67:A:LYS:C	1:68:A:LYS:N	1:68:A:LYS:CA	1:68:A:LYS:C	2	4.36
(1,300)	1:66:A:LEU:N	1:66:A:LEU:CA	1:66:A:LEU:CB	1:66:A:LEU:CG	8	4.36
(1,233)	1:48:A:GLU:C	1:49:A:LEU:N	1:49:A:LEU:CA	1:49:A:LEU:C	12	4.35
(1,159)	1:26:A:GLU:C	1:27:A:LEU:N	1:27:A:LEU:CA	1:27:A:LEU:C	12	4.35
(1,157)	1:26:A:GLU:N	1:26:A:GLU:CA	1:26:A:GLU:C	1:27:A:LEU:N	7	4.35
(1,126)	1:19:A:ASP:N	1:19:A:ASP:CA	1:19:A:ASP:CB	1:19:A:ASP:CG	5	4.35
(1,308)	1:67:A:LYS:C	1:68:A:LYS:N	1:68:A:LYS:CA	1:68:A:LYS:C	1	4.34
(1,85)	1:9:A:SER:N	1:9:A:SER:CA	1:9:A:SER:C	1:10:A:LEU:N	9	4.34
(1,1)	1:-18:A:GLY:CA	1:-18:A:GLY:C	1:-17:A:SER:N	1:-17:A:SER:CA	3	4.34
(1,118)	1:17:A:ASP:N	1:17:A:ASP:CA	1:17:A:ASP:CB	1:17:A:ASP:CG	2	4.33
(1,153)	1:25:A:ASN:CA	1:25:A:ASN:C	1:26:A:GLU:N	1:26:A:GLU:CA	3	4.32
(1,115)	1:16:A:ARG:N	1:16:A:ARG:CA	1:16:A:ARG:C	1:17:A:ASP:N	5	4.32
(1,89)	1:10:A:LEU:N	1:10:A:LEU:CA	1:10:A:LEU:C	1:11:A:PHE:N	4	4.32
(1,102)	1:13:A:THR:CA	1:13:A:THR:C	1:14:A:LEU:N	1:14:A:LEU:CA	10	4.31
(1,1)	1:-18:A:GLY:CA	1:-18:A:GLY:C	1:-17:A:SER:N	1:-17:A:SER:CA	11	4.31
(1,293)	1:64:A:GLU:CA	1:64:A:GLU:C	1:65:A:GLU:N	1:65:A:GLU:CA	6	4.3
(1,236)	1:49:A:LEU:N	1:49:A:LEU:CA	1:49:A:LEU:C	1:50:A:LEU:N	12	4.3
(1,191)	1:37:A:ILE:N	1:37:A:ILE:CA	1:37:A:ILE:CB	1:37:A:ILE:CG1	2	4.3
(1,40)	1:-5:A:VAL:N	1:-5:A:VAL:CA	1:-5:A:VAL:CB	1:-5:A:VAL:CG1	4	4.29
(1,300)	1:66:A:LEU:N	1:66:A:LEU:CA	1:66:A:LEU:CB	1:66:A:LEU:CG	1	4.28
(1,154)	1:25:A:ASN:C	1:26:A:GLU:N	1:26:A:GLU:CA	1:26:A:GLU:C	6	4.28
(1,74)	1:6:A:GLU:N	1:6:A:GLU:CA	1:6:A:GLU:C	1:7:A:LEU:N	7	4.28
(1,91)	1:10:A:LEU:C	1:11:A:PHE:N	1:11:A:PHE:CA	1:11:A:PHE:C	3	4.27
(1,254)	1:54:A:ASP:CA	1:54:A:ASP:C	1:55:A:SER:N	1:55:A:SER:CA	2	4.26
(1,233)	1:48:A:GLU:C	1:49:A:LEU:N	1:49:A:LEU:CA	1:49:A:LEU:C	8	4.26
(1,107)	1:14:A:LEU:C	1:15:A:ASP:N	1:15:A:ASP:CA	1:15:A:ASP:C	9	4.25
(1,273)	1:59:A:GLY:N	1:59:A:GLY:CA	1:59:A:GLY:C	1:60:A:SER:N	9	4.24
(1,165)	1:28:A:PHE:CA	1:28:A:PHE:C	1:29:A:LEU:N	1:29:A:LEU:CA	6	4.24
(1,76)	1:6:A:GLU:C	1:7:A:LEU:N	1:7:A:LEU:CA	1:7:A:LEU:C	9	4.24
(1,136)	1:21:A:LYS:N	1:21:A:LYS:CA	1:21:A:LYS:C	1:22:A:ILE:N	4	4.23
(1,80)	1:8:A:GLN:CA	1:8:A:GLN:CB	1:8:A:GLN:CG	1:8:A:GLN:CD	11	4.23
(1,87)	1:9:A:SER:C	1:10:A:LEU:N	1:10:A:LEU:CA	1:10:A:LEU:C	3	4.22
(1,20)	1:-12:A:HIS:N	1:-12:A:HIS:CA	1:-12:A:HIS:C	1:-11:A:HIS:N	2	4.22
(1,91)	1:10:A:LEU:C	1:11:A:PHE:N	1:11:A:PHE:CA	1:11:A:PHE:C	1	4.19
(1,263)	1:56:A:ASP:CA	1:56:A:ASP:C	1:57:A:GLN:N	1:57:A:GLN:CA	1	4.18

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,215)	1:43:A:THR:CA	1:43:A:THR:C	1:44:A:ASN:N	1:44:A:ASN:CA	11	4.18
(1,204)	1:40:A:GLU:N	1:40:A:GLU:CA	1:40:A:GLU:C	1:41:A:THR:N	6	4.18
(1,159)	1:26:A:GLU:C	1:27:A:LEU:N	1:27:A:LEU:CA	1:27:A:LEU:C	4	4.18
(1,90)	1:10:A:LEU:CA	1:10:A:LEU:C	1:11:A:PHE:N	1:11:A:PHE:CA	11	4.18
(1,252)	1:54:A:ASP:CA	1:54:A:ASP:CB	1:54:A:ASP:CG	1:54:A:ASP:OD1	2	4.17
(1,321)	1:71:A:LYS:CA	1:71:A:LYS:C	1:72:A:LYS:N	1:72:A:LYS:CA	12	4.14
(1,303)	1:66:A:LEU:CA	1:66:A:LEU:C	1:67:A:LYS:N	1:67:A:LYS:CA	3	4.13
(1,299)	1:65:A:GLU:C	1:66:A:LEU:N	1:66:A:LEU:CA	1:66:A:LEU:C	12	4.12
(1,290)	1:63:A:PHE:CA	1:63:A:PHE:C	1:64:A:GLU:N	1:64:A:GLU:CA	5	4.12
(1,281)	1:61:A:ILE:CA	1:61:A:ILE:CB	1:61:A:ILE:CG1	1:61:A:ILE:CD1	5	4.12
(1,32)	1:-9:A:SER:CA	1:-9:A:SER:C	1:-8:A:SER:N	1:-8:A:SER:CA	7	4.11
(1,125)	1:18:A:GLN:C	1:19:A:ASP:N	1:19:A:ASP:CA	1:19:A:ASP:C	1	4.1
(1,302)	1:66:A:LEU:N	1:66:A:LEU:CA	1:66:A:LEU:C	1:67:A:LYS:N	12	4.06
(1,326)	1:72:A:LYS:CA	1:72:A:LYS:C	1:73:A:ALA:N	1:73:A:ALA:CA	11	4.05
(1,303)	1:66:A:LEU:CA	1:66:A:LEU:C	1:67:A:LYS:N	1:67:A:LYS:CA	5	4.04
(1,296)	1:65:A:GLU:CA	1:65:A:GLU:CB	1:65:A:GLU:CG	1:65:A:GLU:CD	6	4.04
(1,221)	1:45:A:SER:CA	1:45:A:SER:C	1:46:A:PRO:N	1:46:A:PRO:CA	3	4.04
(1,313)	1:69:A:ALA:CA	1:69:A:ALA:C	1:70:A:VAL:N	1:70:A:VAL:CA	2	4.03
(1,279)	1:60:A:SER:C	1:61:A:ILE:N	1:61:A:ILE:CA	1:61:A:ILE:C	1	4.03
(1,228)	1:47:A:GLN:C	1:48:A:GLU:N	1:48:A:GLU:CA	1:48:A:GLU:C	9	4.03
(1,187)	1:36:A:VAL:N	1:36:A:VAL:CA	1:36:A:VAL:CB	1:36:A:VAL:CG1	7	4.03
(1,178)	1:33:A:LEU:N	1:33:A:LEU:CA	1:33:A:LEU:C	1:34:A:SER:N	12	4.02
(1,297)	1:65:A:GLU:N	1:65:A:GLU:CA	1:65:A:GLU:C	1:66:A:LEU:N	3	4.0
(1,236)	1:49:A:LEU:N	1:49:A:LEU:CA	1:49:A:LEU:C	1:50:A:LEU:N	8	4.0
(1,176)	1:32:A:GLY:CA	1:32:A:GLY:C	1:33:A:LEU:N	1:33:A:LEU:CA	10	3.97
(1,138)	1:21:A:LYS:C	1:22:A:ILE:N	1:22:A:ILE:CA	1:22:A:ILE:C	5	3.97
(1,118)	1:17:A:ASP:N	1:17:A:ASP:CA	1:17:A:ASP:CB	1:17:A:ASP:CG	12	3.97
(1,250)	1:53:A:TYR:C	1:54:A:ASP:N	1:54:A:ASP:CA	1:54:A:ASP:C	7	3.96
(1,173)	1:31:A:PRO:CA	1:31:A:PRO:C	1:32:A:GLY:N	1:32:A:GLY:CA	4	3.96
(1,157)	1:26:A:GLU:N	1:26:A:GLU:CA	1:26:A:GLU:C	1:27:A:LEU:N	4	3.96
(1,130)	1:19:A:ASP:C	1:20:A:GLY:N	1:20:A:GLY:CA	1:20:A:GLY:C	9	3.96
(1,66)	1:4:A:GLU:N	1:4:A:GLU:CA	1:4:A:GLU:C	1:5:A:GLN:N	4	3.95
(1,323)	1:72:A:LYS:N	1:72:A:LYS:CA	1:72:A:LYS:CB	1:72:A:LYS:CG	10	3.94
(1,290)	1:63:A:PHE:CA	1:63:A:PHE:C	1:64:A:GLU:N	1:64:A:GLU:CA	4	3.94
(1,181)	1:34:A:SER:N	1:34:A:SER:CA	1:34:A:SER:C	1:35:A:ALA:N	11	3.94
(1,60)	1:2:A:ALA:C	1:3:A:THR:N	1:3:A:THR:CA	1:3:A:THR:C	12	3.92
(1,173)	1:31:A:PRO:CA	1:31:A:PRO:C	1:32:A:GLY:N	1:32:A:GLY:CA	11	3.91
(1,168)	1:29:A:LEU:N	1:29:A:LEU:CA	1:29:A:LEU:C	1:30:A:SER:N	6	3.91
(1,28)	1:-10:A:HIS:CA	1:-10:A:HIS:C	1:-9:A:SER:N	1:-9:A:SER:CA	7	3.91
(1,284)	1:61:A:ILE:C	1:62:A:THR:N	1:62:A:THR:CA	1:62:A:THR:C	8	3.9
(1,310)	1:68:A:LYS:CA	1:68:A:LYS:C	1:69:A:ALA:N	1:69:A:ALA:CA	10	3.89
(1,190)	1:36:A:VAL:C	1:37:A:ILE:N	1:37:A:ILE:CA	1:37:A:ILE:C	5	3.89
(1,142)	1:22:A:ILE:CA	1:22:A:ILE:C	1:23:A:SER:N	1:23:A:SER:CA	10	3.88
(1,38)	1:-6:A:LEU:CA	1:-6:A:LEU:C	1:-5:A:VAL:N	1:-5:A:VAL:CA	10	3.88
(1,317)	1:70:A:VAL:CA	1:70:A:VAL:C	1:71:A:LYS:N	1:71:A:LYS:CA	1	3.87
(1,237)	1:49:A:LEU:CA	1:49:A:LEU:C	1:50:A:LEU:N	1:50:A:LEU:CA	5	3.87
(1,153)	1:25:A:ASN:CA	1:25:A:ASN:C	1:26:A:GLU:N	1:26:A:GLU:CA	7	3.87
(1,54)	1:0:A:HIS:CA	1:0:A:HIS:C	1:1:A:MET:N	1:1:A:MET:CA	11	3.87
(1,294)	1:64:A:GLU:C	1:65:A:GLU:N	1:65:A:GLU:CA	1:65:A:GLU:C	11	3.86
(1,225)	1:47:A:GLN:N	1:47:A:GLN:CA	1:47:A:GLN:CB	1:47:A:GLN:CG	11	3.86
(1,326)	1:72:A:LYS:CA	1:72:A:LYS:C	1:73:A:ALA:N	1:73:A:ALA:CA	2	3.84

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,119)	1:17:A:ASP:CA	1:17:A:ASP:CB	1:17:A:ASP:CG	1:17:A:ASP:OD1	9	3.84
(1,238)	1:49:A:LEU:C	1:50:A:LEU:N	1:50:A:LEU:CA	1:50:A:LEU:C	12	3.83
(1,324)	1:72:A:LYS:CA	1:72:A:LYS:CB	1:72:A:LYS:CG	1:72:A:LYS:CD	9	3.82
(1,169)	1:29:A:LEU:CA	1:29:A:LEU:C	1:30:A:SER:N	1:30:A:SER:CA	3	3.82
(1,277)	1:60:A:SER:N	1:60:A:SER:CA	1:60:A:SER:C	1:61:A:ILE:N	1	3.81
(1,106)	1:14:A:LEU:CA	1:14:A:LEU:C	1:15:A:ASP:N	1:15:A:ASP:CA	9	3.81
(1,100)	1:13:A:THR:N	1:13:A:THR:CA	1:13:A:THR:CB	1:13:A:THR:OG1	11	3.81
(1,247)	1:52:A:GLN:CA	1:52:A:GLN:C	1:53:A:TYR:N	1:53:A:TYR:CA	6	3.8
(1,225)	1:47:A:GLN:N	1:47:A:GLN:CA	1:47:A:GLN:CB	1:47:A:GLN:CG	8	3.79
(1,326)	1:72:A:LYS:CA	1:72:A:LYS:C	1:73:A:ALA:N	1:73:A:ALA:CA	7	3.78
(1,169)	1:29:A:LEU:CA	1:29:A:LEU:C	1:30:A:SER:N	1:30:A:SER:CA	10	3.78
(1,98)	1:12:A:ASN:CA	1:12:A:ASN:C	1:13:A:THR:N	1:13:A:THR:CA	5	3.78
(1,150)	1:24:A:ILE:CA	1:24:A:ILE:C	1:25:A:ASN:N	1:25:A:ASN:CA	8	3.77
(1,274)	1:59:A:GLY:CA	1:59:A:GLY:C	1:60:A:SER:N	1:60:A:SER:CA	11	3.76
(1,183)	1:34:A:SER:C	1:35:A:ALA:N	1:35:A:ALA:CA	1:35:A:ALA:C	1	3.76
(1,102)	1:13:A:THR:CA	1:13:A:THR:C	1:14:A:LEU:N	1:14:A:LEU:CA	12	3.76
(1,330)	1:74:A:SER:CA	1:74:A:SER:C	1:75:A:ASN:N	1:75:A:ASN:CA	11	3.74
(1,175)	1:32:A:GLY:N	1:32:A:GLY:CA	1:32:A:GLY:C	1:33:A:LEU:N	6	3.73
(1,57)	1:1:A:MET:CA	1:1:A:MET:C	1:2:A:ALA:N	1:2:A:ALA:CA	5	3.73
(1,326)	1:72:A:LYS:CA	1:72:A:LYS:C	1:73:A:ALA:N	1:73:A:ALA:CA	3	3.72
(1,285)	1:62:A:THR:N	1:62:A:THR:CA	1:62:A:THR:C	1:63:A:PHE:N	2	3.71
(1,255)	1:54:A:ASP:C	1:55:A:SER:N	1:55:A:SER:CA	1:55:A:SER:C	11	3.71
(1,294)	1:64:A:GLU:C	1:65:A:GLU:N	1:65:A:GLU:CA	1:65:A:GLU:C	12	3.7
(1,320)	1:71:A:LYS:N	1:71:A:LYS:CA	1:71:A:LYS:C	1:72:A:LYS:N	2	3.69
(1,272)	1:58:A:ASP:C	1:59:A:GLY:N	1:59:A:GLY:CA	1:59:A:GLY:C	9	3.69
(1,252)	1:54:A:ASP:CA	1:54:A:ASP:CB	1:54:A:ASP:CG	1:54:A:ASP:OD1	11	3.68
(1,189)	1:36:A:VAL:CA	1:36:A:VAL:C	1:37:A:ILE:N	1:37:A:ILE:CA	7	3.67
(1,148)	1:24:A:ILE:CA	1:24:A:ILE:CB	1:24:A:ILE:CG1	1:24:A:ILE:CD1	11	3.67
(1,89)	1:10:A:LEU:N	1:10:A:LEU:CA	1:10:A:LEU:C	1:11:A:PHE:N	8	3.66
(1,225)	1:47:A:GLN:N	1:47:A:GLN:CA	1:47:A:GLN:CB	1:47:A:GLN:CG	12	3.65
(1,279)	1:60:A:SER:C	1:61:A:ILE:N	1:61:A:ILE:CA	1:61:A:ILE:C	6	3.64
(1,125)	1:18:A:GLN:C	1:19:A:ASP:N	1:19:A:ASP:CA	1:19:A:ASP:C	9	3.63
(1,290)	1:63:A:PHE:CA	1:63:A:PHE:C	1:64:A:GLU:N	1:64:A:GLU:CA	11	3.62
(1,121)	1:17:A:ASP:CA	1:17:A:ASP:C	1:18:A:GLN:N	1:18:A:GLN:CA	1	3.62
(1,272)	1:58:A:ASP:C	1:59:A:GLY:N	1:59:A:GLY:CA	1:59:A:GLY:C	8	3.61
(1,304)	1:66:A:LEU:C	1:67:A:LYS:N	1:67:A:LYS:CA	1:67:A:LYS:C	5	3.59
(1,254)	1:54:A:ASP:CA	1:54:A:ASP:C	1:55:A:SER:N	1:55:A:SER:CA	8	3.59
(1,6)	1:-16:A:SER:CA	1:-16:A:SER:C	1:-15:A:HIS:N	1:-15:A:HIS:CA	6	3.59
(1,301)	1:66:A:LEU:CA	1:66:A:LEU:CB	1:66:A:LEU:CG	1:66:A:LEU:CD1	12	3.58
(1,230)	1:48:A:GLU:CA	1:48:A:GLU:CB	1:48:A:GLU:CG	1:48:A:GLU:CD	3	3.58
(1,294)	1:64:A:GLU:C	1:65:A:GLU:N	1:65:A:GLU:CA	1:65:A:GLU:C	8	3.57
(1,227)	1:47:A:GLN:CA	1:47:A:GLN:C	1:48:A:GLU:N	1:48:A:GLU:CA	8	3.56
(1,146)	1:23:A:SER:C	1:24:A:ILE:N	1:24:A:ILE:CA	1:24:A:ILE:C	4	3.55
(1,72)	1:5:A:GLN:C	1:6:A:GLU:N	1:6:A:GLU:CA	1:6:A:GLU:C	3	3.55
(1,263)	1:56:A:ASP:CA	1:56:A:ASP:C	1:57:A:GLN:N	1:57:A:GLN:CA	12	3.54
(1,70)	1:5:A:GLN:N	1:5:A:GLN:CA	1:5:A:GLN:C	1:6:A:GLU:N	1	3.54
(1,309)	1:68:A:LYS:N	1:68:A:LYS:CA	1:68:A:LYS:C	1:69:A:ALA:N	5	3.53
(1,254)	1:54:A:ASP:CA	1:54:A:ASP:C	1:55:A:SER:N	1:55:A:SER:CA	9	3.53
(1,228)	1:47:A:GLN:C	1:48:A:GLU:N	1:48:A:GLU:CA	1:48:A:GLU:C	5	3.53
(1,300)	1:66:A:LEU:N	1:66:A:LEU:CA	1:66:A:LEU:CB	1:66:A:LEU:CG	11	3.52
(1,212)	1:42:A:ASN:C	1:43:A:THR:N	1:43:A:THR:CA	1:43:A:THR:C	9	3.52

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,105)	1:14:A:LEU:N	1:14:A:LEU:CA	1:14:A:LEU:C	1:15:A:ASP:N	11	3.51
(1,272)	1:58:A:ASP:C	1:59:A:GLY:N	1:59:A:GLY:CA	1:59:A:GLY:C	3	3.49
(1,239)	1:50:A:LEU:N	1:50:A:LEU:CA	1:50:A:LEU:C	1:51:A:VAL:N	8	3.49
(1,179)	1:33:A:LEU:CA	1:33:A:LEU:C	1:34:A:SER:N	1:34:A:SER:CA	3	3.49
(1,78)	1:7:A:LEU:CA	1:7:A:LEU:C	1:8:A:GLN:N	1:8:A:GLN:CA	2	3.48
(1,170)	1:29:A:LEU:C	1:30:A:SER:N	1:30:A:SER:CA	1:30:A:SER:C	6	3.47
(1,156)	1:26:A:GLU:CA	1:26:A:GLU:CB	1:26:A:GLU:CG	1:26:A:GLU:CD	2	3.47
(1,80)	1:8:A:GLN:CA	1:8:A:GLN:CB	1:8:A:GLN:CG	1:8:A:GLN:CD	3	3.47
(1,145)	1:23:A:SER:CA	1:23:A:SER:C	1:24:A:ILE:N	1:24:A:ILE:CA	7	3.46
(1,145)	1:23:A:SER:CA	1:23:A:SER:C	1:24:A:ILE:N	1:24:A:ILE:CA	12	3.46
(1,130)	1:19:A:ASP:C	1:20:A:GLY:N	1:20:A:GLY:CA	1:20:A:GLY:C	11	3.46
(1,141)	1:22:A:ILE:N	1:22:A:ILE:CA	1:22:A:ILE:C	1:23:A:SER:N	4	3.45
(1,224)	1:46:A:PRO:C	1:47:A:GLN:N	1:47:A:GLN:CA	1:47:A:GLN:C	5	3.43
(1,190)	1:36:A:VAL:C	1:37:A:ILE:N	1:37:A:ILE:CA	1:37:A:ILE:C	12	3.43
(1,138)	1:21:A:LYS:C	1:22:A:ILE:N	1:22:A:ILE:CA	1:22:A:ILE:C	9	3.43
(1,321)	1:71:A:LYS:CA	1:71:A:LYS:C	1:72:A:LYS:N	1:72:A:LYS:CA	6	3.42
(1,260)	1:56:A:ASP:N	1:56:A:ASP:CA	1:56:A:ASP:CB	1:56:A:ASP:CG	1	3.41
(1,59)	1:2:A:ALA:CA	1:2:A:ALA:C	1:3:A:THR:N	1:3:A:THR:CA	2	3.41
(1,230)	1:48:A:GLU:CA	1:48:A:GLU:CB	1:48:A:GLU:CG	1:48:A:GLU:CD	6	3.4
(1,278)	1:60:A:SER:CA	1:60:A:SER:C	1:61:A:ILE:N	1:61:A:ILE:CA	12	3.39
(1,81)	1:8:A:GLN:N	1:8:A:GLN:CA	1:8:A:GLN:C	1:9:A:SER:N	11	3.38
(1,326)	1:72:A:LYS:CA	1:72:A:LYS:C	1:73:A:ALA:N	1:73:A:ALA:CA	4	3.37
(1,72)	1:5:A:GLN:C	1:6:A:GLU:N	1:6:A:GLU:CA	1:6:A:GLU:C	2	3.37
(1,56)	1:1:A:MET:N	1:1:A:MET:CA	1:1:A:MET:C	1:2:A:ALA:N	7	3.37
(1,310)	1:68:A:LYS:CA	1:68:A:LYS:C	1:69:A:ALA:N	1:69:A:ALA:CA	4	3.34
(1,254)	1:54:A:ASP:CA	1:54:A:ASP:C	1:55:A:SER:N	1:55:A:SER:CA	7	3.34
(1,195)	1:37:A:ILE:C	1:38:A:SER:N	1:38:A:SER:CA	1:38:A:SER:C	7	3.34
(1,309)	1:68:A:LYS:N	1:68:A:LYS:CA	1:68:A:LYS:C	1:69:A:ALA:N	8	3.33
(1,187)	1:36:A:VAL:N	1:36:A:VAL:CA	1:36:A:VAL:CB	1:36:A:VAL:CG1	12	3.33
(1,303)	1:66:A:LEU:CA	1:66:A:LEU:C	1:67:A:LYS:N	1:67:A:LYS:CA	1	3.32
(1,227)	1:47:A:GLN:CA	1:47:A:GLN:C	1:48:A:GLU:N	1:48:A:GLU:CA	2	3.32
(1,189)	1:36:A:VAL:CA	1:36:A:VAL:C	1:37:A:ILE:N	1:37:A:ILE:CA	6	3.32
(1,74)	1:6:A:GLU:N	1:6:A:GLU:CA	1:6:A:GLU:C	1:7:A:LEU:N	6	3.32
(1,292)	1:64:A:GLU:N	1:64:A:GLU:CA	1:64:A:GLU:C	1:65:A:GLU:N	8	3.3
(1,86)	1:9:A:SER:CA	1:9:A:SER:C	1:10:A:LEU:N	1:10:A:LEU:CA	4	3.3
(1,75)	1:6:A:GLU:CA	1:6:A:GLU:C	1:7:A:LEU:N	1:7:A:LEU:CA	7	3.3
(1,251)	1:54:A:ASP:N	1:54:A:ASP:CA	1:54:A:ASP:CB	1:54:A:ASP:CG	8	3.29
(1,120)	1:17:A:ASP:N	1:17:A:ASP:CA	1:17:A:ASP:C	1:18:A:GLN:N	4	3.28
(1,298)	1:65:A:GLU:CA	1:65:A:GLU:C	1:66:A:LEU:N	1:66:A:LEU:CA	7	3.25
(1,272)	1:58:A:ASP:C	1:59:A:GLY:N	1:59:A:GLY:CA	1:59:A:GLY:C	6	3.25
(1,121)	1:17:A:ASP:CA	1:17:A:ASP:C	1:18:A:GLN:N	1:18:A:GLN:CA	3	3.25
(1,116)	1:16:A:ARG:CA	1:16:A:ARG:C	1:17:A:ASP:N	1:17:A:ASP:CA	1	3.25
(1,317)	1:70:A:VAL:CA	1:70:A:VAL:C	1:71:A:LYS:N	1:71:A:LYS:CA	5	3.24
(1,268)	1:58:A:ASP:N	1:58:A:ASP:CA	1:58:A:ASP:CB	1:58:A:ASP:CG	7	3.24
(1,206)	1:40:A:GLU:C	1:41:A:THR:N	1:41:A:THR:CA	1:41:A:THR:C	7	3.24
(1,38)	1:-6:A:LEU:CA	1:-6:A:LEU:C	1:-5:A:VAL:N	1:-5:A:VAL:CA	2	3.24
(1,226)	1:47:A:GLN:N	1:47:A:GLN:CA	1:47:A:GLN:C	1:48:A:GLU:N	7	3.23
(1,202)	1:39:A:SER:C	1:40:A:GLU:N	1:40:A:GLU:CA	1:40:A:GLU:C	7	3.22
(1,188)	1:36:A:VAL:N	1:36:A:VAL:CA	1:36:A:VAL:C	1:37:A:ILE:N	11	3.22
(1,257)	1:55:A:SER:N	1:55:A:SER:CA	1:55:A:SER:C	1:56:A:ASP:N	11	3.21
(1,77)	1:7:A:LEU:N	1:7:A:LEU:CA	1:7:A:LEU:C	1:8:A:GLN:N	12	3.21

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,140)	1:22:A:ILE:CA	1:22:A:ILE:CB	1:22:A:ILE:CG1	1:22:A:ILE:CD1	5	3.2
(1,139)	1:22:A:ILE:N	1:22:A:ILE:CA	1:22:A:ILE:CB	1:22:A:ILE:CG1	3	3.2
(1,85)	1:9:A:SER:N	1:9:A:SER:CA	1:9:A:SER:C	1:10:A:LEU:N	2	3.2
(1,87)	1:9:A:SER:C	1:10:A:LEU:N	1:10:A:LEU:CA	1:10:A:LEU:C	5	3.19
(1,330)	1:74:A:SER:CA	1:74:A:SER:C	1:75:A:ASN:N	1:75:A:ASN:CA	4	3.18
(1,305)	1:67:A:LYS:CA	1:67:A:LYS:CB	1:67:A:LYS:CG	1:67:A:LYS:CD	1	3.17
(1,294)	1:64:A:GLU:C	1:65:A:GLU:N	1:65:A:GLU:CA	1:65:A:GLU:C	2	3.17
(1,228)	1:47:A:GLN:C	1:48:A:GLU:N	1:48:A:GLU:CA	1:48:A:GLU:C	1	3.17
(1,157)	1:26:A:GLU:N	1:26:A:GLU:CA	1:26:A:GLU:C	1:27:A:LEU:N	2	3.16
(1,33)	1:-8:A:SER:N	1:-8:A:SER:CA	1:-8:A:SER:C	1:-7:A:GLY:N	5	3.16
(1,324)	1:72:A:LYS:CA	1:72:A:LYS:CB	1:72:A:LYS:CG	1:72:A:LYS:CD	8	3.15
(1,201)	1:39:A:SER:CA	1:39:A:SER:C	1:40:A:GLU:N	1:40:A:GLU:CA	7	3.15
(1,205)	1:40:A:GLU:CA	1:40:A:GLU:C	1:41:A:THR:N	1:41:A:THR:CA	10	3.14
(1,120)	1:17:A:ASP:N	1:17:A:ASP:CA	1:17:A:ASP:C	1:18:A:GLN:N	2	3.14
(1,310)	1:68:A:LYS:CA	1:68:A:LYS:C	1:69:A:ALA:N	1:69:A:ALA:CA	2	3.13
(1,233)	1:48:A:GLU:C	1:49:A:LEU:N	1:49:A:LEU:CA	1:49:A:LEU:C	5	3.13
(1,91)	1:10:A:LEU:C	1:11:A:PHE:N	1:11:A:PHE:CA	1:11:A:PHE:C	9	3.13
(1,177)	1:32:A:GLY:C	1:33:A:LEU:N	1:33:A:LEU:CA	1:33:A:LEU:C	11	3.12
(1,205)	1:40:A:GLU:CA	1:40:A:GLU:C	1:41:A:THR:N	1:41:A:THR:CA	11	3.11
(1,176)	1:32:A:GLY:CA	1:32:A:GLY:C	1:33:A:LEU:N	1:33:A:LEU:CA	2	3.11
(1,175)	1:32:A:GLY:N	1:32:A:GLY:CA	1:32:A:GLY:C	1:33:A:LEU:N	12	3.11
(1,308)	1:67:A:LYS:C	1:68:A:LYS:N	1:68:A:LYS:CA	1:68:A:LYS:C	3	3.1
(1,317)	1:70:A:VAL:CA	1:70:A:VAL:C	1:71:A:LYS:N	1:71:A:LYS:CA	11	3.07
(1,86)	1:9:A:SER:CA	1:9:A:SER:C	1:10:A:LEU:N	1:10:A:LEU:CA	1	3.07
(1,321)	1:71:A:LYS:CA	1:71:A:LYS:C	1:72:A:LYS:N	1:72:A:LYS:CA	9	3.06
(1,226)	1:47:A:GLN:N	1:47:A:GLN:CA	1:47:A:GLN:C	1:48:A:GLU:N	6	3.06
(1,182)	1:34:A:SER:CA	1:34:A:SER:C	1:35:A:ALA:N	1:35:A:ALA:CA	9	3.05
(1,146)	1:23:A:SER:C	1:24:A:ILE:N	1:24:A:ILE:CA	1:24:A:ILE:C	6	3.04
(1,206)	1:40:A:GLU:C	1:41:A:THR:N	1:41:A:THR:CA	1:41:A:THR:C	8	3.02
(1,158)	1:26:A:GLU:CA	1:26:A:GLU:C	1:27:A:LEU:N	1:27:A:LEU:CA	12	3.01
(1,152)	1:25:A:ASN:N	1:25:A:ASN:CA	1:25:A:ASN:C	1:26:A:GLU:N	11	3.0
(1,133)	1:20:A:GLY:C	1:21:A:LYS:N	1:21:A:LYS:CA	1:21:A:LYS:C	1	3.0
(1,103)	1:13:A:THR:C	1:14:A:LEU:N	1:14:A:LEU:CA	1:14:A:LEU:C	2	3.0
(1,280)	1:61:A:ILE:N	1:61:A:ILE:CA	1:61:A:ILE:CB	1:61:A:ILE:CG1	11	2.99
(1,74)	1:6:A:GLU:N	1:6:A:GLU:CA	1:6:A:GLU:C	1:7:A:LEU:N	10	2.98
(1,60)	1:2:A:ALA:C	1:3:A:THR:N	1:3:A:THR:CA	1:3:A:THR:C	5	2.98
(1,299)	1:65:A:GLU:C	1:66:A:LEU:N	1:66:A:LEU:CA	1:66:A:LEU:C	2	2.97
(1,286)	1:62:A:THR:CA	1:62:A:THR:C	1:63:A:PHE:N	1:63:A:PHE:CA	10	2.97
(1,139)	1:22:A:ILE:N	1:22:A:ILE:CA	1:22:A:ILE:CB	1:22:A:ILE:CG1	7	2.96
(1,136)	1:21:A:LYS:N	1:21:A:LYS:CA	1:21:A:LYS:C	1:22:A:ILE:N	12	2.96
(1,103)	1:13:A:THR:C	1:14:A:LEU:N	1:14:A:LEU:CA	1:14:A:LEU:C	1	2.96
(1,159)	1:26:A:GLU:C	1:27:A:LEU:N	1:27:A:LEU:CA	1:27:A:LEU:C	6	2.94
(1,241)	1:50:A:LEU:C	1:51:A:VAL:N	1:51:A:VAL:CA	1:51:A:VAL:C	10	2.93
(1,76)	1:6:A:GLU:C	1:7:A:LEU:N	1:7:A:LEU:CA	1:7:A:LEU:C	6	2.93
(1,184)	1:35:A:ALA:N	1:35:A:ALA:CA	1:35:A:ALA:C	1:36:A:VAL:N	2	2.92
(1,92)	1:11:A:PHE:N	1:11:A:PHE:CA	1:11:A:PHE:CB	1:11:A:PHE:CG	6	2.92
(1,176)	1:32:A:GLY:CA	1:32:A:GLY:C	1:33:A:LEU:N	1:33:A:LEU:CA	3	2.91
(1,293)	1:64:A:GLU:CA	1:64:A:GLU:C	1:65:A:GLU:N	1:65:A:GLU:CA	8	2.9
(1,224)	1:46:A:PRO:C	1:47:A:GLN:N	1:47:A:GLN:CA	1:47:A:GLN:C	12	2.9
(1,268)	1:58:A:ASP:N	1:58:A:ASP:CA	1:58:A:ASP:CB	1:58:A:ASP:CG	5	2.89
(1,170)	1:29:A:LEU:C	1:30:A:SER:N	1:30:A:SER:CA	1:30:A:SER:C	9	2.89

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,314)	1:69:A:ALA:C	1:70:A:VAL:N	1:70:A:VAL:CA	1:70:A:VAL:C	12	2.88
(1,81)	1:8:A:GLN:N	1:8:A:GLN:CA	1:8:A:GLN:C	1:9:A:SER:N	2	2.88
(1,70)	1:5:A:GLN:N	1:5:A:GLN:CA	1:5:A:GLN:C	1:6:A:GLU:N	12	2.88
(1,230)	1:48:A:GLU:CA	1:48:A:GLU:CB	1:48:A:GLU:CG	1:48:A:GLU:CD	1	2.87
(1,75)	1:6:A:GLU:CA	1:6:A:GLU:C	1:7:A:LEU:N	1:7:A:LEU:CA	3	2.87
(1,63)	1:3:A:THR:C	1:4:A:GLU:N	1:4:A:GLU:CA	1:4:A:GLU:C	2	2.87
(1,108)	1:15:A:ASP:N	1:15:A:ASP:CA	1:15:A:ASP:CB	1:15:A:ASP:CG	7	2.86
(1,284)	1:61:A:ILE:C	1:62:A:THR:N	1:62:A:THR:CA	1:62:A:THR:C	12	2.84
(1,21)	1:-12:A:HIS:CA	1:-12:A:HIS:C	1:-11:A:HIS:N	1:-11:A:HIS:CA	3	2.83
(1,304)	1:66:A:LEU:C	1:67:A:LYS:N	1:67:A:LYS:CA	1:67:A:LYS:C	4	2.82
(1,267)	1:57:A:GLN:C	1:58:A:ASP:N	1:58:A:ASP:CA	1:58:A:ASP:C	4	2.82
(1,103)	1:13:A:THR:C	1:14:A:LEU:N	1:14:A:LEU:CA	1:14:A:LEU:C	6	2.82
(1,241)	1:50:A:LEU:C	1:51:A:VAL:N	1:51:A:VAL:CA	1:51:A:VAL:C	5	2.81
(1,195)	1:37:A:ILE:C	1:38:A:SER:N	1:38:A:SER:CA	1:38:A:SER:C	8	2.81
(1,89)	1:10:A:LEU:N	1:10:A:LEU:CA	1:10:A:LEU:C	1:11:A:PHE:N	12	2.81
(1,278)	1:60:A:SER:CA	1:60:A:SER:C	1:61:A:ILE:N	1:61:A:ILE:CA	6	2.8
(1,321)	1:71:A:LYS:CA	1:71:A:LYS:C	1:72:A:LYS:N	1:72:A:LYS:CA	8	2.79
(1,200)	1:39:A:SER:N	1:39:A:SER:CA	1:39:A:SER:C	1:40:A:GLU:N	3	2.78
(1,187)	1:36:A:VAL:N	1:36:A:VAL:CA	1:36:A:VAL:CB	1:36:A:VAL:CG1	9	2.78
(1,153)	1:25:A:ASN:CA	1:25:A:ASN:C	1:26:A:GLU:N	1:26:A:GLU:CA	9	2.78
(1,109)	1:15:A:ASP:CA	1:15:A:ASP:CB	1:15:A:ASP:CG	1:15:A:ASP:OD1	4	2.78
(1,41)	1:-5:A:VAL:CA	1:-5:A:VAL:C	1:-4:A:PRO:N	1:-4:A:PRO:CA	8	2.78
(1,279)	1:60:A:SER:C	1:61:A:ILE:N	1:61:A:ILE:CA	1:61:A:ILE:C	3	2.77
(1,182)	1:34:A:SER:CA	1:34:A:SER:C	1:35:A:ALA:N	1:35:A:ALA:CA	3	2.76
(1,152)	1:25:A:ASN:N	1:25:A:ASN:CA	1:25:A:ASN:C	1:26:A:GLU:N	12	2.76
(1,131)	1:20:A:GLY:N	1:20:A:GLY:CA	1:20:A:GLY:C	1:21:A:LYS:N	10	2.76
(1,312)	1:69:A:ALA:N	1:69:A:ALA:CA	1:69:A:ALA:C	1:70:A:VAL:N	12	2.74
(1,233)	1:48:A:GLU:C	1:49:A:LEU:N	1:49:A:LEU:CA	1:49:A:LEU:C	2	2.74
(1,207)	1:41:A:THR:N	1:41:A:THR:CA	1:41:A:THR:C	1:42:A:ASN:N	5	2.74
(1,195)	1:37:A:ILE:C	1:38:A:SER:N	1:38:A:SER:CA	1:38:A:SER:C	5	2.74
(1,160)	1:27:A:LEU:N	1:27:A:LEU:CA	1:27:A:LEU:C	1:28:A:PHE:N	1	2.73
(1,131)	1:20:A:GLY:N	1:20:A:GLY:CA	1:20:A:GLY:C	1:21:A:LYS:N	4	2.73
(1,322)	1:71:A:LYS:C	1:72:A:LYS:N	1:72:A:LYS:CA	1:72:A:LYS:C	5	2.72
(1,261)	1:56:A:ASP:CA	1:56:A:ASP:CB	1:56:A:ASP:CG	1:56:A:ASP:OD1	9	2.72
(1,79)	1:7:A:LEU:C	1:8:A:GLN:N	1:8:A:GLN:CA	1:8:A:GLN:C	6	2.72
(1,250)	1:53:A:TYR:C	1:54:A:ASP:N	1:54:A:ASP:CA	1:54:A:ASP:C	3	2.71
(1,226)	1:47:A:GLN:N	1:47:A:GLN:CA	1:47:A:GLN:C	1:48:A:GLU:N	10	2.71
(1,189)	1:36:A:VAL:CA	1:36:A:VAL:C	1:37:A:ILE:N	1:37:A:ILE:CA	9	2.71
(1,114)	1:16:A:ARG:CA	1:16:A:ARG:CB	1:16:A:ARG:CG	1:16:A:ARG:CD	7	2.71
(1,86)	1:9:A:SER:CA	1:9:A:SER:C	1:10:A:LEU:N	1:10:A:LEU:CA	6	2.71
(1,311)	1:68:A:LYS:C	1:69:A:ALA:N	1:69:A:ALA:CA	1:69:A:ALA:C	10	2.7
(1,302)	1:66:A:LEU:N	1:66:A:LEU:CA	1:66:A:LEU:C	1:67:A:LYS:N	5	2.7
(1,176)	1:32:A:GLY:CA	1:32:A:GLY:C	1:33:A:LEU:N	1:33:A:LEU:CA	4	2.69
(1,52)	1:-1:A:SER:CA	1:-1:A:SER:C	1:0:A:HIS:N	1:0:A:HIS:CA	11	2.69
(1,192)	1:37:A:ILE:CA	1:37:A:ILE:CB	1:37:A:ILE:CG1	1:37:A:ILE:CD1	4	2.67
(1,181)	1:34:A:SER:N	1:34:A:SER:CA	1:34:A:SER:C	1:35:A:ALA:N	6	2.67
(1,137)	1:21:A:LYS:CA	1:21:A:LYS:C	1:22:A:ILE:N	1:22:A:ILE:CA	11	2.67
(1,214)	1:43:A:THR:N	1:43:A:THR:CA	1:43:A:THR:C	1:44:A:ASN:N	8	2.66
(1,202)	1:39:A:SER:C	1:40:A:GLU:N	1:40:A:GLU:CA	1:40:A:GLU:C	8	2.64
(1,296)	1:65:A:GLU:CA	1:65:A:GLU:CB	1:65:A:GLU:CG	1:65:A:GLU:CD	10	2.63
(1,336)	1:76:A:LEU:CA	1:76:A:LEU:C	1:77:A:THR:N	1:77:A:THR:CA	9	2.61

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,162)	1:27:A:LEU:C	1:28:A:PHE:N	1:28:A:PHE:CA	1:28:A:PHE:C	9	2.61
(1,151)	1:24:A:ILE:C	1:25:A:ASN:N	1:25:A:ASN:CA	1:25:A:ASN:C	11	2.61
(1,314)	1:69:A:ALA:C	1:70:A:VAL:N	1:70:A:VAL:CA	1:70:A:VAL:C	6	2.6
(1,86)	1:9:A:SER:CA	1:9:A:SER:C	1:10:A:LEU:N	1:10:A:LEU:CA	12	2.6
(1,306)	1:67:A:LYS:N	1:67:A:LYS:CA	1:67:A:LYS:C	1:68:A:LYS:N	6	2.59
(1,258)	1:55:A:SER:CA	1:55:A:SER:C	1:56:A:ASP:N	1:56:A:ASP:CA	5	2.58
(1,226)	1:47:A:GLN:N	1:47:A:GLN:CA	1:47:A:GLN:C	1:48:A:GLU:N	5	2.58
(1,260)	1:56:A:ASP:N	1:56:A:ASP:CA	1:56:A:ASP:CB	1:56:A:ASP:CG	11	2.56
(1,227)	1:47:A:GLN:CA	1:47:A:GLN:C	1:48:A:GLU:N	1:48:A:GLU:CA	4	2.56
(1,173)	1:31:A:PRO:CA	1:31:A:PRO:C	1:32:A:GLY:N	1:32:A:GLY:CA	12	2.56
(1,196)	1:38:A:SER:N	1:38:A:SER:CA	1:38:A:SER:C	1:39:A:SER:N	5	2.55
(1,157)	1:26:A:GLU:N	1:26:A:GLU:CA	1:26:A:GLU:C	1:27:A:LEU:N	6	2.55
(1,149)	1:24:A:ILE:N	1:24:A:ILE:CA	1:24:A:ILE:C	1:25:A:ASN:N	10	2.55
(1,44)	1:-3:A:ARG:CA	1:-3:A:ARG:CB	1:-3:A:ARG:CG	1:-3:A:ARG:CD	12	2.55
(1,296)	1:65:A:GLU:CA	1:65:A:GLU:CB	1:65:A:GLU:CG	1:65:A:GLU:CD	5	2.54
(1,199)	1:39:A:SER:N	1:39:A:SER:CA	1:39:A:SER:CB	1:39:A:SER:OG	8	2.54
(1,277)	1:60:A:SER:N	1:60:A:SER:CA	1:60:A:SER:C	1:61:A:ILE:N	11	2.53
(1,228)	1:47:A:GLN:C	1:48:A:GLU:N	1:48:A:GLU:CA	1:48:A:GLU:C	12	2.53
(1,262)	1:56:A:ASP:N	1:56:A:ASP:CA	1:56:A:ASP:C	1:57:A:GLN:N	7	2.52
(1,251)	1:54:A:ASP:N	1:54:A:ASP:CA	1:54:A:ASP:CB	1:54:A:ASP:CG	5	2.52
(1,194)	1:37:A:ILE:CA	1:37:A:ILE:C	1:38:A:SER:N	1:38:A:SER:CA	9	2.52
(1,185)	1:35:A:ALA:CA	1:35:A:ALA:C	1:36:A:VAL:N	1:36:A:VAL:CA	7	2.51
(1,185)	1:35:A:ALA:CA	1:35:A:ALA:C	1:36:A:VAL:N	1:36:A:VAL:CA	10	2.51
(1,172)	1:30:A:SER:CA	1:30:A:SER:C	1:31:A:PRO:N	1:31:A:PRO:CA	7	2.51
(1,194)	1:37:A:ILE:CA	1:37:A:ILE:C	1:38:A:SER:N	1:38:A:SER:CA	7	2.5
(1,152)	1:25:A:ASN:N	1:25:A:ASN:CA	1:25:A:ASN:C	1:26:A:GLU:N	5	2.5
(1,132)	1:20:A:GLY:CA	1:20:A:GLY:C	1:21:A:LYS:N	1:21:A:LYS:CA	2	2.5
(1,52)	1:-1:A:SER:CA	1:-1:A:SER:C	1:0:A:HIS:N	1:0:A:HIS:CA	8	2.5
(1,322)	1:71:A:LYS:C	1:72:A:LYS:N	1:72:A:LYS:CA	1:72:A:LYS:C	2	2.48
(1,316)	1:70:A:VAL:N	1:70:A:VAL:CA	1:70:A:VAL:C	1:71:A:LYS:N	2	2.48
(1,142)	1:22:A:ILE:CA	1:22:A:ILE:C	1:23:A:SER:N	1:23:A:SER:CA	2	2.47
(1,239)	1:50:A:LEU:N	1:50:A:LEU:CA	1:50:A:LEU:C	1:51:A:VAL:N	11	2.46
(1,238)	1:49:A:LEU:C	1:50:A:LEU:N	1:50:A:LEU:CA	1:50:A:LEU:C	9	2.46
(1,317)	1:70:A:VAL:CA	1:70:A:VAL:C	1:71:A:LYS:N	1:71:A:LYS:CA	3	2.45
(1,263)	1:56:A:ASP:CA	1:56:A:ASP:C	1:57:A:GLN:N	1:57:A:GLN:CA	5	2.44
(1,187)	1:36:A:VAL:N	1:36:A:VAL:CA	1:36:A:VAL:CB	1:36:A:VAL:CG1	4	2.44
(1,91)	1:10:A:LEU:C	1:11:A:PHE:N	1:11:A:PHE:CA	1:11:A:PHE:C	2	2.44
(1,304)	1:66:A:LEU:C	1:67:A:LYS:N	1:67:A:LYS:CA	1:67:A:LYS:C	6	2.43
(1,221)	1:45:A:SER:CA	1:45:A:SER:C	1:46:A:PRO:N	1:46:A:PRO:CA	4	2.43
(1,195)	1:37:A:ILE:C	1:38:A:SER:N	1:38:A:SER:CA	1:38:A:SER:C	2	2.43
(1,146)	1:23:A:SER:C	1:24:A:ILE:N	1:24:A:ILE:CA	1:24:A:ILE:C	12	2.42
(1,214)	1:43:A:THR:N	1:43:A:THR:CA	1:43:A:THR:C	1:44:A:ASN:N	1	2.41
(1,64)	1:4:A:GLU:N	1:4:A:GLU:CA	1:4:A:GLU:CB	1:4:A:GLU:CG	6	2.41
(1,322)	1:71:A:LYS:C	1:72:A:LYS:N	1:72:A:LYS:CA	1:72:A:LYS:C	6	2.4
(1,197)	1:38:A:SER:CA	1:38:A:SER:C	1:39:A:SER:N	1:39:A:SER:CA	12	2.4
(1,63)	1:3:A:THR:C	1:4:A:GLU:N	1:4:A:GLU:CA	1:4:A:GLU:C	4	2.4
(1,32)	1:-9:A:SER:CA	1:-9:A:SER:C	1:-8:A:SER:N	1:-8:A:SER:CA	4	2.4
(1,21)	1:-12:A:HIS:CA	1:-12:A:HIS:C	1:-11:A:HIS:N	1:-11:A:HIS:CA	10	2.4
(1,237)	1:49:A:LEU:CA	1:49:A:LEU:C	1:50:A:LEU:N	1:50:A:LEU:CA	6	2.39
(1,154)	1:25:A:ASN:C	1:26:A:GLU:N	1:26:A:GLU:CA	1:26:A:GLU:C	10	2.39
(1,108)	1:15:A:ASP:N	1:15:A:ASP:CA	1:15:A:ASP:CB	1:15:A:ASP:CG	3	2.39

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,74)	1:6:A:GLU:N	1:6:A:GLU:CA	1:6:A:GLU:C	1:7:A:LEU:N	11	2.39
(1,67)	1:4:A:GLU:CA	1:4:A:GLU:C	1:5:A:GLN:N	1:5:A:GLN:CA	2	2.39
(1,330)	1:74:A:SER:CA	1:74:A:SER:C	1:75:A:ASN:N	1:75:A:ASN:CA	2	2.37
(1,105)	1:14:A:LEU:N	1:14:A:LEU:CA	1:14:A:LEU:C	1:15:A:ASP:N	7	2.36
(1,90)	1:10:A:LEU:CA	1:10:A:LEU:C	1:11:A:PHE:N	1:11:A:PHE:CA	6	2.36
(1,277)	1:60:A:SER:N	1:60:A:SER:CA	1:60:A:SER:C	1:61:A:ILE:N	2	2.35
(1,260)	1:56:A:ASP:N	1:56:A:ASP:CA	1:56:A:ASP:CB	1:56:A:ASP:CG	6	2.35
(1,100)	1:13:A:THR:N	1:13:A:THR:CA	1:13:A:THR:CB	1:13:A:THR:OG1	6	2.35
(1,40)	1:-5:A:VAL:N	1:-5:A:VAL:CA	1:-5:A:VAL:CB	1:-5:A:VAL:CG1	11	2.35
(1,83)	1:8:A:GLN:C	1:9:A:SER:N	1:9:A:SER:CA	1:9:A:SER:C	6	2.34
(1,58)	1:1:A:MET:C	1:2:A:ALA:N	1:2:A:ALA:CA	1:2:A:ALA:C	5	2.34
(1,297)	1:65:A:GLU:N	1:65:A:GLU:CA	1:65:A:GLU:C	1:66:A:LEU:N	10	2.33
(1,176)	1:32:A:GLY:CA	1:32:A:GLY:C	1:33:A:LEU:N	1:33:A:LEU:CA	12	2.33
(1,156)	1:26:A:GLU:CA	1:26:A:GLU:CB	1:26:A:GLU:CG	1:26:A:GLU:CD	12	2.32
(1,260)	1:56:A:ASP:N	1:56:A:ASP:CA	1:56:A:ASP:CB	1:56:A:ASP:CG	2	2.31
(1,217)	1:44:A:ASN:N	1:44:A:ASN:CA	1:44:A:ASN:C	1:45:A:SER:N	4	2.31
(1,151)	1:24:A:ILE:C	1:25:A:ASN:N	1:25:A:ASN:CA	1:25:A:ASN:C	5	2.31
(1,302)	1:66:A:LEU:N	1:66:A:LEU:CA	1:66:A:LEU:C	1:67:A:LYS:N	10	2.26
(1,281)	1:61:A:ILE:CA	1:61:A:ILE:CB	1:61:A:ILE:CG1	1:61:A:ILE:CD1	2	2.26
(1,263)	1:56:A:ASP:CA	1:56:A:ASP:C	1:57:A:GLN:N	1:57:A:GLN:CA	9	2.26
(1,302)	1:66:A:LEU:N	1:66:A:LEU:CA	1:66:A:LEU:C	1:67:A:LYS:N	8	2.25
(1,172)	1:30:A:SER:CA	1:30:A:SER:C	1:31:A:PRO:N	1:31:A:PRO:CA	12	2.25
(1,111)	1:15:A:ASP:CA	1:15:A:ASP:C	1:16:A:ARG:N	1:16:A:ARG:CA	5	2.25
(1,81)	1:8:A:GLN:N	1:8:A:GLN:CA	1:8:A:GLN:C	1:9:A:SER:N	8	2.24
(1,228)	1:47:A:GLN:C	1:48:A:GLU:N	1:48:A:GLU:CA	1:48:A:GLU:C	7	2.23
(1,227)	1:47:A:GLN:CA	1:47:A:GLN:C	1:48:A:GLU:N	1:48:A:GLU:CA	5	2.23
(1,181)	1:34:A:SER:N	1:34:A:SER:CA	1:34:A:SER:C	1:35:A:ALA:N	10	2.22
(1,95)	1:11:A:PHE:CA	1:11:A:PHE:C	1:12:A:ASN:N	1:12:A:ASN:CA	5	2.22
(1,87)	1:9:A:SER:C	1:10:A:LEU:N	1:10:A:LEU:CA	1:10:A:LEU:C	12	2.22
(1,244)	1:51:A:VAL:CA	1:51:A:VAL:C	1:52:A:GLN:N	1:52:A:GLN:CA	9	2.21
(1,331)	1:74:A:SER:C	1:75:A:ASN:N	1:75:A:ASN:CA	1:75:A:ASN:C	5	2.2
(1,295)	1:65:A:GLU:N	1:65:A:GLU:CA	1:65:A:GLU:CB	1:65:A:GLU:CG	11	2.2
(1,173)	1:31:A:PRO:CA	1:31:A:PRO:C	1:32:A:GLY:N	1:32:A:GLY:CA	8	2.2
(1,291)	1:63:A:PHE:C	1:64:A:GLU:N	1:64:A:GLU:CA	1:64:A:GLU:C	8	2.19
(1,231)	1:48:A:GLU:N	1:48:A:GLU:CA	1:48:A:GLU:C	1:49:A:LEU:N	4	2.19
(1,116)	1:16:A:ARG:CA	1:16:A:ARG:C	1:17:A:ASP:N	1:17:A:ASP:CA	10	2.19
(1,273)	1:59:A:GLY:N	1:59:A:GLY:CA	1:59:A:GLY:C	1:60:A:SER:N	12	2.18
(1,336)	1:76:A:LEU:CA	1:76:A:LEU:C	1:77:A:THR:N	1:77:A:THR:CA	7	2.17
(1,329)	1:73:A:ALA:C	1:74:A:SER:N	1:74:A:SER:CA	1:74:A:SER:C	1	2.17
(1,314)	1:69:A:ALA:C	1:70:A:VAL:N	1:70:A:VAL:CA	1:70:A:VAL:C	7	2.17
(1,242)	1:51:A:VAL:N	1:51:A:VAL:CA	1:51:A:VAL:CB	1:51:A:VAL:CG1	9	2.17
(1,303)	1:66:A:LEU:CA	1:66:A:LEU:C	1:67:A:LYS:N	1:67:A:LYS:CA	8	2.16
(1,161)	1:27:A:LEU:CA	1:27:A:LEU:C	1:28:A:PHE:N	1:28:A:PHE:CA	4	2.16
(1,100)	1:13:A:THR:N	1:13:A:THR:CA	1:13:A:THR:CB	1:13:A:THR:OG1	1	2.15
(1,81)	1:8:A:GLN:N	1:8:A:GLN:CA	1:8:A:GLN:C	1:9:A:SER:N	7	2.15
(1,209)	1:41:A:THR:C	1:42:A:ASN:N	1:42:A:ASN:CA	1:42:A:ASN:C	8	2.14
(1,124)	1:18:A:GLN:CA	1:18:A:GLN:C	1:19:A:ASP:N	1:19:A:ASP:CA	2	2.12
(1,66)	1:4:A:GLU:N	1:4:A:GLU:CA	1:4:A:GLU:C	1:5:A:GLN:N	3	2.12
(1,293)	1:64:A:GLU:CA	1:64:A:GLU:C	1:65:A:GLU:N	1:65:A:GLU:CA	5	2.11
(1,241)	1:50:A:LEU:C	1:51:A:VAL:N	1:51:A:VAL:CA	1:51:A:VAL:C	4	2.11
(1,160)	1:27:A:LEU:N	1:27:A:LEU:CA	1:27:A:LEU:C	1:28:A:PHE:N	3	2.11

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,266)	1:57:A:GLN:CA	1:57:A:GLN:C	1:58:A:ASP:N	1:58:A:ASP:CA	6	2.1
(1,198)	1:38:A:SER:C	1:39:A:SER:N	1:39:A:SER:CA	1:39:A:SER:C	7	2.1
(1,198)	1:38:A:SER:C	1:39:A:SER:N	1:39:A:SER:CA	1:39:A:SER:C	12	2.1
(1,186)	1:35:A:ALA:C	1:36:A:VAL:N	1:36:A:VAL:CA	1:36:A:VAL:C	2	2.09
(1,118)	1:17:A:ASP:N	1:17:A:ASP:CA	1:17:A:ASP:CB	1:17:A:ASP:CG	9	2.09
(1,77)	1:7:A:LEU:N	1:7:A:LEU:CA	1:7:A:LEU:C	1:8:A:GLN:N	11	2.09
(1,309)	1:68:A:LYS:N	1:68:A:LYS:CA	1:68:A:LYS:C	1:69:A:ALA:N	9	2.08
(1,62)	1:3:A:THR:CA	1:3:A:THR:C	1:4:A:GLU:N	1:4:A:GLU:CA	12	2.08
(1,320)	1:71:A:LYS:N	1:71:A:LYS:CA	1:71:A:LYS:C	1:72:A:LYS:N	4	2.07
(1,236)	1:49:A:LEU:N	1:49:A:LEU:CA	1:49:A:LEU:C	1:50:A:LEU:N	6	2.07
(1,188)	1:36:A:VAL:N	1:36:A:VAL:CA	1:36:A:VAL:C	1:37:A:ILE:N	1	2.07
(1,300)	1:66:A:LEU:N	1:66:A:LEU:CA	1:66:A:LEU:CB	1:66:A:LEU:CG	3	2.06
(1,165)	1:28:A:PHE:CA	1:28:A:PHE:C	1:29:A:LEU:N	1:29:A:LEU:CA	4	2.06
(1,242)	1:51:A:VAL:N	1:51:A:VAL:CA	1:51:A:VAL:CB	1:51:A:VAL:CG1	3	2.05
(1,225)	1:47:A:GLN:N	1:47:A:GLN:CA	1:47:A:GLN:CB	1:47:A:GLN:CG	9	2.05
(1,182)	1:34:A:SER:CA	1:34:A:SER:C	1:35:A:ALA:N	1:35:A:ALA:CA	4	2.05
(1,101)	1:13:A:THR:N	1:13:A:THR:CA	1:13:A:THR:C	1:14:A:LEU:N	8	2.05
(1,135)	1:21:A:LYS:CA	1:21:A:LYS:CB	1:21:A:LYS:CG	1:21:A:LYS:CD	10	2.03
(1,85)	1:9:A:SER:N	1:9:A:SER:CA	1:9:A:SER:C	1:10:A:LEU:N	1	2.03
(1,158)	1:26:A:GLU:CA	1:26:A:GLU:C	1:27:A:LEU:N	1:27:A:LEU:CA	11	2.02
(1,186)	1:35:A:ALA:C	1:36:A:VAL:N	1:36:A:VAL:CA	1:36:A:VAL:C	3	2.01
(1,307)	1:67:A:LYS:CA	1:67:A:LYS:C	1:68:A:LYS:N	1:68:A:LYS:CA	5	2.0
(1,277)	1:60:A:SER:N	1:60:A:SER:CA	1:60:A:SER:C	1:61:A:ILE:N	6	1.99
(1,96)	1:11:A:PHE:C	1:12:A:ASN:N	1:12:A:ASN:CA	1:12:A:ASN:C	7	1.99
(1,312)	1:69:A:ALA:N	1:69:A:ALA:CA	1:69:A:ALA:C	1:70:A:VAL:N	2	1.98
(1,226)	1:47:A:GLN:N	1:47:A:GLN:CA	1:47:A:GLN:C	1:48:A:GLU:N	12	1.97
(1,102)	1:13:A:THR:CA	1:13:A:THR:C	1:14:A:LEU:N	1:14:A:LEU:CA	7	1.97
(1,330)	1:74:A:SER:CA	1:74:A:SER:C	1:75:A:ASN:N	1:75:A:ASN:CA	12	1.96
(1,189)	1:36:A:VAL:CA	1:36:A:VAL:C	1:37:A:ILE:N	1:37:A:ILE:CA	1	1.96
(1,169)	1:29:A:LEU:CA	1:29:A:LEU:C	1:30:A:SER:N	1:30:A:SER:CA	9	1.96
(1,109)	1:15:A:ASP:CA	1:15:A:ASP:CB	1:15:A:ASP:CG	1:15:A:ASP:OD1	9	1.96
(1,1)	1:-18:A:GLY:CA	1:-18:A:GLY:C	1:-17:A:SER:N	1:-17:A:SER:CA	10	1.96
(1,279)	1:60:A:SER:C	1:61:A:ILE:N	1:61:A:ILE:CA	1:61:A:ILE:C	2	1.95
(1,235)	1:49:A:LEU:CA	1:49:A:LEU:CB	1:49:A:LEU:CG	1:49:A:LEU:CD1	11	1.93
(1,158)	1:26:A:GLU:CA	1:26:A:GLU:C	1:27:A:LEU:N	1:27:A:LEU:CA	4	1.93
(1,157)	1:26:A:GLU:N	1:26:A:GLU:CA	1:26:A:GLU:C	1:27:A:LEU:N	1	1.93
(1,89)	1:10:A:LEU:N	1:10:A:LEU:CA	1:10:A:LEU:C	1:11:A:PHE:N	10	1.93
(1,157)	1:26:A:GLU:N	1:26:A:GLU:CA	1:26:A:GLU:C	1:27:A:LEU:N	11	1.91
(1,323)	1:72:A:LYS:N	1:72:A:LYS:CA	1:72:A:LYS:CB	1:72:A:LYS:CG	11	1.9
(1,202)	1:39:A:SER:C	1:40:A:GLU:N	1:40:A:GLU:CA	1:40:A:GLU:C	11	1.9
(1,332)	1:75:A:ASN:CA	1:75:A:ASN:C	1:76:A:LEU:N	1:76:A:LEU:CA	7	1.88
(1,173)	1:31:A:PRO:CA	1:31:A:PRO:C	1:32:A:GLY:N	1:32:A:GLY:CA	5	1.88
(1,105)	1:14:A:LEU:N	1:14:A:LEU:CA	1:14:A:LEU:C	1:15:A:ASP:N	12	1.88
(1,258)	1:55:A:SER:CA	1:55:A:SER:C	1:56:A:ASP:N	1:56:A:ASP:CA	8	1.87
(1,246)	1:52:A:GLN:N	1:52:A:GLN:CA	1:52:A:GLN:C	1:53:A:TYR:N	1	1.87
(1,76)	1:6:A:GLU:C	1:7:A:LEU:N	1:7:A:LEU:CA	1:7:A:LEU:C	7	1.87
(1,201)	1:39:A:SER:CA	1:39:A:SER:C	1:40:A:GLU:N	1:40:A:GLU:CA	11	1.86
(1,92)	1:11:A:PHE:N	1:11:A:PHE:CA	1:11:A:PHE:CB	1:11:A:PHE:CG	2	1.85
(1,76)	1:6:A:GLU:C	1:7:A:LEU:N	1:7:A:LEU:CA	1:7:A:LEU:C	8	1.85
(1,61)	1:3:A:THR:N	1:3:A:THR:CA	1:3:A:THR:C	1:4:A:GLU:N	10	1.85
(1,206)	1:40:A:GLU:C	1:41:A:THR:N	1:41:A:THR:CA	1:41:A:THR:C	2	1.84

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,106)	1:14:A:LEU:CA	1:14:A:LEU:C	1:15:A:ASP:N	1:15:A:ASP:CA	3	1.84
(1,334)	1:76:A:LEU:N	1:76:A:LEU:CA	1:76:A:LEU:CB	1:76:A:LEU:CG	11	1.83
(1,260)	1:56:A:ASP:N	1:56:A:ASP:CA	1:56:A:ASP:CB	1:56:A:ASP:CG	12	1.82
(1,77)	1:7:A:LEU:N	1:7:A:LEU:CA	1:7:A:LEU:C	1:8:A:GLN:N	10	1.81
(1,127)	1:19:A:ASP:CA	1:19:A:ASP:CB	1:19:A:ASP:CG	1:19:A:ASP:OD1	12	1.8
(1,158)	1:26:A:GLU:CA	1:26:A:GLU:C	1:27:A:LEU:N	1:27:A:LEU:CA	9	1.78
(1,285)	1:62:A:THR:N	1:62:A:THR:CA	1:62:A:THR:C	1:63:A:PHE:N	3	1.77
(1,199)	1:39:A:SER:N	1:39:A:SER:CA	1:39:A:SER:CB	1:39:A:SER:OG	9	1.77
(1,321)	1:71:A:LYS:CA	1:71:A:LYS:C	1:72:A:LYS:N	1:72:A:LYS:CA	1	1.76
(1,81)	1:8:A:GLN:N	1:8:A:GLN:CA	1:8:A:GLN:C	1:9:A:SER:N	5	1.76
(1,67)	1:4:A:GLU:CA	1:4:A:GLU:C	1:5:A:GLN:N	1:5:A:GLN:CA	9	1.76
(1,187)	1:36:A:VAL:N	1:36:A:VAL:CA	1:36:A:VAL:CB	1:36:A:VAL:CG1	10	1.75
(1,67)	1:4:A:GLU:CA	1:4:A:GLU:C	1:5:A:GLN:N	1:5:A:GLN:CA	10	1.75
(1,72)	1:5:A:GLN:C	1:6:A:GLU:N	1:6:A:GLU:CA	1:6:A:GLU:C	10	1.74
(1,236)	1:49:A:LEU:N	1:49:A:LEU:CA	1:49:A:LEU:C	1:50:A:LEU:N	10	1.72
(1,82)	1:8:A:GLN:CA	1:8:A:GLN:C	1:9:A:SER:N	1:9:A:SER:CA	12	1.71
(1,154)	1:25:A:ASN:C	1:26:A:GLU:N	1:26:A:GLU:CA	1:26:A:GLU:C	5	1.69
(1,280)	1:61:A:ILE:N	1:61:A:ILE:CA	1:61:A:ILE:CB	1:61:A:ILE:CG1	5	1.68
(1,82)	1:8:A:GLN:CA	1:8:A:GLN:C	1:9:A:SER:N	1:9:A:SER:CA	6	1.68
(1,258)	1:55:A:SER:CA	1:55:A:SER:C	1:56:A:ASP:N	1:56:A:ASP:CA	10	1.67
(1,143)	1:22:A:ILE:C	1:23:A:SER:N	1:23:A:SER:CA	1:23:A:SER:C	6	1.67
(1,87)	1:9:A:SER:C	1:10:A:LEU:N	1:10:A:LEU:CA	1:10:A:LEU:C	10	1.67
(1,325)	1:72:A:LYS:N	1:72:A:LYS:CA	1:72:A:LYS:C	1:73:A:ALA:N	3	1.66
(1,68)	1:4:A:GLU:C	1:5:A:GLN:N	1:5:A:GLN:CA	1:5:A:GLN:C	6	1.66
(1,165)	1:28:A:PHE:CA	1:28:A:PHE:C	1:29:A:LEU:N	1:29:A:LEU:CA	8	1.65
(1,224)	1:46:A:PRO:C	1:47:A:GLN:N	1:47:A:GLN:CA	1:47:A:GLN:C	6	1.64
(1,311)	1:68:A:LYS:C	1:69:A:ALA:N	1:69:A:ALA:CA	1:69:A:ALA:C	2	1.63
(1,233)	1:48:A:GLU:C	1:49:A:LEU:N	1:49:A:LEU:CA	1:49:A:LEU:C	11	1.63
(1,105)	1:14:A:LEU:N	1:14:A:LEU:CA	1:14:A:LEU:C	1:15:A:ASP:N	1	1.63
(1,56)	1:1:A:MET:N	1:1:A:MET:CA	1:1:A:MET:C	1:2:A:ALA:N	2	1.63
(1,313)	1:69:A:ALA:CA	1:69:A:ALA:C	1:70:A:VAL:N	1:70:A:VAL:CA	7	1.62
(1,235)	1:49:A:LEU:CA	1:49:A:LEU:CB	1:49:A:LEU:CG	1:49:A:LEU:CD1	1	1.62
(1,233)	1:48:A:GLU:C	1:49:A:LEU:N	1:49:A:LEU:CA	1:49:A:LEU:C	1	1.62
(1,185)	1:35:A:ALA:CA	1:35:A:ALA:C	1:36:A:VAL:N	1:36:A:VAL:CA	12	1.62
(1,132)	1:20:A:GLY:CA	1:20:A:GLY:C	1:21:A:LYS:N	1:21:A:LYS:CA	7	1.62
(1,108)	1:15:A:ASP:N	1:15:A:ASP:CA	1:15:A:ASP:CB	1:15:A:ASP:CG	10	1.61
(1,221)	1:45:A:SER:CA	1:45:A:SER:C	1:46:A:PRO:N	1:46:A:PRO:CA	2	1.6
(1,165)	1:28:A:PHE:CA	1:28:A:PHE:C	1:29:A:LEU:N	1:29:A:LEU:CA	12	1.6
(1,237)	1:49:A:LEU:CA	1:49:A:LEU:C	1:50:A:LEU:N	1:50:A:LEU:CA	4	1.59
(1,121)	1:17:A:ASP:CA	1:17:A:ASP:C	1:18:A:GLN:N	1:18:A:GLN:CA	12	1.59
(1,87)	1:9:A:SER:C	1:10:A:LEU:N	1:10:A:LEU:CA	1:10:A:LEU:C	1	1.59
(1,311)	1:68:A:LYS:C	1:69:A:ALA:N	1:69:A:ALA:CA	1:69:A:ALA:C	1	1.58
(1,121)	1:17:A:ASP:CA	1:17:A:ASP:C	1:18:A:GLN:N	1:18:A:GLN:CA	10	1.58
(1,98)	1:12:A:ASN:CA	1:12:A:ASN:C	1:13:A:THR:N	1:13:A:THR:CA	11	1.58
(1,71)	1:5:A:GLN:CA	1:5:A:GLN:C	1:6:A:GLU:N	1:6:A:GLU:CA	7	1.58
(1,315)	1:70:A:VAL:N	1:70:A:VAL:CA	1:70:A:VAL:CB	1:70:A:VAL:CG1	4	1.57
(1,166)	1:28:A:PHE:C	1:29:A:LEU:N	1:29:A:LEU:CA	1:29:A:LEU:C	4	1.57
(1,88)	1:10:A:LEU:CA	1:10:A:LEU:CB	1:10:A:LEU:CG	1:10:A:LEU:CD1	10	1.57
(1,336)	1:76:A:LEU:CA	1:76:A:LEU:C	1:77:A:THR:N	1:77:A:THR:CA	3	1.56
(1,322)	1:71:A:LYS:C	1:72:A:LYS:N	1:72:A:LYS:CA	1:72:A:LYS:C	11	1.56
(1,296)	1:65:A:GLU:CA	1:65:A:GLU:CB	1:65:A:GLU:CG	1:65:A:GLU:CD	11	1.56

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,5)	1:-16:A:SER:N	1:-16:A:SER:CA	1:-16:A:SER:C	1:-15:A:HIS:N	12	1.56
(1,125)	1:18:A:GLN:C	1:19:A:ASP:N	1:19:A:ASP:CA	1:19:A:ASP:C	7	1.55
(1,115)	1:16:A:ARG:N	1:16:A:ARG:CA	1:16:A:ARG:C	1:17:A:ASP:N	8	1.55
(1,86)	1:9:A:SER:CA	1:9:A:SER:C	1:10:A:LEU:N	1:10:A:LEU:CA	5	1.55
(1,85)	1:9:A:SER:N	1:9:A:SER:CA	1:9:A:SER:C	1:10:A:LEU:N	7	1.55
(1,60)	1:2:A:ALA:C	1:3:A:THR:N	1:3:A:THR:CA	1:3:A:THR:C	7	1.55
(1,297)	1:65:A:GLU:N	1:65:A:GLU:CA	1:65:A:GLU:C	1:66:A:LEU:N	7	1.54
(1,244)	1:51:A:VAL:CA	1:51:A:VAL:C	1:52:A:GLN:N	1:52:A:GLN:CA	12	1.54
(1,142)	1:22:A:ILE:CA	1:22:A:ILE:C	1:23:A:SER:N	1:23:A:SER:CA	5	1.54
(1,86)	1:9:A:SER:CA	1:9:A:SER:C	1:10:A:LEU:N	1:10:A:LEU:CA	8	1.54
(1,259)	1:55:A:SER:C	1:56:A:ASP:N	1:56:A:ASP:CA	1:56:A:ASP:C	3	1.53
(1,87)	1:9:A:SER:C	1:10:A:LEU:N	1:10:A:LEU:CA	1:10:A:LEU:C	4	1.53
(1,286)	1:62:A:THR:CA	1:62:A:THR:C	1:63:A:PHE:N	1:63:A:PHE:CA	9	1.52
(1,190)	1:36:A:VAL:C	1:37:A:ILE:N	1:37:A:ILE:CA	1:37:A:ILE:C	11	1.52
(1,159)	1:26:A:GLU:C	1:27:A:LEU:N	1:27:A:LEU:CA	1:27:A:LEU:C	9	1.52
(1,61)	1:3:A:THR:N	1:3:A:THR:CA	1:3:A:THR:C	1:4:A:GLU:N	6	1.52
(1,117)	1:16:A:ARG:C	1:17:A:ASP:N	1:17:A:ASP:CA	1:17:A:ASP:C	12	1.51
(1,1)	1:-18:A:GLY:CA	1:-18:A:GLY:C	1:-17:A:SER:N	1:-17:A:SER:CA	9	1.51
(1,272)	1:58:A:ASP:C	1:59:A:GLY:N	1:59:A:GLY:CA	1:59:A:GLY:C	2	1.5
(1,187)	1:36:A:VAL:N	1:36:A:VAL:CA	1:36:A:VAL:CB	1:36:A:VAL:CG1	2	1.5
(1,162)	1:27:A:LEU:C	1:28:A:PHE:N	1:28:A:PHE:CA	1:28:A:PHE:C	8	1.5
(1,127)	1:19:A:ASP:CA	1:19:A:ASP:CB	1:19:A:ASP:CG	1:19:A:ASP:OD1	4	1.5
(1,227)	1:47:A:GLN:CA	1:47:A:GLN:C	1:48:A:GLU:N	1:48:A:GLU:CA	11	1.49
(1,159)	1:26:A:GLU:C	1:27:A:LEU:N	1:27:A:LEU:CA	1:27:A:LEU:C	1	1.49
(1,86)	1:9:A:SER:CA	1:9:A:SER:C	1:10:A:LEU:N	1:10:A:LEU:CA	7	1.49
(1,90)	1:10:A:LEU:CA	1:10:A:LEU:C	1:11:A:PHE:N	1:11:A:PHE:CA	7	1.48
(1,75)	1:6:A:GLU:CA	1:6:A:GLU:C	1:7:A:LEU:N	1:7:A:LEU:CA	8	1.48
(1,71)	1:5:A:GLN:CA	1:5:A:GLN:C	1:6:A:GLU:N	1:6:A:GLU:CA	1	1.48
(1,41)	1:-5:A:VAL:CA	1:-5:A:VAL:C	1:-4:A:PRO:N	1:-4:A:PRO:CA	4	1.48
(1,304)	1:66:A:LEU:C	1:67:A:LYS:N	1:67:A:LYS:CA	1:67:A:LYS:C	9	1.47
(1,222)	1:46:A:PRO:N	1:46:A:PRO:CA	1:46:A:PRO:C	1:47:A:GLN:N	11	1.47
(1,188)	1:36:A:VAL:N	1:36:A:VAL:CA	1:36:A:VAL:C	1:37:A:ILE:N	7	1.46
(1,316)	1:70:A:VAL:N	1:70:A:VAL:CA	1:70:A:VAL:C	1:71:A:LYS:N	8	1.45
(1,246)	1:52:A:GLN:N	1:52:A:GLN:CA	1:52:A:GLN:C	1:53:A:TYR:N	12	1.45
(1,195)	1:37:A:ILE:C	1:38:A:SER:N	1:38:A:SER:CA	1:38:A:SER:C	12	1.45
(1,173)	1:31:A:PRO:CA	1:31:A:PRO:C	1:32:A:GLY:N	1:32:A:GLY:CA	6	1.45
(1,82)	1:8:A:GLN:CA	1:8:A:GLN:C	1:9:A:SER:N	1:9:A:SER:CA	9	1.45
(1,32)	1:-9:A:SER:CA	1:-9:A:SER:C	1:-8:A:SER:N	1:-8:A:SER:CA	8	1.45
(1,237)	1:49:A:LEU:CA	1:49:A:LEU:C	1:50:A:LEU:N	1:50:A:LEU:CA	7	1.44
(1,243)	1:51:A:VAL:N	1:51:A:VAL:CA	1:51:A:VAL:C	1:52:A:GLN:N	1	1.43
(1,238)	1:49:A:LEU:C	1:50:A:LEU:N	1:50:A:LEU:CA	1:50:A:LEU:C	8	1.43
(1,120)	1:17:A:ASP:N	1:17:A:ASP:CA	1:17:A:ASP:C	1:18:A:GLN:N	1	1.43
(1,95)	1:11:A:PHE:CA	1:11:A:PHE:C	1:12:A:ASN:N	1:12:A:ASN:CA	2	1.43
(1,151)	1:24:A:ILE:C	1:25:A:ASN:N	1:25:A:ASN:CA	1:25:A:ASN:C	10	1.41
(1,278)	1:60:A:SER:CA	1:60:A:SER:C	1:61:A:ILE:N	1:61:A:ILE:CA	10	1.4
(1,258)	1:55:A:SER:CA	1:55:A:SER:C	1:56:A:ASP:N	1:56:A:ASP:CA	12	1.39
(1,239)	1:50:A:LEU:N	1:50:A:LEU:CA	1:50:A:LEU:C	1:51:A:VAL:N	4	1.39
(1,161)	1:27:A:LEU:CA	1:27:A:LEU:C	1:28:A:PHE:N	1:28:A:PHE:CA	3	1.38
(1,136)	1:21:A:LYS:N	1:21:A:LYS:CA	1:21:A:LYS:C	1:22:A:ILE:N	10	1.38
(1,204)	1:40:A:GLU:N	1:40:A:GLU:CA	1:40:A:GLU:C	1:41:A:THR:N	1	1.37
(1,176)	1:32:A:GLY:CA	1:32:A:GLY:C	1:33:A:LEU:N	1:33:A:LEU:CA	6	1.37

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,91)	1:10:A:LEU:C	1:11:A:PHE:N	1:11:A:PHE:CA	1:11:A:PHE:C	6	1.37
(1,327)	1:72:A:LYS:C	1:73:A:ALA:N	1:73:A:ALA:CA	1:73:A:ALA:C	12	1.36
(1,153)	1:25:A:ASN:CA	1:25:A:ASN:C	1:26:A:GLU:N	1:26:A:GLU:CA	8	1.36
(1,150)	1:24:A:ILE:CA	1:24:A:ILE:C	1:25:A:ASN:N	1:25:A:ASN:CA	4	1.36
(1,179)	1:33:A:LEU:CA	1:33:A:LEU:C	1:34:A:SER:N	1:34:A:SER:CA	10	1.35
(1,83)	1:8:A:GLN:C	1:9:A:SER:N	1:9:A:SER:CA	1:9:A:SER:C	2	1.34
(1,6)	1:-16:A:SER:CA	1:-16:A:SER:C	1:-15:A:HIS:N	1:-15:A:HIS:CA	2	1.33
(1,336)	1:76:A:LEU:CA	1:76:A:LEU:C	1:77:A:THR:N	1:77:A:THR:CA	6	1.32
(1,308)	1:67:A:LYS:C	1:68:A:LYS:N	1:68:A:LYS:CA	1:68:A:LYS:C	8	1.32
(1,302)	1:66:A:LEU:N	1:66:A:LEU:CA	1:66:A:LEU:C	1:67:A:LYS:N	7	1.32
(1,123)	1:18:A:GLN:N	1:18:A:GLN:CA	1:18:A:GLN:C	1:19:A:ASP:N	1	1.32
(1,105)	1:14:A:LEU:N	1:14:A:LEU:CA	1:14:A:LEU:C	1:15:A:ASP:N	6	1.32
(1,321)	1:71:A:LYS:CA	1:71:A:LYS:C	1:72:A:LYS:N	1:72:A:LYS:CA	11	1.31
(1,318)	1:70:A:VAL:C	1:71:A:LYS:N	1:71:A:LYS:CA	1:71:A:LYS:C	5	1.31
(1,102)	1:13:A:THR:CA	1:13:A:THR:C	1:14:A:LEU:N	1:14:A:LEU:CA	9	1.31
(1,254)	1:54:A:ASP:CA	1:54:A:ASP:C	1:55:A:SER:N	1:55:A:SER:CA	12	1.3
(1,175)	1:32:A:GLY:N	1:32:A:GLY:CA	1:32:A:GLY:C	1:33:A:LEU:N	4	1.3
(1,21)	1:-12:A:HIS:CA	1:-12:A:HIS:C	1:-11:A:HIS:N	1:-11:A:HIS:CA	8	1.3
(1,309)	1:68:A:LYS:N	1:68:A:LYS:CA	1:68:A:LYS:C	1:69:A:ALA:N	7	1.29
(1,244)	1:51:A:VAL:CA	1:51:A:VAL:C	1:52:A:GLN:N	1:52:A:GLN:CA	3	1.29
(1,209)	1:41:A:THR:C	1:42:A:ASN:N	1:42:A:ASN:CA	1:42:A:ASN:C	2	1.29
(1,102)	1:13:A:THR:CA	1:13:A:THR:C	1:14:A:LEU:N	1:14:A:LEU:CA	2	1.29
(1,68)	1:4:A:GLU:C	1:5:A:GLN:N	1:5:A:GLN:CA	1:5:A:GLN:C	12	1.29
(1,242)	1:51:A:VAL:N	1:51:A:VAL:CA	1:51:A:VAL:CB	1:51:A:VAL:CG1	4	1.28
(1,312)	1:69:A:ALA:N	1:69:A:ALA:CA	1:69:A:ALA:C	1:70:A:VAL:N	4	1.27
(1,178)	1:33:A:LEU:N	1:33:A:LEU:CA	1:33:A:LEU:C	1:34:A:SER:N	2	1.27
(1,306)	1:67:A:LYS:N	1:67:A:LYS:CA	1:67:A:LYS:C	1:68:A:LYS:N	5	1.26
(1,293)	1:64:A:GLU:CA	1:64:A:GLU:C	1:65:A:GLU:N	1:65:A:GLU:CA	7	1.26
(1,114)	1:16:A:ARG:CA	1:16:A:ARG:CB	1:16:A:ARG:CG	1:16:A:ARG:CD	8	1.26
(1,124)	1:18:A:GLN:CA	1:18:A:GLN:C	1:19:A:ASP:N	1:19:A:ASP:CA	1	1.25
(1,303)	1:66:A:LEU:CA	1:66:A:LEU:C	1:67:A:LYS:N	1:67:A:LYS:CA	10	1.23
(1,174)	1:31:A:PRO:C	1:32:A:GLY:N	1:32:A:GLY:CA	1:32:A:GLY:C	1	1.23
(1,68)	1:4:A:GLU:C	1:5:A:GLN:N	1:5:A:GLN:CA	1:5:A:GLN:C	8	1.23
(1,215)	1:43:A:THR:CA	1:43:A:THR:C	1:44:A:ASN:N	1:44:A:ASN:CA	12	1.22
(1,330)	1:74:A:SER:CA	1:74:A:SER:C	1:75:A:ASN:N	1:75:A:ASN:CA	1	1.21
(1,200)	1:39:A:SER:N	1:39:A:SER:CA	1:39:A:SER:C	1:40:A:GLU:N	10	1.21
(1,267)	1:57:A:GLN:C	1:58:A:ASP:N	1:58:A:ASP:CA	1:58:A:ASP:C	2	1.2
(1,154)	1:25:A:ASN:C	1:26:A:GLU:N	1:26:A:GLU:CA	1:26:A:GLU:C	1	1.2
(1,102)	1:13:A:THR:CA	1:13:A:THR:C	1:14:A:LEU:N	1:14:A:LEU:CA	6	1.2
(1,76)	1:6:A:GLU:C	1:7:A:LEU:N	1:7:A:LEU:CA	1:7:A:LEU:C	11	1.19
(1,34)	1:-8:A:SER:CA	1:-8:A:SER:C	1:-7:A:GLY:N	1:-7:A:GLY:CA	11	1.19
(1,26)	1:-10:A:HIS:CA	1:-10:A:HIS:CB	1:-10:A:HIS:CG	1:-10:A:HIS:ND1	8	1.19
(1,140)	1:22:A:ILE:CA	1:22:A:ILE:CB	1:22:A:ILE:CG1	1:22:A:ILE:CD1	8	1.18
(1,124)	1:18:A:GLN:CA	1:18:A:GLN:C	1:19:A:ASP:N	1:19:A:ASP:CA	6	1.18
(1,112)	1:15:A:ASP:C	1:16:A:ARG:N	1:16:A:ARG:CA	1:16:A:ARG:C	4	1.18
(1,94)	1:11:A:PHE:N	1:11:A:PHE:CA	1:11:A:PHE:C	1:12:A:ASN:N	1	1.18
(1,297)	1:65:A:GLU:N	1:65:A:GLU:CA	1:65:A:GLU:C	1:66:A:LEU:N	11	1.16
(1,137)	1:21:A:LYS:CA	1:21:A:LYS:C	1:22:A:ILE:N	1:22:A:ILE:CA	1	1.16
(1,77)	1:7:A:LEU:N	1:7:A:LEU:CA	1:7:A:LEU:C	1:8:A:GLN:N	3	1.15
(1,240)	1:50:A:LEU:CA	1:50:A:LEU:C	1:51:A:VAL:N	1:51:A:VAL:CA	2	1.14
(1,117)	1:16:A:ARG:C	1:17:A:ASP:N	1:17:A:ASP:CA	1:17:A:ASP:C	9	1.14

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,180)	1:33:A:LEU:C	1:34:A:SER:N	1:34:A:SER:CA	1:34:A:SER:C	8	1.13
(1,202)	1:39:A:SER:C	1:40:A:GLU:N	1:40:A:GLU:CA	1:40:A:GLU:C	4	1.12
(1,157)	1:26:A:GLU:N	1:26:A:GLU:CA	1:26:A:GLU:C	1:27:A:LEU:N	3	1.12
(1,85)	1:9:A:SER:N	1:9:A:SER:CA	1:9:A:SER:C	1:10:A:LEU:N	11	1.12
(1,262)	1:56:A:ASP:N	1:56:A:ASP:CA	1:56:A:ASP:C	1:57:A:GLN:N	6	1.11
(1,217)	1:44:A:ASN:N	1:44:A:ASN:CA	1:44:A:ASN:C	1:45:A:SER:N	1	1.11
(1,124)	1:18:A:GLN:CA	1:18:A:GLN:C	1:19:A:ASP:N	1:19:A:ASP:CA	11	1.11
(1,72)	1:5:A:GLN:C	1:6:A:GLU:N	1:6:A:GLU:CA	1:6:A:GLU:C	8	1.11
(1,154)	1:25:A:ASN:C	1:26:A:GLU:N	1:26:A:GLU:CA	1:26:A:GLU:C	2	1.1
(1,194)	1:37:A:ILE:CA	1:37:A:ILE:C	1:38:A:SER:N	1:38:A:SER:CA	4	1.09
(1,103)	1:13:A:THR:C	1:14:A:LEU:N	1:14:A:LEU:CA	1:14:A:LEU:C	7	1.09
(1,72)	1:5:A:GLN:C	1:6:A:GLU:N	1:6:A:GLU:CA	1:6:A:GLU:C	6	1.09
(1,332)	1:75:A:ASN:CA	1:75:A:ASN:C	1:76:A:LEU:N	1:76:A:LEU:CA	5	1.07
(1,279)	1:60:A:SER:C	1:61:A:ILE:N	1:61:A:ILE:CA	1:61:A:ILE:C	11	1.06
(1,217)	1:44:A:ASN:N	1:44:A:ASN:CA	1:44:A:ASN:C	1:45:A:SER:N	6	1.06
(1,138)	1:21:A:LYS:C	1:22:A:ILE:N	1:22:A:ILE:CA	1:22:A:ILE:C	3	1.06
(1,95)	1:11:A:PHE:CA	1:11:A:PHE:C	1:12:A:ASN:N	1:12:A:ASN:CA	1	1.06
(1,291)	1:63:A:PHE:C	1:64:A:GLU:N	1:64:A:GLU:CA	1:64:A:GLU:C	10	1.04
(1,282)	1:61:A:ILE:N	1:61:A:ILE:CA	1:61:A:ILE:C	1:62:A:THR:N	11	1.04
(1,137)	1:21:A:LYS:CA	1:21:A:LYS:C	1:22:A:ILE:N	1:22:A:ILE:CA	3	1.04
(1,119)	1:17:A:ASP:CA	1:17:A:ASP:CB	1:17:A:ASP:CG	1:17:A:ASP:OD1	7	1.04
(1,244)	1:51:A:VAL:CA	1:51:A:VAL:C	1:52:A:GLN:N	1:52:A:GLN:CA	7	1.03
(1,212)	1:42:A:ASN:C	1:43:A:THR:N	1:43:A:THR:CA	1:43:A:THR:C	4	1.02
(1,126)	1:19:A:ASP:N	1:19:A:ASP:CA	1:19:A:ASP:CB	1:19:A:ASP:CG	12	1.02
(1,28)	1:-10:A:HIS:CA	1:-10:A:HIS:C	1:-9:A:SER:N	1:-9:A:SER:CA	1	1.02
(1,114)	1:16:A:ARG:CA	1:16:A:ARG:CB	1:16:A:ARG:CG	1:16:A:ARG:CD	5	1.01