Full wwPDB NMR Structure Validation Report (i)

Jun 3, 2023 – 05:14 AM EDT

PDB ID	:	1GA3
BMRB ID	:	4843
Title	:	NMR STRUCTURE OF INTERLEUKIN-13
Authors	:	Eisenmesser, E.Z.; Horita, D.A.; Altieri, A.S.; Byrd, R.A.
Deposited on	:	2000-11-29

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

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

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

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

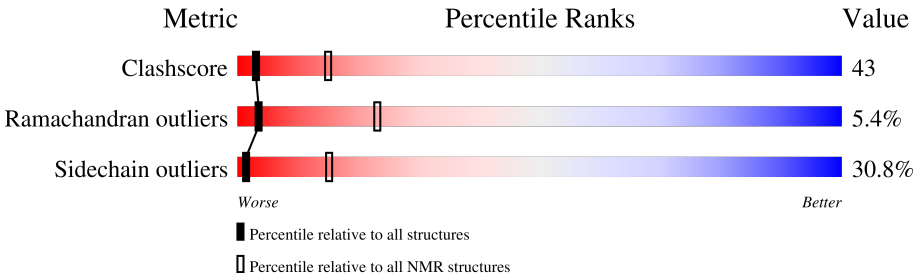
MolProbity	:	4.02b-467
Percentile statistics	:	20191225.v01 (using entries in the PDB archive December 25th 2019)
wwPDB-RCI	:	v_1n_11_5_13_A (Berjanski et al., 2005)
PANAV	:	Wang et al. (2010)
wwPDB-ShiftChecker	:	v1.2
BMRB Restraints Analysis	:	v1.2
Ideal geometry (proteins)	:	Engh & Huber (2001)
Ideal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

1 Overall quality at a glance (i)

The following experimental techniques were used to determine the structure:
SOLUTION NMR

The overall completeness of chemical shifts assignment is 85%.

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



Metric	Whole archive (#Entries)	NMR archive (#Entries)
Clashscore	158937	12864
Ramachandran outliers	154571	11451
Sidechain outliers	154315	11428

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

Mol	Chain	Length	Quality of chain
1	A	113	27% 46% 10% 17%

2 Ensemble composition and analysis (i)

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

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:7-A:77, A:88-A:110 (94)	0.95	2

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

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

The models can be grouped into 3 clusters and 7 single-model clusters were found.

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

3 Entry composition (i)

There is only 1 type of molecule in this entry. The entry contains 1758 atoms, of which 890 are hydrogens and 0 are deuteriums.

- Molecule 1 is a protein called Interleukin-13.

Mol	Chain	Residues	Atoms						Trace
			Total	C	H	N	O	S	
1	A	113	1758	549	890	153	159	7	0

There is a discrepancy between the modelled and reference sequences:

Chain	Residue	Modelled	Actual	Comment	Reference
A	1	GLY	-	expression tag	UNP P35225

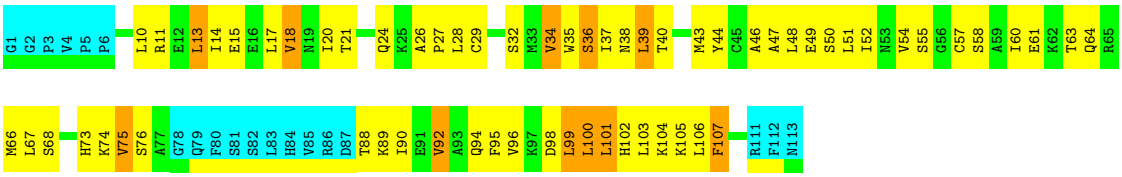
4 Residue-property plots (i)

4.1 Average score per residue in the NMR ensemble

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

• Molecule 1: Interleukin-13

Chain A: 27% 46% 10% 17%



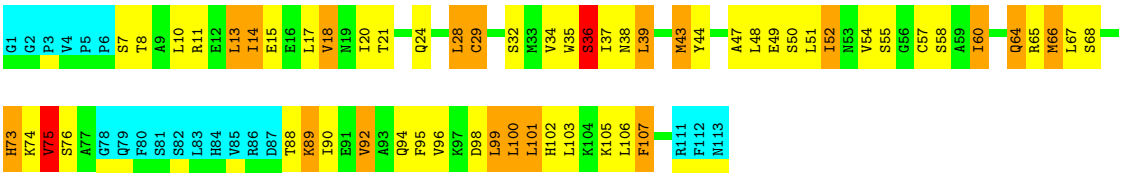
4.2 Scores per residue for each member of the ensemble

Colouring as in section 4.1 above.

4.2.1 Score per residue for model 1

• Molecule 1: Interleukin-13

Chain A: 31% 35% 16% • 17%



4.2.2 Score per residue for model 2 (medoid)

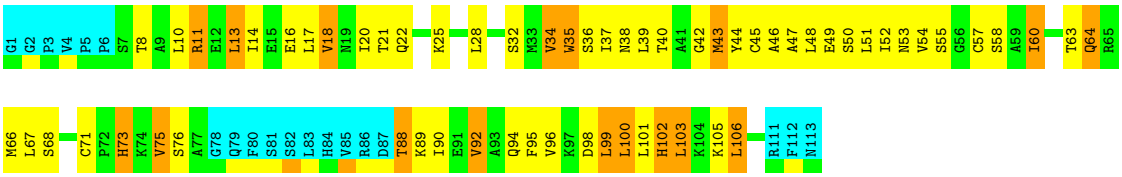
• Molecule 1: Interleukin-13

Chain A: 32% 37% 14% 17%

4.2.3 Score per residue for model 3

- Molecule 1: Interleukin-13

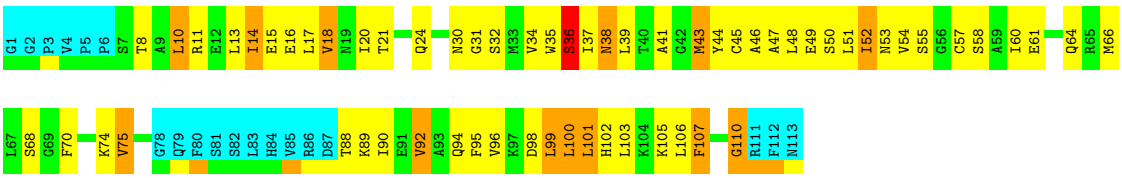
Chain A: 28% 40% 15% 17%



4.2.4 Score per residue for model 4

- Molecule 1: Interleukin-13

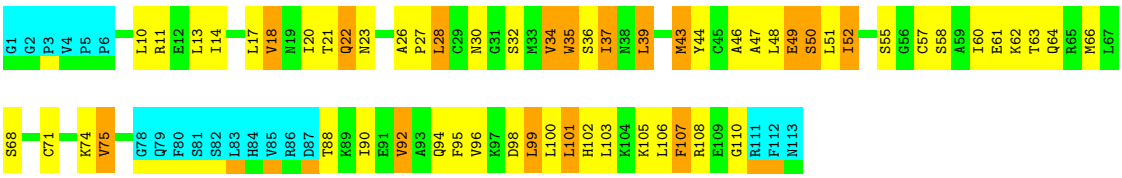
Chain A: 28% 42% 12% • 17%



4.2.5 Score per residue for model 5

- Molecule 1: Interleukin-13

Chain A: 31% 38% 14% 17%



4.2.6 Score per residue for model 6

- Molecule 1: Interleukin-13

Chain A: 29% 41% 13% 17%

G1 G2 P3 V4 P5 P6 S7 T8 A9 L10 R11 E12 L13 I14 E15 E16 L17 V18 N19 I20 Q24 P27 L28 C29 S32 M33 V34 W35 S36 I37 N38 L39 T40 M43 Y44 A47 L48 E49 S50 L51 I52 S55 G56 C57 S58 A59 I60 E61 K62 T63 Q64 R65 M66 L67

C71 P72 H73 K74 V75 S76 A77 G78 Q79 F80 S81 S82 L83 H84 V85 R86 D87 T88 K89 I90 E91 V92 A93 Q94 F95 V96 K97 D98 L99 L100 L101 H102 L103 K104 K105 L106 F107 R111 F112 N113

4.2.7 Score per residue for model 7

- Molecule 1: Interleukin-13

Chain A: 32% 38% 13% 17%

G1 G2 P3 V4 P5 P6 R11 E12 L13 I14 E15 E16 L17 V18 N19 I20 T21 Q22 N23 Q24 K25 A26 P27 L28 C29 N30 G31 S32 M33 V34 W35 S36 I37 N38 L39 Y44 C45 A46 A47 L48 E49 S50 L51 I52 N53 C57 S58 A59 I60 E61 K62 T63 Q64 R65 M66 L67 S68

G69 F70 K74 V75 S76 A77 G78 Q79 F80 S81 S82 L83 H84 V85 R86 D87 T88 K89 V92 A93 Q94 F95 V96 K97 D98 L99 L100 L101 H102 L103 L106 F107 R111 F112 N113

4.2.8 Score per residue for model 8

- Molecule 1: Interleukin-13

Chain A: 32% 39% 11% • 17%

G1 G2 P3 V4 P5 P6 L10 R11 E12 L13 I14 E15 E16 L17 V18 N19 I20 T21 L28 C29 N30 G31 S32 M33 V34 W35 S36 I37 N38 L39 M43 Y44 A47 L48 E49 S50 L51 I52 N53 V54 C57 S58 A59 I60 E61 K62 T63 L67 S68 C71 P72 H73 K74

V75 S76 A77 G78 Q79 F80 S81 S82 L83 H84 V85 R86 D87 T88 K89 V92 A93 Q94 F95 V96 K97 D98 L99 L100 L101 H102 L103 F107 R111 F112 N113

4.2.9 Score per residue for model 9

- Molecule 1: Interleukin-13

Chain A: 27% 46% 10% • 17%

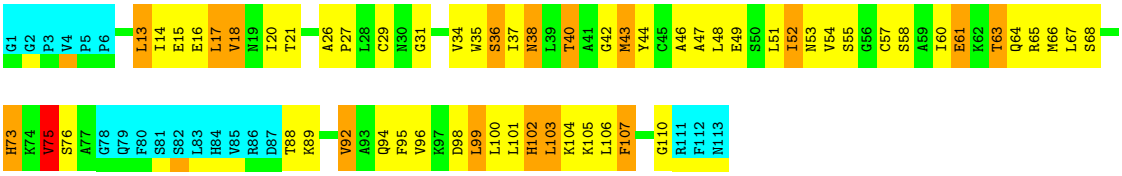
G1 G2 P3 V4 P5 P6 L10 R11 E12 L13 I14 E15 E16 L17 V18 N19 I20 T21 Q22 N23 Q24 K25 A26 P27 L28 C29 N30 G31 S32 M33 V34 W35 S36 I37 N38 L39 T40 A41 Y44 C45 A46 A47 L48 E49 S50 L51 I52 S55 S58 A59 I60 E61 K62 R65 M66

L67 S68 P72 V75 S76 A77 G78 Q79 F80 S81 S82 L83 H84 V85 R86 D87 T88 K89 I90 E91 V92 A93 Q94 F95 V96 K97 D98 L99 L100 L101 H102 L103 K104 K105 L106 F107 R108 E109 G110 R111 F112 N113

4.2.10 Score per residue for model 10

- Molecule 1: Interleukin-13

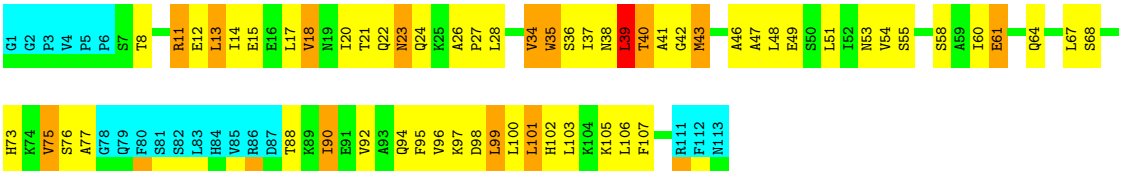
Chain A: 30% 38% 14% • 17%



4.2.11 Score per residue for model 11

- Molecule 1: Interleukin-13

Chain A: 30% 41% 12% • 17%



4.2.12 Score per residue for model 12

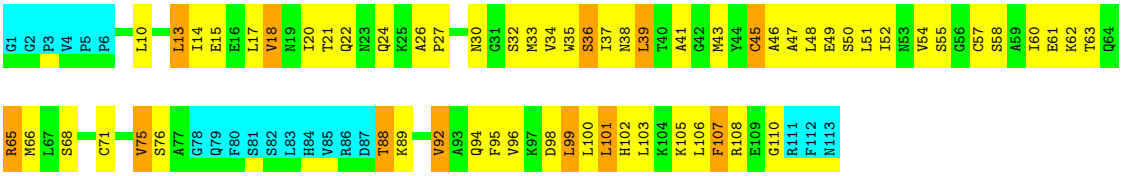
- Molecule 1: Interleukin-13

Chain A: 31% 45% 6% • 17%

4.2.13 Score per residue for model 13

- Molecule 1: Interleukin-13

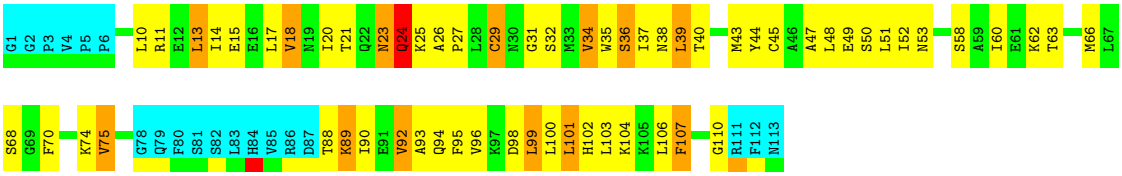
Chain A: 28% 44% 11% 17%



4.2.14 Score per residue for model 14

- Molecule 1: Interleukin-13

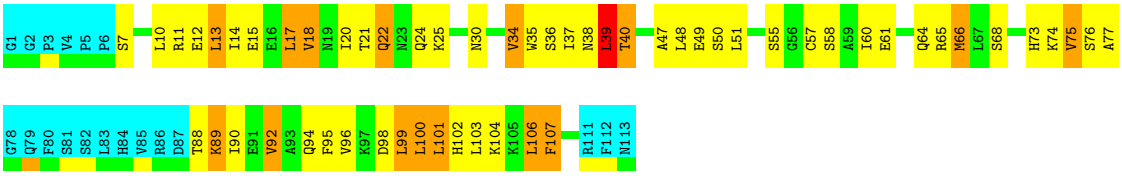
Chain A: 29% 42% 12% • 17%



4.2.15 Score per residue for model 15

- Molecule 1: Interleukin-13

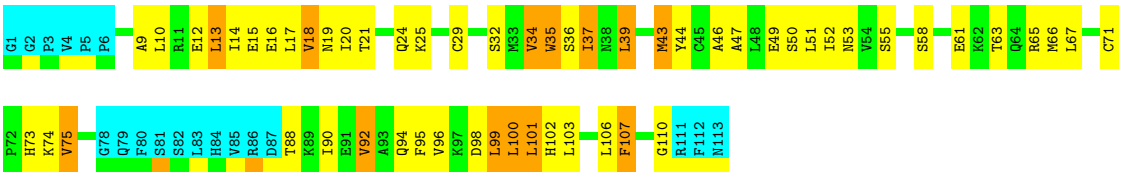
Chain A: 33% 36% 13% • 17%



4.2.16 Score per residue for model 16

- Molecule 1: Interleukin-13

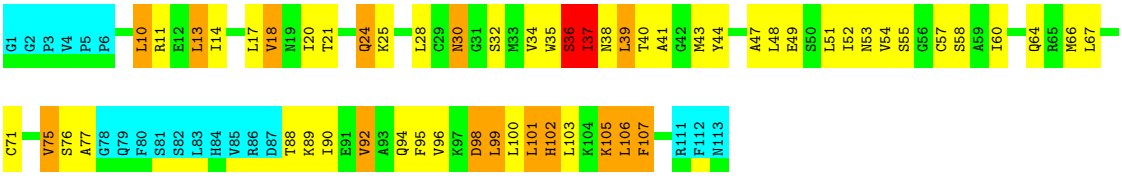
Chain A: 34% 38% 12% 17%



4.2.17 Score per residue for model 17

- Molecule 1: Interleukin-13

Chain A: 33% 35% 13% • 17%



4.2.18 Score per residue for model 18

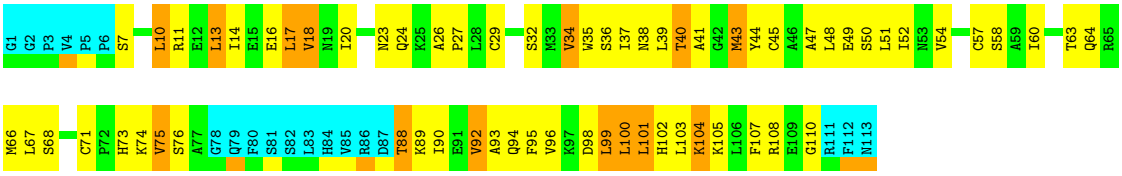
- Molecule 1: Interleukin-13

Chain A: 33% 38% 12% 17%

4.2.19 Score per residue for model 19

- Molecule 1: Interleukin-13

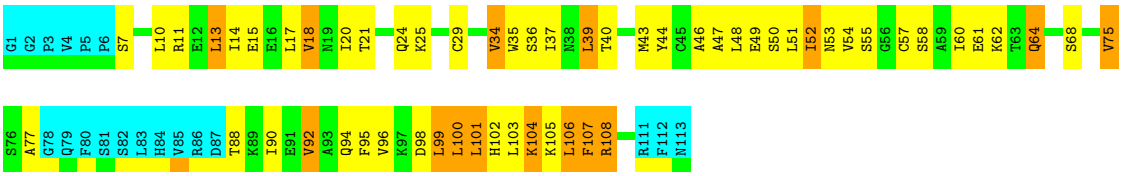
Chain A: 26% 45% 12% 17%



4.2.20 Score per residue for model 20

- Molecule 1: Interleukin-13

Chain A: 33% 37% 13% 17%



5 Refinement protocol and experimental data overview (i)

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

Of the 200 calculated structures, 20 were deposited, based on the following criterion: *structures with the lowest energy*.

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

Software name	Classification	Version
CNS	structure calculation	
ARIA	structure calculation	
ARIA	refinement	

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

Chemical shift file(s)	working_cs.cif
Number of chemical shift lists	1
Total number of shifts	1269
Number of shifts mapped to atoms	1269
Number of unparsed shifts	0
Number of shifts with mapping errors	0
Number of shifts with mapping warnings	0
Assignment completeness (well-defined parts)	85%

6 Model quality (i)

6.1 Standard geometry (i)

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

There are no bond-length outliers.

There are no bond-angle outliers.

There are no chirality outliers.

There are no planarity outliers.

6.2 Too-close contacts (i)

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

Mol	Chain	Non-H	H(model)	H(added)	Clashes
1	A	721	749	748	63±6
All	All	14420	14980	14960	1263

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 43.

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

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:51:LEU:HD22	1:A:60:ILE:HG21	1.05	1.28	11	2
1:A:10:LEU:HD13	1:A:13:LEU:HD23	1.03	1.30	19	1
1:A:39:LEU:HD13	1:A:101:LEU:HD12	1.03	1.26	16	4
1:A:51:LEU:HD22	1:A:60:ILE:HD13	1.02	1.28	19	12
1:A:63:THR:HG21	1:A:99:LEU:HD11	0.97	1.36	3	3
1:A:37:ILE:HD13	1:A:47:ALA:HB2	0.96	1.36	19	7
1:A:28:LEU:HD23	1:A:96:VAL:HG21	0.94	1.35	5	4
1:A:21:THR:HG21	1:A:100:LEU:HD22	0.93	1.35	10	4
1:A:44:TYR:CE1	1:A:106:LEU:HD22	0.88	2.04	10	3
1:A:17:LEU:HD23	1:A:20:ILE:HD11	0.86	1.47	8	1
1:A:13:LEU:HD12	1:A:13:LEU:O	0.84	1.73	20	7
1:A:13:LEU:HD13	1:A:107:PHE:CD2	0.81	2.09	1	6
1:A:17:LEU:CB	1:A:100:LEU:HD23	0.81	2.04	20	11
1:A:39:LEU:HD21	1:A:101:LEU:HD11	0.81	1.49	11	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:39:LEU:HD22	1:A:102:HIS:CB	0.81	2.04	13	8
1:A:37:ILE:HG22	1:A:46:ALA:HB3	0.81	1.49	16	2
1:A:17:LEU:CB	1:A:100:LEU:HD13	0.80	2.06	6	4
1:A:39:LEU:HD13	1:A:101:LEU:CD1	0.80	2.07	16	5
1:A:101:LEU:HD13	1:A:102:HIS:N	0.80	1.91	16	14
1:A:13:LEU:HD11	1:A:103:LEU:HB3	0.80	1.53	8	3
1:A:63:THR:CG2	1:A:99:LEU:HD11	0.80	2.07	3	4
1:A:17:LEU:HB2	1:A:100:LEU:HD23	0.80	1.54	3	11
1:A:100:LEU:O	1:A:100:LEU:HD22	0.79	1.77	8	11
1:A:60:ILE:HD12	1:A:64:GLN:OE1	0.79	1.77	3	3
1:A:17:LEU:HD21	1:A:99:LEU:CD2	0.79	2.08	8	1
1:A:26:ALA:HB1	1:A:27:PRO:HD2	0.78	1.55	5	9
1:A:37:ILE:CD1	1:A:47:ALA:HB2	0.78	2.08	18	8
1:A:13:LEU:CD2	1:A:103:LEU:HD22	0.78	2.08	7	5
1:A:37:ILE:HD12	1:A:47:ALA:HB2	0.78	1.54	15	9
1:A:17:LEU:HD12	1:A:100:LEU:HA	0.78	1.56	15	7
1:A:52:ILE:O	1:A:52:ILE:HD13	0.78	1.78	4	5
1:A:44:TYR:CZ	1:A:103:LEU:HD23	0.77	2.14	6	1
1:A:49:GLU:CB	1:A:75:VAL:HG21	0.77	2.08	6	7
1:A:51:LEU:CD2	1:A:60:ILE:HG21	0.77	2.08	11	2
1:A:49:GLU:HB3	1:A:75:VAL:HG21	0.75	1.55	6	5
1:A:34:VAL:HG21	1:A:95:PHE:HB2	0.75	1.56	9	4
1:A:49:GLU:O	1:A:52:ILE:HG22	0.75	1.81	8	16
1:A:67:LEU:HD21	1:A:103:LEU:HD11	0.75	1.59	3	5
1:A:13:LEU:HD21	1:A:103:LEU:HD22	0.75	1.56	6	5
1:A:92:VAL:O	1:A:96:VAL:HG23	0.75	1.81	3	14
1:A:67:LEU:HD11	1:A:99:LEU:CD1	0.74	2.12	8	3
1:A:13:LEU:HD13	1:A:17:LEU:HD12	0.74	1.59	20	1
1:A:60:ILE:HD13	1:A:64:GLN:NE2	0.74	1.98	11	2
1:A:39:LEU:HD11	1:A:102:HIS:HB3	0.74	1.60	12	1
1:A:21:THR:CG2	1:A:100:LEU:HD22	0.74	2.12	10	4
1:A:14:ILE:O	1:A:18:VAL:HB	0.74	1.83	15	20
1:A:10:LEU:HD12	1:A:107:PHE:O	0.73	1.82	5	3
1:A:17:LEU:O	1:A:21:THR:HG22	0.73	1.83	17	14
1:A:39:LEU:CD1	1:A:101:LEU:HD12	0.73	2.10	16	5
1:A:49:GLU:HB3	1:A:75:VAL:HG11	0.73	1.60	9	6
1:A:60:ILE:HD12	1:A:64:GLN:HG3	0.73	1.61	19	7
1:A:39:LEU:HD11	1:A:101:LEU:HD12	0.73	1.59	11	1
1:A:39:LEU:HD22	1:A:102:HIS:HB2	0.72	1.61	14	5
1:A:17:LEU:HD13	1:A:100:LEU:HA	0.72	1.60	14	10
1:A:48:LEU:HD13	1:A:64:GLN:O	0.72	1.83	7	7

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:48:LEU:HD22	1:A:68:SER:HA	0.72	1.62	14	13
1:A:37:ILE:HG23	1:A:38:ASN:N	0.72	1.99	17	1
1:A:21:THR:HG21	1:A:100:LEU:CD2	0.72	2.12	10	5
1:A:13:LEU:HD13	1:A:107:PHE:CD1	0.72	2.20	14	1
1:A:34:VAL:HG23	1:A:90:ILE:HG12	0.71	1.62	5	2
1:A:51:LEU:HD22	1:A:60:ILE:CD1	0.71	2.10	18	7
1:A:52:ILE:CD1	1:A:77:ALA:HB2	0.71	2.15	7	2
1:A:100:LEU:HD13	1:A:101:LEU:N	0.71	1.99	12	1
1:A:39:LEU:HD11	1:A:101:LEU:CD1	0.71	2.15	11	2
1:A:38:ASN:O	1:A:40:THR:HG22	0.71	1.86	11	1
1:A:60:ILE:HD13	1:A:64:GLN:OE1	0.71	1.86	20	1
1:A:44:TYR:HA	1:A:67:LEU:HD22	0.70	1.62	19	4
1:A:17:LEU:CB	1:A:100:LEU:HD12	0.70	2.16	14	2
1:A:34:VAL:HG23	1:A:95:PHE:CD2	0.70	2.21	20	2
1:A:101:LEU:HD22	1:A:101:LEU:C	0.70	2.07	20	15
1:A:49:GLU:HB2	1:A:75:VAL:HG21	0.70	1.61	19	2
1:A:98:ASP:O	1:A:101:LEU:HG	0.70	1.86	10	4
1:A:34:VAL:HG23	1:A:90:ILE:CG1	0.70	2.17	5	3
1:A:44:TYR:CZ	1:A:106:LEU:HD22	0.69	2.22	16	3
1:A:17:LEU:HD11	1:A:103:LEU:CD1	0.69	2.17	2	12
1:A:39:LEU:HD22	1:A:102:HIS:HB3	0.69	1.62	20	3
1:A:13:LEU:HD12	1:A:13:LEU:C	0.69	2.08	20	6
1:A:27:PRO:HA	1:A:93:ALA:HB2	0.69	1.63	7	5
1:A:17:LEU:HB2	1:A:100:LEU:HD13	0.69	1.64	5	5
1:A:13:LEU:HD22	1:A:103:LEU:HD22	0.68	1.65	17	1
1:A:32:SER:O	1:A:92:VAL:HG13	0.68	1.89	14	16
1:A:10:LEU:HD12	1:A:107:PHE:HB2	0.68	1.63	19	1
1:A:51:LEU:CD2	1:A:60:ILE:HD13	0.68	2.14	19	3
1:A:13:LEU:CD1	1:A:17:LEU:HD12	0.67	2.20	20	4
1:A:39:LEU:HD11	1:A:102:HIS:CB	0.67	2.20	17	2
1:A:20:ILE:HD12	1:A:96:VAL:HG13	0.67	1.65	18	18
1:A:44:TYR:OH	1:A:106:LEU:HD13	0.67	1.90	16	2
1:A:67:LEU:HD11	1:A:99:LEU:HD13	0.67	1.64	8	1
1:A:34:VAL:HG23	1:A:95:PHE:CD1	0.67	2.25	7	8
1:A:67:LEU:HD21	1:A:103:LEU:HD21	0.67	1.66	6	3
1:A:17:LEU:HB3	1:A:100:LEU:HD13	0.66	1.66	6	3
1:A:48:LEU:HG	1:A:75:VAL:HG11	0.66	1.66	18	5
1:A:13:LEU:CD1	1:A:103:LEU:HD22	0.66	2.21	13	1
1:A:98:ASP:HA	1:A:101:LEU:HD23	0.66	1.66	7	3
1:A:44:TYR:OH	1:A:106:LEU:HD23	0.66	1.90	20	4
1:A:45:CYS:SG	1:A:75:VAL:HG12	0.65	2.31	13	5

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:17:LEU:HB3	1:A:100:LEU:HD23	0.65	1.67	2	11
1:A:36:SER:HB2	1:A:90:ILE:HD13	0.65	1.68	18	5
1:A:47:ALA:HB3	1:A:67:LEU:CD1	0.65	2.21	17	4
1:A:52:ILE:HD13	1:A:76:SER:HA	0.65	1.67	3	4
1:A:10:LEU:HD13	1:A:13:LEU:CD2	0.65	2.17	19	1
1:A:42:GLY:O	1:A:46:ALA:HB2	0.65	1.91	10	3
1:A:35:TRP:O	1:A:36:SER:HB3	0.64	1.92	6	8
1:A:17:LEU:HD11	1:A:103:LEU:HD13	0.64	1.68	17	10
1:A:90:ILE:HD11	1:A:95:PHE:CD2	0.64	2.27	15	3
1:A:13:LEU:HD11	1:A:103:LEU:HD22	0.64	1.70	13	1
1:A:8:THR:HG23	1:A:11:ARG:CZ	0.63	2.24	11	1
1:A:39:LEU:HD21	1:A:101:LEU:CD1	0.63	2.23	11	1
1:A:17:LEU:HD22	1:A:99:LEU:HD21	0.63	1.69	3	1
1:A:101:LEU:HD12	1:A:102:HIS:N	0.63	2.09	3	3
1:A:106:LEU:HD23	1:A:107:PHE:N	0.63	2.08	4	1
1:A:10:LEU:HD12	1:A:107:PHE:HB3	0.63	1.71	17	1
1:A:13:LEU:HD13	1:A:17:LEU:CD1	0.63	2.24	20	1
1:A:99:LEU:HD12	1:A:103:LEU:HD11	0.62	1.71	11	9
1:A:20:ILE:HD12	1:A:96:VAL:CG1	0.62	2.24	19	19
1:A:47:ALA:O	1:A:51:LEU:HD12	0.62	1.95	5	8
1:A:90:ILE:HD11	1:A:95:PHE:CA	0.62	2.24	11	2
1:A:35:TRP:O	1:A:36:SER:CB	0.62	2.47	14	2
1:A:99:LEU:HD12	1:A:103:LEU:HG	0.62	1.72	12	1
1:A:47:ALA:HB3	1:A:67:LEU:HD13	0.62	1.71	17	3
1:A:102:HIS:CE1	1:A:106:LEU:HD13	0.62	2.29	20	1
1:A:17:LEU:HD12	1:A:100:LEU:CA	0.62	2.25	6	4
1:A:17:LEU:HB3	1:A:100:LEU:HD12	0.61	1.71	14	2
1:A:13:LEU:HD21	1:A:103:LEU:O	0.61	1.94	20	1
1:A:101:LEU:HD12	1:A:102:HIS:CD2	0.61	2.30	12	1
1:A:28:LEU:CD2	1:A:96:VAL:HG21	0.61	2.26	3	3
1:A:75:VAL:O	1:A:75:VAL:HG13	0.60	1.96	13	11
1:A:36:SER:HB2	1:A:90:ILE:HG23	0.60	1.73	9	3
1:A:44:TYR:CD2	1:A:67:LEU:HD23	0.60	2.32	6	4
1:A:99:LEU:HG	1:A:103:LEU:HD12	0.60	1.74	5	1
1:A:21:THR:HG23	1:A:22:GLN:HG2	0.60	1.73	5	1
1:A:28:LEU:CD2	1:A:60:ILE:HG23	0.59	2.26	7	1
1:A:51:LEU:HD22	1:A:60:ILE:CG2	0.59	2.17	11	1
1:A:67:LEU:CD2	1:A:103:LEU:HD21	0.59	2.27	6	2
1:A:98:ASP:O	1:A:101:LEU:HB3	0.59	1.96	15	15
1:A:60:ILE:HD13	1:A:64:GLN:CD	0.58	2.19	10	1
1:A:67:LEU:HD21	1:A:103:LEU:CD1	0.58	2.29	11	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:37:ILE:CG2	1:A:46:ALA:HB3	0.58	2.27	5	2
1:A:26:ALA:HB1	1:A:27:PRO:CD	0.58	2.29	11	8
1:A:37:ILE:CG2	1:A:38:ASN:N	0.58	2.66	17	5
1:A:48:LEU:HD23	1:A:71:CYS:SG	0.57	2.40	8	2
1:A:99:LEU:CD1	1:A:103:LEU:HD11	0.57	2.29	9	3
1:A:37:ILE:CG2	1:A:39:LEU:HD23	0.57	2.29	2	2
1:A:39:LEU:HD11	1:A:98:ASP:CG	0.57	2.20	16	1
1:A:21:THR:HG21	1:A:100:LEU:HD13	0.57	1.75	15	1
1:A:51:LEU:O	1:A:54:VAL:HG23	0.57	1.99	8	10
1:A:28:LEU:O	1:A:28:LEU:HD13	0.56	1.99	5	1
1:A:39:LEU:HD13	1:A:102:HIS:HB2	0.56	1.76	4	3
1:A:10:LEU:HG	1:A:14:ILE:HD13	0.56	1.77	17	3
1:A:39:LEU:CD2	1:A:101:LEU:HD11	0.56	2.29	11	1
1:A:90:ILE:HD11	1:A:95:PHE:HA	0.56	1.77	19	6
1:A:46:ALA:O	1:A:49:GLU:HG3	0.56	2.01	9	2
1:A:17:LEU:HD21	1:A:99:LEU:HD23	0.56	1.78	8	1
1:A:34:VAL:HG21	1:A:95:PHE:CB	0.55	2.28	9	6
1:A:34:VAL:CG2	1:A:95:PHE:CD2	0.55	2.89	20	6
1:A:60:ILE:HD12	1:A:64:GLN:CG	0.55	2.30	5	5
1:A:17:LEU:HD11	1:A:103:LEU:HD12	0.55	1.78	19	6
1:A:18:VAL:HG22	1:A:22:GLN:NE2	0.55	2.16	3	1
1:A:39:LEU:HD22	1:A:43:MET:HE2	0.55	1.79	4	1
1:A:28:LEU:HD12	1:A:28:LEU:N	0.55	2.16	11	1
1:A:71:CYS:SG	1:A:75:VAL:HG12	0.55	2.42	16	2
1:A:34:VAL:HG21	1:A:95:PHE:CD1	0.55	2.36	14	1
1:A:36:SER:HB2	1:A:90:ILE:HG21	0.55	1.78	18	4
1:A:44:TYR:CE2	1:A:103:LEU:HD22	0.54	2.37	9	1
1:A:39:LEU:HD12	1:A:102:HIS:CG	0.54	2.37	15	1
1:A:100:LEU:HD21	1:A:104:LYS:NZ	0.54	2.17	20	1
1:A:21:THR:HG23	1:A:22:GLN:HG3	0.54	1.80	18	2
1:A:49:GLU:CB	1:A:75:VAL:HG11	0.54	2.31	9	3
1:A:39:LEU:HD11	1:A:102:HIS:HB2	0.54	1.78	17	1
1:A:14:ILE:HG22	1:A:15:GLU:N	0.54	2.17	20	15
1:A:28:LEU:HD23	1:A:92:VAL:HG12	0.54	1.80	18	1
1:A:21:THR:CG2	1:A:100:LEU:HD13	0.54	2.33	15	1
1:A:39:LEU:HD22	1:A:39:LEU:H	0.54	1.63	15	1
1:A:39:LEU:HD21	1:A:102:HIS:HB2	0.54	1.78	3	3
1:A:60:ILE:HD12	1:A:61:GLU:N	0.54	2.17	6	4
1:A:34:VAL:HG21	1:A:95:PHE:CG	0.54	2.38	6	6
1:A:39:LEU:HD12	1:A:102:HIS:CB	0.54	2.33	15	1
1:A:26:ALA:N	1:A:27:PRO:CD	0.54	2.70	18	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:96:VAL:O	1:A:99:LEU:HD23	0.53	2.03	5	5
1:A:17:LEU:CD1	1:A:103:LEU:HD12	0.53	2.32	9	3
1:A:17:LEU:HD22	1:A:100:LEU:HB2	0.53	1.81	8	1
1:A:13:LEU:HD23	1:A:107:PHE:CB	0.53	2.34	11	2
1:A:45:CYS:HB2	1:A:72:PRO:HD2	0.53	1.81	9	1
1:A:20:ILE:HG13	1:A:96:VAL:HG12	0.53	1.81	20	8
1:A:65:ARG:HG3	1:A:66:MET:N	0.53	2.19	13	1
1:A:10:LEU:HD13	1:A:11:ARG:N	0.53	2.19	4	1
1:A:99:LEU:HD12	1:A:103:LEU:CD1	0.53	2.33	11	8
1:A:10:LEU:CD2	1:A:14:ILE:HD13	0.52	2.34	4	3
1:A:39:LEU:CD2	1:A:39:LEU:H	0.52	2.17	12	1
1:A:37:ILE:HG22	1:A:38:ASN:N	0.52	2.20	10	13
1:A:10:LEU:HD13	1:A:107:PHE:O	0.52	2.05	20	1
1:A:36:SER:CB	1:A:90:ILE:HG21	0.52	2.35	11	1
1:A:10:LEU:C	1:A:10:LEU:HD13	0.52	2.25	15	3
1:A:37:ILE:HD11	1:A:95:PHE:CE1	0.52	2.40	15	2
1:A:28:LEU:HD21	1:A:60:ILE:HG23	0.52	1.82	8	3
1:A:37:ILE:HD13	1:A:95:PHE:CZ	0.52	2.40	8	5
1:A:44:TYR:HE1	1:A:106:LEU:HD22	0.52	1.62	10	1
1:A:17:LEU:HD13	1:A:20:ILE:HD11	0.51	1.80	6	4
1:A:49:GLU:HA	1:A:75:VAL:HG13	0.51	1.83	11	5
1:A:44:TYR:CD1	1:A:102:HIS:CE1	0.51	2.98	3	1
1:A:54:VAL:HG21	1:A:60:ILE:CD1	0.51	2.35	1	1
1:A:18:VAL:HG22	1:A:22:GLN:CD	0.51	2.25	18	1
1:A:10:LEU:HD23	1:A:10:LEU:C	0.51	2.26	3	6
1:A:20:ILE:HD12	1:A:96:VAL:HG11	0.51	1.83	8	1
1:A:39:LEU:HD11	1:A:102:HIS:CG	0.51	2.41	12	1
1:A:43:MET:O	1:A:46:ALA:HB3	0.51	2.06	12	3
1:A:101:LEU:C	1:A:101:LEU:CD2	0.50	2.79	20	7
1:A:52:ILE:HG21	1:A:76:SER:O	0.50	2.05	8	1
1:A:17:LEU:CD2	1:A:99:LEU:HD21	0.50	2.37	5	1
1:A:37:ILE:HD11	1:A:99:LEU:HB2	0.50	1.83	19	2
1:A:52:ILE:HD13	1:A:77:ALA:HB2	0.50	1.84	2	1
1:A:102:HIS:CD2	1:A:106:LEU:HD13	0.50	2.41	6	1
1:A:100:LEU:HD13	1:A:100:LEU:C	0.50	2.26	12	1
1:A:101:LEU:HD21	1:A:105:LYS:CE	0.50	2.37	19	1
1:A:25:LYS:O	1:A:26:ALA:HB3	0.50	2.07	18	1
1:A:17:LEU:HD21	1:A:99:LEU:HD21	0.49	1.83	8	1
1:A:36:SER:OG	1:A:90:ILE:HD13	0.49	2.07	1	2
1:A:63:THR:HG23	1:A:99:LEU:HD11	0.49	1.85	19	1
1:A:100:LEU:HD22	1:A:100:LEU:C	0.49	2.28	3	6

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:39:LEU:HD21	1:A:102:HIS:CB	0.49	2.37	7	1
1:A:44:TYR:CE1	1:A:102:HIS:CE1	0.49	3.00	3	1
1:A:8:THR:HG23	1:A:11:ARG:HE	0.49	1.67	4	1
1:A:101:LEU:HD21	1:A:105:LYS:HE2	0.49	1.83	19	1
1:A:54:VAL:HG21	1:A:60:ILE:HD11	0.49	1.84	1	1
1:A:17:LEU:C	1:A:100:LEU:HD12	0.49	2.28	15	1
1:A:44:TYR:CZ	1:A:70:PHE:CD2	0.49	3.01	7	1
1:A:34:VAL:HG21	1:A:95:PHE:CD2	0.48	2.43	19	4
1:A:17:LEU:N	1:A:17:LEU:CD2	0.48	2.76	9	6
1:A:37:ILE:HD13	1:A:47:ALA:CB	0.48	2.25	19	1
1:A:28:LEU:HD23	1:A:96:VAL:CG2	0.48	2.25	5	1
1:A:37:ILE:HG21	1:A:47:ALA:HB2	0.48	1.85	16	1
1:A:17:LEU:O	1:A:20:ILE:HG12	0.48	2.07	17	8
1:A:101:LEU:CD1	1:A:102:HIS:CD2	0.48	2.96	12	1
1:A:99:LEU:O	1:A:103:LEU:HD23	0.48	2.08	12	1
1:A:34:VAL:HG12	1:A:50:SER:O	0.48	2.09	8	1
1:A:37:ILE:HG22	1:A:39:LEU:HD23	0.48	1.85	8	1
1:A:36:SER:HB2	1:A:90:ILE:CG2	0.48	2.38	9	1
1:A:67:LEU:HD11	1:A:99:LEU:HD11	0.48	1.86	8	1
1:A:37:ILE:CD1	1:A:102:HIS:CD2	0.48	2.96	17	1
1:A:40:THR:O	1:A:41:ALA:HB3	0.48	2.09	19	2
1:A:101:LEU:CD1	1:A:102:HIS:N	0.48	2.74	16	11
1:A:34:VAL:CG2	1:A:95:PHE:CG	0.48	2.97	8	4
1:A:13:LEU:CD2	1:A:107:PHE:HB2	0.48	2.39	9	3
1:A:35:TRP:O	1:A:95:PHE:CE2	0.48	2.66	20	1
1:A:37:ILE:CD1	1:A:95:PHE:CZ	0.47	2.97	2	5
1:A:90:ILE:HD11	1:A:95:PHE:CB	0.47	2.39	11	2
1:A:10:LEU:HD22	1:A:10:LEU:O	0.47	2.08	4	1
1:A:38:ASN:HD21	1:A:46:ALA:HB2	0.47	1.68	4	1
1:A:48:LEU:HD22	1:A:68:SER:CB	0.47	2.38	13	1
1:A:51:LEU:CD1	1:A:67:LEU:HD12	0.47	2.38	16	1
1:A:54:VAL:HG12	1:A:57:CYS:HB2	0.47	1.85	10	1
1:A:10:LEU:HD11	1:A:108:ARG:HD2	0.47	1.84	12	1
1:A:10:LEU:HD13	1:A:10:LEU:C	0.47	2.29	4	1
1:A:10:LEU:HD23	1:A:107:PHE:HA	0.47	1.85	8	1
1:A:39:LEU:HD13	1:A:43:MET:CE	0.47	2.38	12	1
1:A:37:ILE:CD1	1:A:95:PHE:CE1	0.47	2.98	20	2
1:A:102:HIS:O	1:A:106:LEU:HD12	0.47	2.10	17	1
1:A:39:LEU:HD13	1:A:43:MET:HE3	0.47	1.86	12	1
1:A:36:SER:OG	1:A:88:THR:HG23	0.47	2.09	13	1
1:A:51:LEU:HD12	1:A:67:LEU:HD12	0.47	1.86	16	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:52:ILE:HD13	1:A:76:SER:CA	0.47	2.38	3	1
1:A:13:LEU:HD12	1:A:17:LEU:HD12	0.47	1.86	8	1
1:A:102:HIS:CG	1:A:103:LEU:N	0.47	2.82	9	3
1:A:13:LEU:HD13	1:A:107:PHE:CE1	0.47	2.44	14	1
1:A:65:ARG:CG	1:A:66:MET:N	0.47	2.78	1	5
1:A:100:LEU:C	1:A:100:LEU:HD13	0.47	2.30	19	2
1:A:101:LEU:HD22	1:A:101:LEU:O	0.47	2.10	6	12
1:A:13:LEU:HD11	1:A:103:LEU:CB	0.47	2.35	8	1
1:A:35:TRP:HA	1:A:35:TRP:CE3	0.47	2.45	11	1
1:A:106:LEU:HD12	1:A:106:LEU:C	0.47	2.30	15	1
1:A:67:LEU:HD23	1:A:103:LEU:HD21	0.47	1.85	16	1
1:A:98:ASP:HA	1:A:101:LEU:CD1	0.46	2.40	8	1
1:A:44:TYR:CE2	1:A:103:LEU:CD2	0.46	2.98	9	2
1:A:20:ILE:CD1	1:A:99:LEU:HD21	0.46	2.40	14	2
1:A:17:LEU:HD22	1:A:20:ILE:HD11	0.46	1.87	20	1
1:A:104:LYS:HG2	1:A:105:LYS:N	0.46	2.24	2	2
1:A:67:LEU:HD21	1:A:99:LEU:HD11	0.46	1.88	8	1
1:A:52:ILE:HD13	1:A:52:ILE:C	0.46	2.31	6	4
1:A:26:ALA:HB1	1:A:97:LYS:CG	0.46	2.41	18	1
1:A:35:TRP:CH2	1:A:89:LYS:CE	0.46	2.99	1	5
1:A:38:ASN:O	1:A:43:MET:HB3	0.46	2.11	13	5
1:A:29:CYS:SG	1:A:54:VAL:HG11	0.46	2.51	12	1
1:A:43:MET:CE	1:A:102:HIS:CD2	0.46	2.99	2	1
1:A:102:HIS:CE1	1:A:106:LEU:HD11	0.46	2.45	5	1
1:A:102:HIS:CD2	1:A:103:LEU:N	0.46	2.83	9	2
1:A:99:LEU:O	1:A:103:LEU:HB2	0.46	2.10	12	1
1:A:13:LEU:CD1	1:A:107:PHE:CD2	0.46	2.98	6	1
1:A:13:LEU:CD1	1:A:107:PHE:CE1	0.46	2.99	14	1
1:A:10:LEU:HD22	1:A:14:ILE:HD13	0.45	1.89	1	2
1:A:99:LEU:CD1	1:A:103:LEU:CD1	0.45	2.94	11	12
1:A:48:LEU:HD22	1:A:68:SER:CA	0.45	2.40	4	5
1:A:43:MET:HE3	1:A:106:LEU:CD1	0.45	2.41	12	1
1:A:43:MET:CE	1:A:44:TYR:CZ	0.45	2.99	17	1
1:A:43:MET:CE	1:A:44:TYR:CE1	0.45	3.00	17	1
1:A:102:HIS:CE1	1:A:106:LEU:CD1	0.45	2.99	20	1
1:A:28:LEU:HD21	1:A:60:ILE:CG2	0.45	2.42	17	1
1:A:44:TYR:CG	1:A:70:PHE:CB	0.45	3.00	4	1
1:A:34:VAL:CG2	1:A:95:PHE:CD1	0.45	3.00	14	3
1:A:98:ASP:HA	1:A:101:LEU:HD21	0.45	1.86	12	1
1:A:44:TYR:CE2	1:A:106:LEU:CD2	0.45	2.99	7	2
1:A:36:SER:HB3	1:A:90:ILE:HD13	0.45	1.88	12	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:52:ILE:HD13	1:A:76:SER:C	0.45	2.32	13	1
1:A:20:ILE:CD1	1:A:96:VAL:CG1	0.45	2.94	13	12
1:A:11:ARG:CB	1:A:107:PHE:CZ	0.45	3.00	8	1
1:A:28:LEU:H	1:A:93:ALA:HB2	0.45	1.72	8	1
1:A:20:ILE:CD1	1:A:96:VAL:HG13	0.45	2.38	18	1
1:A:16:GLU:O	1:A:20:ILE:HG23	0.45	2.12	19	1
1:A:44:TYR:CZ	1:A:102:HIS:NE2	0.45	2.85	16	1
1:A:34:VAL:HG23	1:A:95:PHE:CE1	0.45	2.47	4	4
1:A:101:LEU:HD13	1:A:102:HIS:CA	0.45	2.41	5	4
1:A:13:LEU:HD13	1:A:103:LEU:HB3	0.45	1.89	13	2
1:A:48:LEU:HD21	1:A:68:SER:HB2	0.45	1.87	12	1
1:A:43:MET:CG	1:A:102:HIS:CD2	0.45	3.00	5	1
1:A:35:TRP:CZ3	1:A:89:LYS:CE	0.45	3.00	9	2
1:A:39:LEU:CD2	1:A:39:LEU:N	0.45	2.79	12	1
1:A:37:ILE:CG2	1:A:47:ALA:N	0.45	2.80	16	1
1:A:17:LEU:HD22	1:A:99:LEU:HG	0.44	1.87	12	2
1:A:38:ASN:OD1	1:A:40:THR:HG23	0.44	2.11	15	2
1:A:8:THR:HG23	1:A:11:ARG:NE	0.44	2.26	3	2
1:A:10:LEU:HD12	1:A:107:PHE:CB	0.44	2.42	17	1
1:A:26:ALA:N	1:A:27:PRO:HD3	0.44	2.27	18	1
1:A:13:LEU:HD23	1:A:17:LEU:HD11	0.44	1.89	1	2
1:A:13:LEU:CD1	1:A:17:LEU:CD1	0.44	2.95	11	2
1:A:101:LEU:CG	1:A:102:HIS:N	0.44	2.80	7	3
1:A:39:LEU:HD12	1:A:102:HIS:CD2	0.44	2.48	15	1
1:A:13:LEU:C	1:A:13:LEU:CD1	0.44	2.80	20	1
1:A:43:MET:HE2	1:A:44:TYR:CD1	0.44	2.48	8	1
1:A:48:LEU:HD22	1:A:68:SER:N	0.44	2.27	9	2
1:A:13:LEU:CD1	1:A:103:LEU:HD13	0.44	2.42	19	1
1:A:20:ILE:HB	1:A:96:VAL:HG11	0.44	1.88	15	5
1:A:35:TRP:CZ3	1:A:88:THR:O	0.44	2.71	3	3
1:A:20:ILE:CG1	1:A:96:VAL:CG1	0.44	2.96	6	6
1:A:48:LEU:HD22	1:A:68:SER:HB2	0.44	1.90	13	1
1:A:90:ILE:HD11	1:A:95:PHE:HB2	0.44	1.90	11	2
1:A:44:TYR:CA	1:A:67:LEU:HD22	0.44	2.41	9	1
1:A:47:ALA:HB1	1:A:99:LEU:HD13	0.44	1.90	9	1
1:A:60:ILE:HD13	1:A:64:GLN:CG	0.44	2.43	10	1
1:A:44:TYR:CE1	1:A:103:LEU:CD1	0.44	3.00	12	1
1:A:28:LEU:HD22	1:A:96:VAL:CG2	0.43	2.43	9	1
1:A:39:LEU:HD22	1:A:102:HIS:CG	0.43	2.47	20	1
1:A:17:LEU:CD1	1:A:103:LEU:CB	0.43	2.96	4	3
1:A:43:MET:CE	1:A:102:HIS:CE1	0.43	3.02	3	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:44:TYR:CD1	1:A:102:HIS:NE2	0.43	2.86	3	1
1:A:38:ASN:O	1:A:40:THR:N	0.43	2.52	14	2
1:A:101:LEU:CD2	1:A:105:LYS:CD	0.43	2.97	9	8
1:A:97:LYS:O	1:A:100:LEU:HB3	0.43	2.13	8	1
1:A:8:THR:CG2	1:A:9:ALA:N	0.43	2.82	6	1
1:A:43:MET:HE1	1:A:106:LEU:HD13	0.43	1.89	10	1
1:A:18:VAL:O	1:A:22:GLN:CG	0.43	2.67	15	1
1:A:51:LEU:HA	1:A:54:VAL:HG23	0.43	1.91	2	1
1:A:36:SER:HA	1:A:95:PHE:CD2	0.43	2.48	3	4
1:A:14:ILE:CD1	1:A:107:PHE:HB3	0.43	2.44	8	1
1:A:17:LEU:HB3	1:A:100:LEU:CD2	0.43	2.42	7	2
1:A:39:LEU:N	1:A:39:LEU:HD13	0.43	2.29	15	1
1:A:10:LEU:CA	1:A:107:PHE:CE1	0.43	3.02	2	1
1:A:51:LEU:HD13	1:A:60:ILE:HD13	0.43	1.90	9	1
1:A:60:ILE:HD13	1:A:64:GLN:HG3	0.43	1.91	10	1
1:A:38:ASN:HB2	1:A:46:ALA:HB2	0.43	1.90	18	1
1:A:50:SER:HB3	1:A:95:PHE:CZ	0.42	2.49	5	1
1:A:39:LEU:HD23	1:A:102:HIS:ND1	0.42	2.30	6	1
1:A:47:ALA:CB	1:A:67:LEU:HD13	0.42	2.44	7	1
1:A:28:LEU:O	1:A:29:CYS:CB	0.42	2.68	8	1
1:A:39:LEU:N	1:A:39:LEU:HD22	0.42	2.29	12	1
1:A:10:LEU:CD1	1:A:13:LEU:HD23	0.42	2.22	19	1
1:A:35:TRP:O	1:A:95:PHE:CE1	0.42	2.72	2	3
1:A:49:GLU:CB	1:A:75:VAL:CG2	0.42	2.97	20	3
1:A:63:THR:HA	1:A:66:MET:HG2	0.42	1.90	7	2
1:A:103:LEU:N	1:A:103:LEU:CD2	0.42	2.82	12	1
1:A:8:THR:HG23	1:A:11:ARG:HH11	0.42	1.75	1	1
1:A:17:LEU:CD1	1:A:99:LEU:CD2	0.42	2.98	10	2
1:A:44:TYR:CZ	1:A:102:HIS:CD2	0.42	3.07	16	1
1:A:75:VAL:O	1:A:75:VAL:CG1	0.42	2.67	13	3
1:A:11:ARG:CG	1:A:12:GLU:N	0.42	2.83	8	1
1:A:20:ILE:HD12	1:A:99:LEU:CD2	0.42	2.44	16	1
1:A:34:VAL:HG23	1:A:90:ILE:HG13	0.42	1.92	16	1
1:A:52:ILE:HG23	1:A:53:ASN:HD22	0.42	1.74	3	1
1:A:96:VAL:O	1:A:99:LEU:HB3	0.42	2.14	11	2
1:A:18:VAL:HA	1:A:21:THR:HG22	0.42	1.91	7	1
1:A:37:ILE:CG2	1:A:39:LEU:HD12	0.42	2.45	17	1
1:A:39:LEU:O	1:A:102:HIS:CE1	0.42	2.72	14	1
1:A:43:MET:CG	1:A:102:HIS:CE1	0.42	3.02	19	1
1:A:104:LYS:CB	1:A:104:LYS:NZ	0.42	2.83	2	1
1:A:36:SER:HA	1:A:95:PHE:CE2	0.42	2.50	11	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:43:MET:SD	1:A:102:HIS:CE1	0.42	3.13	11	1
1:A:49:GLU:CA	1:A:75:VAL:HG13	0.41	2.44	11	1
1:A:51:LEU:HB3	1:A:60:ILE:HD13	0.41	1.92	4	1
1:A:101:LEU:HD22	1:A:105:LYS:HD2	0.41	1.92	5	2
1:A:100:LEU:HD12	1:A:100:LEU:O	0.41	2.15	6	1
1:A:17:LEU:HD13	1:A:99:LEU:CD2	0.41	2.45	10	1
1:A:44:TYR:CD1	1:A:103:LEU:HD21	0.41	2.51	20	1
1:A:60:ILE:O	1:A:60:ILE:HD12	0.41	2.14	14	1
1:A:39:LEU:HD11	1:A:98:ASP:OD1	0.41	2.16	16	1
1:A:44:TYR:CE2	1:A:103:LEU:HD23	0.41	2.50	3	1
1:A:29:CYS:O	1:A:30:ASN:HB3	0.41	2.16	7	1
1:A:63:THR:HG21	1:A:99:LEU:HD21	0.41	1.91	7	1
1:A:13:LEU:CD2	1:A:107:PHE:CB	0.41	2.98	9	1
1:A:50:SER:CB	1:A:95:PHE:CZ	0.41	3.04	5	1
1:A:17:LEU:HB3	1:A:100:LEU:HB2	0.41	1.93	14	1
1:A:66:MET:O	1:A:70:PHE:CD2	0.41	2.74	14	1
1:A:72:PRO:O	1:A:73:HIS:CG	0.41	2.74	2	2
1:A:43:MET:HG2	1:A:102:HIS:CG	0.41	2.51	5	2
1:A:101:LEU:CD2	1:A:105:LYS:HD2	0.41	2.46	11	4
1:A:102:HIS:O	1:A:106:LEU:HD13	0.41	2.15	5	1
1:A:13:LEU:HD13	1:A:107:PHE:HD2	0.41	1.71	2	1
1:A:37:ILE:CG2	1:A:39:LEU:CD2	0.41	2.99	2	1
1:A:76:SER:OG	1:A:77:ALA:N	0.41	2.53	6	1
1:A:35:TRP:CZ3	1:A:89:LYS:HE3	0.41	2.51	9	1
1:A:90:ILE:HD11	1:A:95:PHE:HD1	0.41	1.76	9	1
1:A:53:ASN:ND2	1:A:77:ALA:CB	0.41	2.84	11	1
1:A:23:ASN:O	1:A:24:GLN:O	0.41	2.39	14	1
1:A:17:LEU:CD2	1:A:99:LEU:CD2	0.41	2.99	5	1
1:A:26:ALA:CB	1:A:27:PRO:CD	0.41	2.97	5	1
1:A:35:TRP:CE2	1:A:89:LYS:CE	0.41	3.04	10	1
1:A:39:LEU:CD2	1:A:102:HIS:ND1	0.41	2.83	19	1
1:A:39:LEU:HA	1:A:43:MET:HB3	0.40	1.92	13	1
1:A:106:LEU:HG	1:A:107:PHE:N	0.40	2.31	15	1
1:A:104:LYS:O	1:A:108:ARG:CB	0.40	2.69	20	1
1:A:13:LEU:HD23	1:A:107:PHE:HB2	0.40	1.91	20	1
1:A:17:LEU:CB	1:A:100:LEU:CD1	0.40	2.98	17	1
1:A:17:LEU:HD13	1:A:99:LEU:HG	0.40	1.93	18	1
1:A:13:LEU:CD2	1:A:103:LEU:CD2	0.40	3.00	10	1
1:A:48:LEU:CG	1:A:75:VAL:HG11	0.40	2.45	11	1
1:A:10:LEU:HD11	1:A:108:ARG:CD	0.40	2.45	12	1
1:A:35:TRP:CH2	1:A:89:LYS:HE2	0.40	2.52	15	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:35:TRP:CZ2	1:A:89:LYS:NZ	0.40	2.85	17	1
1:A:36:SER:O	1:A:37:ILE:O	0.40	2.40	17	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	94/113 (83%)	74±2 (79±3%)	14±3 (15±3%)	5±2 (5±2%)	3 23
All	All	1880/2260 (83%)	1489 (79%)	289 (15%)	102 (5%)	3 23

All 17 unique Ramachandran outliers are listed below. They are sorted by the frequency of occurrence in the ensemble.

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	75	VAL	19
1	A	24	GLN	11
1	A	39	LEU	11
1	A	36	SER	9
1	A	110	GLY	7
1	A	29	CYS	6
1	A	73	HIS	6
1	A	40	THR	6
1	A	77	ALA	6
1	A	41	ALA	5
1	A	30	ASN	5
1	A	23	ASN	4
1	A	31	GLY	3
1	A	28	LEU	1
1	A	33	MET	1
1	A	37	ILE	1
1	A	26	ALA	1

6.3.2 Protein sidechains (i)

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

Mol	Chain	Analysed	Rotameric	Outliers	Percentiles
1	A	81/97 (84%)	56±3 (69±3%)	25±3 (31±3%)	1 15
All	All	1620/1940 (84%)	1121 (69%)	499 (31%)	1 15

All 65 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	13	LEU	20
1	A	18	VAL	20
1	A	58	SER	20
1	A	88	THR	20
1	A	92	VAL	20
1	A	94	GLN	20
1	A	99	LEU	20
1	A	101	LEU	16
1	A	50	SER	15
1	A	55	SER	14
1	A	107	PHE	14
1	A	57	CYS	13
1	A	100	LEU	13
1	A	11	ARG	12
1	A	36	SER	11
1	A	66	MET	11
1	A	73	HIS	11
1	A	74	LYS	11
1	A	61	GLU	11
1	A	34	VAL	11
1	A	43	MET	10
1	A	89	LYS	10
1	A	52	ILE	9
1	A	106	LEU	9
1	A	104	LYS	8
1	A	53	ASN	8
1	A	29	CYS	7
1	A	105	LYS	7
1	A	17	LEU	7

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	25	LYS	7
1	A	62	LYS	7
1	A	76	SER	7
1	A	71	CYS	6
1	A	7	SER	5
1	A	16	GLU	5
1	A	35	TRP	5
1	A	102	HIS	5
1	A	23	ASN	5
1	A	37	ILE	5
1	A	64	GLN	4
1	A	30	ASN	4
1	A	12	GLU	4
1	A	39	LEU	4
1	A	63	THR	4
1	A	24	GLN	4
1	A	60	ILE	3
1	A	75	VAL	3
1	A	38	ASN	3
1	A	10	LEU	3
1	A	22	GLN	3
1	A	40	THR	3
1	A	14	ILE	2
1	A	28	LEU	2
1	A	65	ARG	2
1	A	90	ILE	2
1	A	103	LEU	2
1	A	108	ARG	2
1	A	98	ASP	2
1	A	97	LYS	2
1	A	49	GLU	1
1	A	8	THR	1
1	A	33	MET	1
1	A	45	CYS	1
1	A	19	ASN	1
1	A	32	SER	1

6.3.3 RNA (i)

There are no RNA molecules in this entry.

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

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

6.5 Carbohydrates (i)

There are no monosaccharides in this entry.

6.6 Ligand geometry (i)

There are no ligands in this entry.

6.7 Other polymers (i)

There are no such molecules in this entry.

6.8 Polymer linkage issues (i)

There are no chain breaks in this entry.

7 Chemical shift validation (i)

The completeness of assignment taking into account all chemical shift lists is 85% for the well-defined parts and 83% for the entire structure.

7.1 Chemical shift list 1

File name: working_cs.cif

Chemical shift list name: *shift_set_1*

7.1.1 Bookkeeping (i)

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

Total number of shifts	1269
Number of shifts mapped to atoms	1269
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 (i)

The following table shows the suggested chemical shift referencing corrections.

Nucleus	# values	Correction ± precision, *ppm*	Suggested action
$^{13}C_{\alpha}$	111	-0.59 ± 0.11	Should be checked
$^{13}C_{\beta}$	103	0.10 ± 0.09	None needed (< 0.5 ppm)
$^{13}C'$	99	-0.35 ± 0.18	None needed (< 0.5 ppm)
^{15}N	105	1.37 ± 0.35	Should be applied

7.1.3 Completeness of resonance assignments (i)

The following table shows the completeness of the chemical shift assignments for the well-defined regions of the structure. The overall completeness is 85%, i.e. 1093 atoms were assigned a chemical shift out of a possible 1284. 0 out of 19 assigned methyl groups (LEU and VAL) were assigned stereospecifically.

	Total	^{1}H	^{13}C	^{15}N
Backbone	462/471 (98%)	188/191 (98%)	183/188 (97%)	91/92 (99%)
Sidechain	607/747 (81%)	407/491 (83%)	195/231 (84%)	5/25 (20%)

Continued on next page...

Continued from previous page...

	Total	^{1}H	^{13}C	^{15}N
Aromatic	24/66 (36%)	12/33 (36%)	12/29 (41%)	0/4 (0%)
Overall	1093/1284 (85%)	607/715 (85%)	390/448 (87%)	96/121 (79%)

The following table shows the completeness of the chemical shift assignments for the full structure. The overall completeness is 83%, i.e. 1269 atoms were assigned a chemical shift out of a possible 1536. 0 out of 22 assigned methyl groups (LEU and VAL) were assigned stereospecifically.

	Total	^{1}H	^{13}C	^{15}N
Backbone	536/563 (95%)	221/229 (97%)	210/226 (93%)	105/108 (97%)
Sidechain	699/879 (80%)	468/576 (81%)	225/270 (83%)	6/33 (18%)
Aromatic	34/94 (36%)	17/47 (36%)	17/41 (41%)	0/6 (0%)
Overall	1269/1536 (83%)	706/852 (83%)	452/537 (84%)	111/147 (76%)

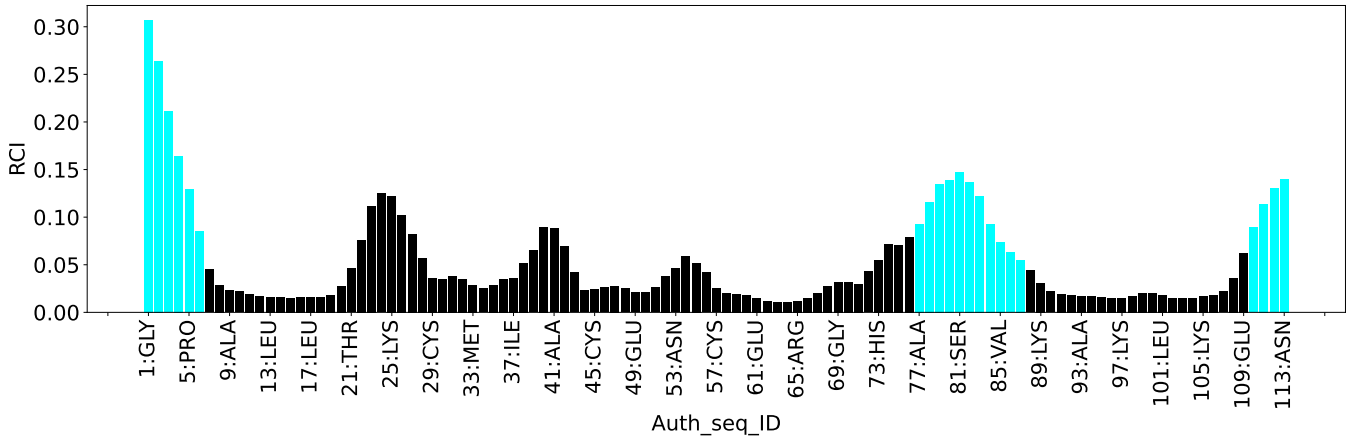
7.1.4 Statistically unusual chemical shifts (i)

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 (i)

8.1 Conformationally restricting restraints (i)

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

Description	Value
Total distance restraints	1556
Intra-residue (|i-j|=0)	824
Sequential (|i-j|=1)	382
Medium range (|i-j|>1 and |i-j|<5)	181
Long range (|i-j|≥5)	169
Inter-chain	0
Hydrogen bond restraints	0
Disulfide bond restraints	0
Total dihedral-angle restraints	150
Number of unmapped restraints	0
Number of restraints per residue	15.1
Number of long range restraints per residue[1]	1.5

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

8.2 Residual restraint violations (i)

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

8.2.1 Average number of distance violations per model (i)

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

Bins (Å)	Average number of violations per model	Max (Å)
0.1-0.2 (Small)	5.1	0.19
0.2-0.5 (Medium)	None	None
>0.5 (Large)	None	None

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

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

Bins (°)	Average number of violations per model	Max (°)
1.0-10.0 (Small)	49.8	10.0
10.0-20.0 (Medium)	10.5	20.0
>20.0 (Large)	5.6	45.6

9 Distance violation analysis (i)

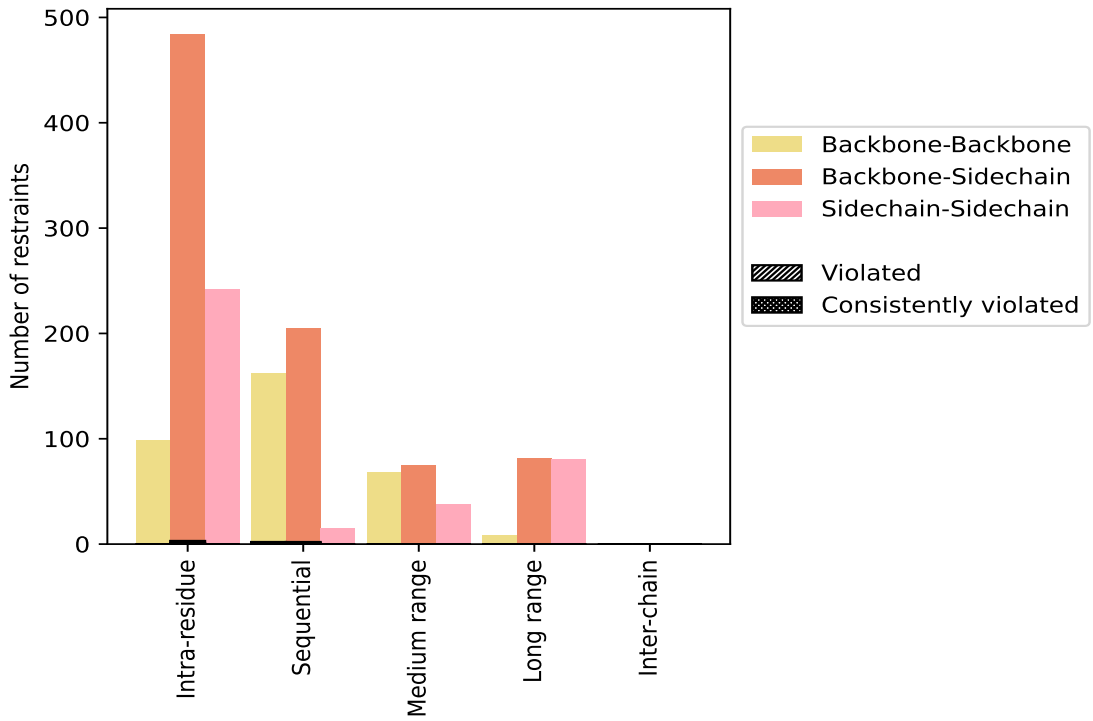
9.1 Summary of distance violations (i)

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

Restraints type	Count	%[1]	Violated[3]			Consistently Violated[4]		
			Count	%[2]	%[1]	Count	%[2]	%[1]
Intra-residue (|i-j|=0)	824	53.0	3	0.4	0.2	1	0.1	0.1
Backbone-Backbone	98	6.3	0	0.0	0.0	0	0.0	0.0
Backbone-Sidechain	484	31.1	3	0.6	0.2	1	0.2	0.1
Sidechain-Sidechain	242	15.6	0	0.0	0.0	0	0.0	0.0
Sequential (|i-j|=1)	382	24.6	4	1.0	0.3	2	0.5	0.1
Backbone-Backbone	162	10.4	2	1.2	0.1	1	0.6	0.1
Backbone-Sidechain	205	13.2	2	1.0	0.1	1	0.5	0.1
Sidechain-Sidechain	15	1.0	0	0.0	0.0	0	0.0	0.0
Medium range (|i-j|>1 & |i-j|<5)	181	11.6	0	0.0	0.0	0	0.0	0.0
Backbone-Backbone	68	4.4	0	0.0	0.0	0	0.0	0.0
Backbone-Sidechain	75	4.8	0	0.0	0.0	0	0.0	0.0
Sidechain-Sidechain	38	2.4	0	0.0	0.0	0	0.0	0.0
Long range (|i-j|≥5)	169	10.9	0	0.0	0.0	0	0.0	0.0
Backbone-Backbone	8	0.5	0	0.0	0.0	0	0.0	0.0
Backbone-Sidechain	81	5.2	0	0.0	0.0	0	0.0	0.0
Sidechain-Sidechain	80	5.1	0	0.0	0.0	0	0.0	0.0
Inter-chain	0	0.0	0	0.0	0.0	0	0.0	0.0
Backbone-Backbone	0	0.0	0	0.0	0.0	0	0.0	0.0
Backbone-Sidechain	0	0.0	0	0.0	0.0	0	0.0	0.0
Sidechain-Sidechain	0	0.0	0	0.0	0.0	0	0.0	0.0
Hydrogen bond	0	0.0	0	0.0	0.0	0	0.0	0.0
Disulfide bond	0	0.0	0	0.0	0.0	0	0.0	0.0
Total	1556	100.0	7	0.4	0.4	3	0.2	0.2
Backbone-Backbone	336	21.6	2	0.6	0.1	1	0.3	0.1
Backbone-Sidechain	845	54.3	5	0.6	0.3	2	0.2	0.1
Sidechain-Sidechain	375	24.1	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	2	3	0	0	0	5	0.16	0.18	0.02	0.17
2	2	3	0	0	0	5	0.16	0.19	0.02	0.17
3	2	3	0	0	0	5	0.16	0.19	0.02	0.17
4	2	3	0	0	0	5	0.16	0.19	0.02	0.17
5	1	3	0	0	0	4	0.16	0.19	0.02	0.17
6	2	3	0	0	0	5	0.16	0.19	0.02	0.17
7	2	3	0	0	0	5	0.16	0.18	0.02	0.16
8	2	3	0	0	0	5	0.16	0.18	0.02	0.17
9	2	3	0	0	0	5	0.15	0.18	0.02	0.14
10	2	3	0	0	0	5	0.16	0.18	0.02	0.17
11	2	3	0	0	0	5	0.15	0.18	0.02	0.13

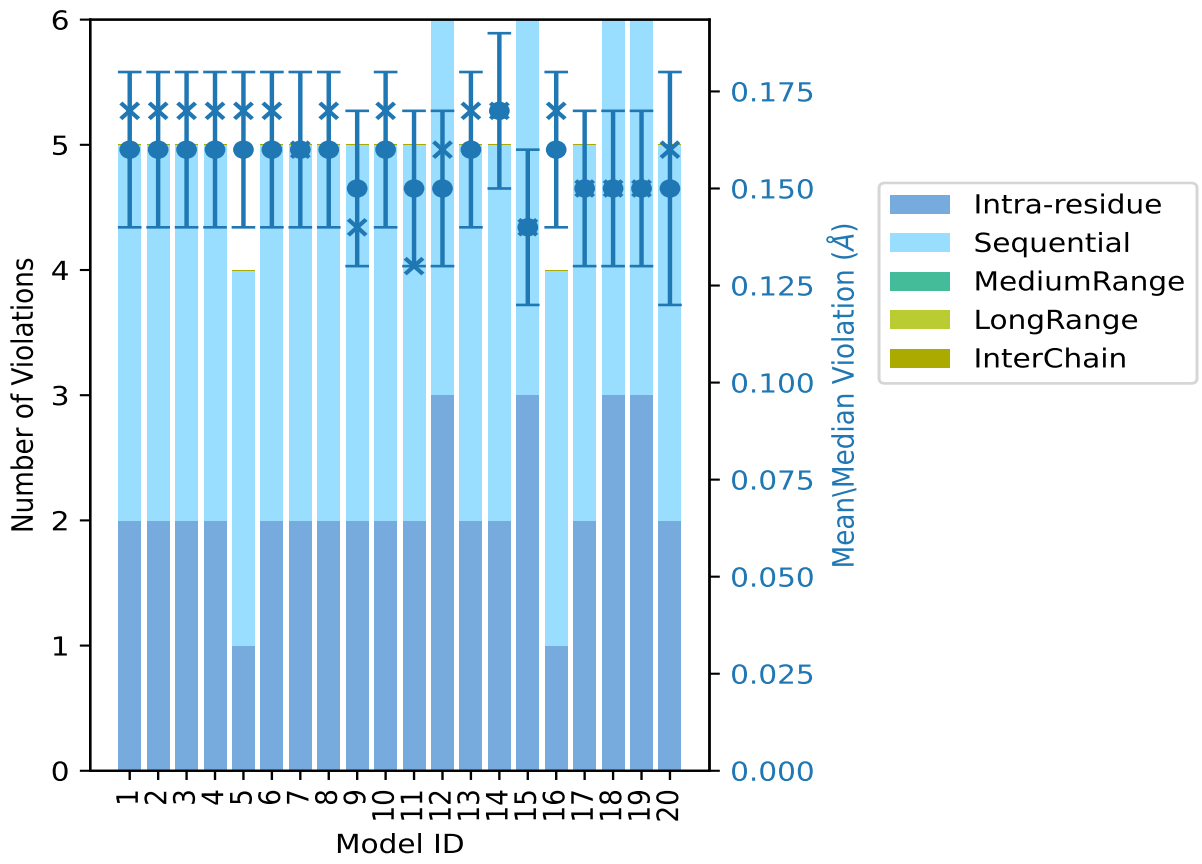
Continued on next page...

Continued from previous page...

Model ID	Number of violations						Mean (Å)	Max (Å)	SD[6] (Å)	Median (Å)
	IR[1]	SQ[2]	MR[3]	LR[4]	IC[5]	Total				
12	3	3	0	0	0	6	0.15	0.17	0.02	0.16
13	2	3	0	0	0	5	0.16	0.18	0.02	0.17
14	2	3	0	0	0	5	0.17	0.19	0.02	0.17
15	3	3	0	0	0	6	0.14	0.17	0.02	0.14
16	1	3	0	0	0	4	0.16	0.18	0.02	0.17
17	2	3	0	0	0	5	0.15	0.17	0.02	0.15
18	3	3	0	0	0	6	0.15	0.17	0.02	0.15
19	3	3	0	0	0	6	0.15	0.18	0.02	0.15
20	2	3	0	0	0	5	0.15	0.19	0.03	0.16

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

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



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

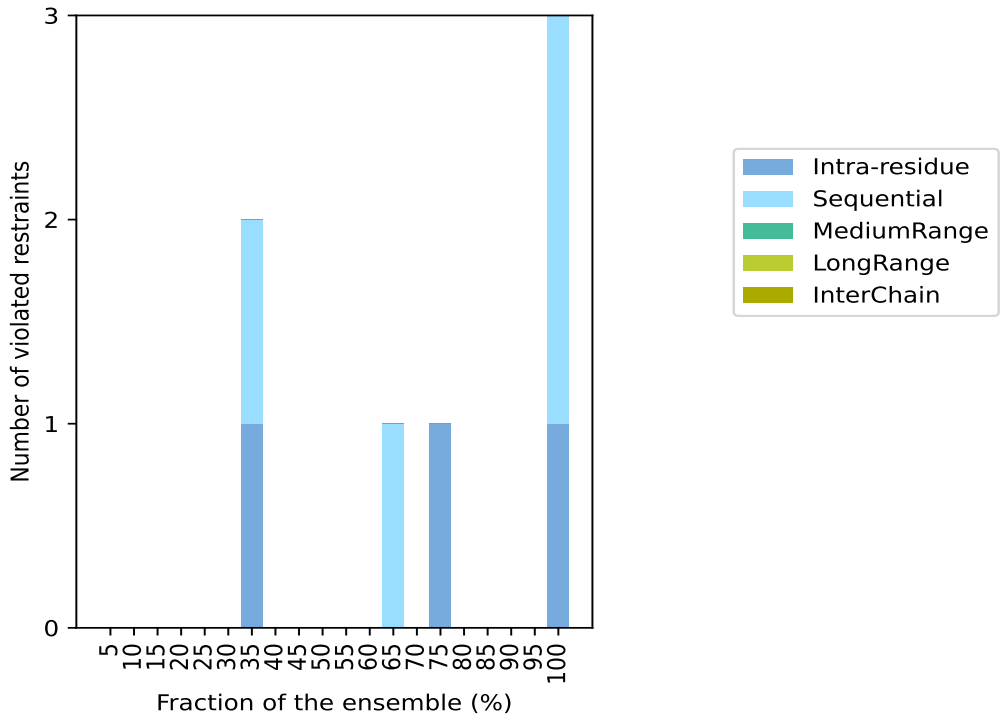
9.3 Distance violation statistics for the ensemble (i)

Violation analysis may find that some restraints are violated in few models and some are violated in most of models. The following table provides this information as number of violated restraints for a given fraction of the ensemble. In total, 1549(IR:821, SQ:378, MR:181, LR:169, 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]	%
0	0	0	0	0	0	1	5.0
0	0	0	0	0	0	2	10.0
0	0	0	0	0	0	3	15.0
0	0	0	0	0	0	4	20.0
0	0	0	0	0	0	5	25.0
0	0	0	0	0	0	6	30.0
1	1	0	0	0	2	7	35.0
0	0	0	0	0	0	8	40.0
0	0	0	0	0	0	9	45.0
0	0	0	0	0	0	10	50.0
0	0	0	0	0	0	11	55.0
0	0	0	0	0	0	12	60.0
0	1	0	0	0	1	13	65.0
0	0	0	0	0	0	14	70.0
1	0	0	0	0	1	15	75.0
0	0	0	0	0	0	16	80.0
0	0	0	0	0	0	17	85.0
0	0	0	0	0	0	18	90.0
0	0	0	0	0	0	19	95.0
1	2	0	0	0	3	20	100.0

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

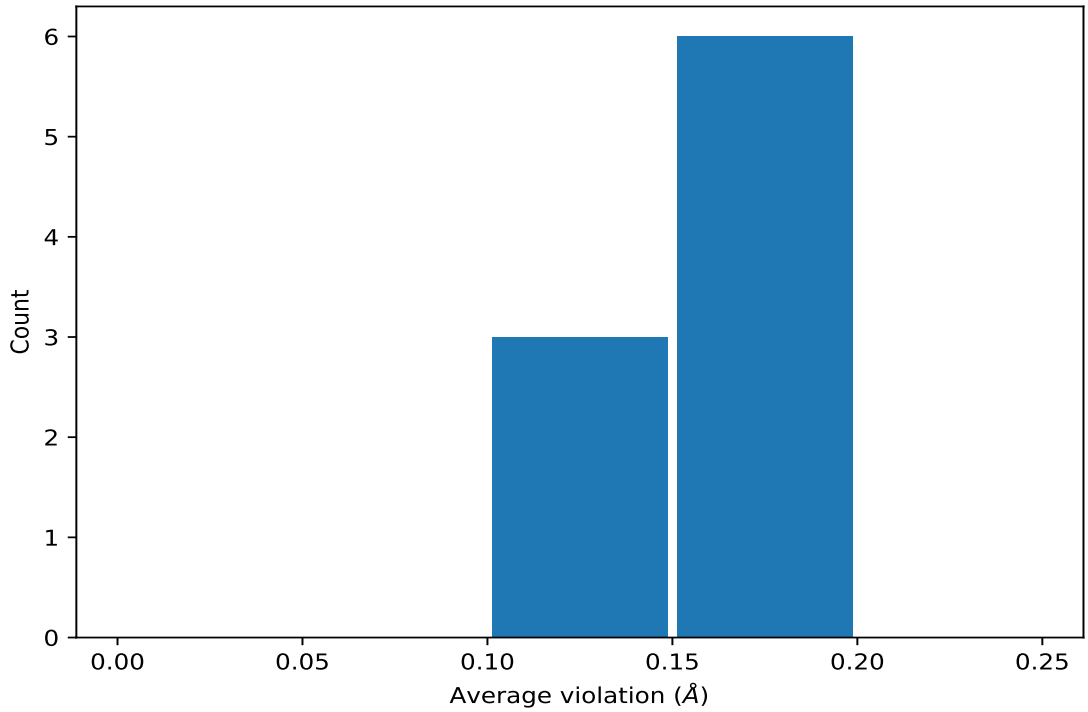
9.3.1 Bar graph : Distance violation statistics for the ensemble (i)



9.4 Most violated distance restraints in the ensemble (i)

9.4.1 Histogram : Distribution of mean distance violations (i)

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



9.4.2 Table: Most violated distance restraints (i)

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

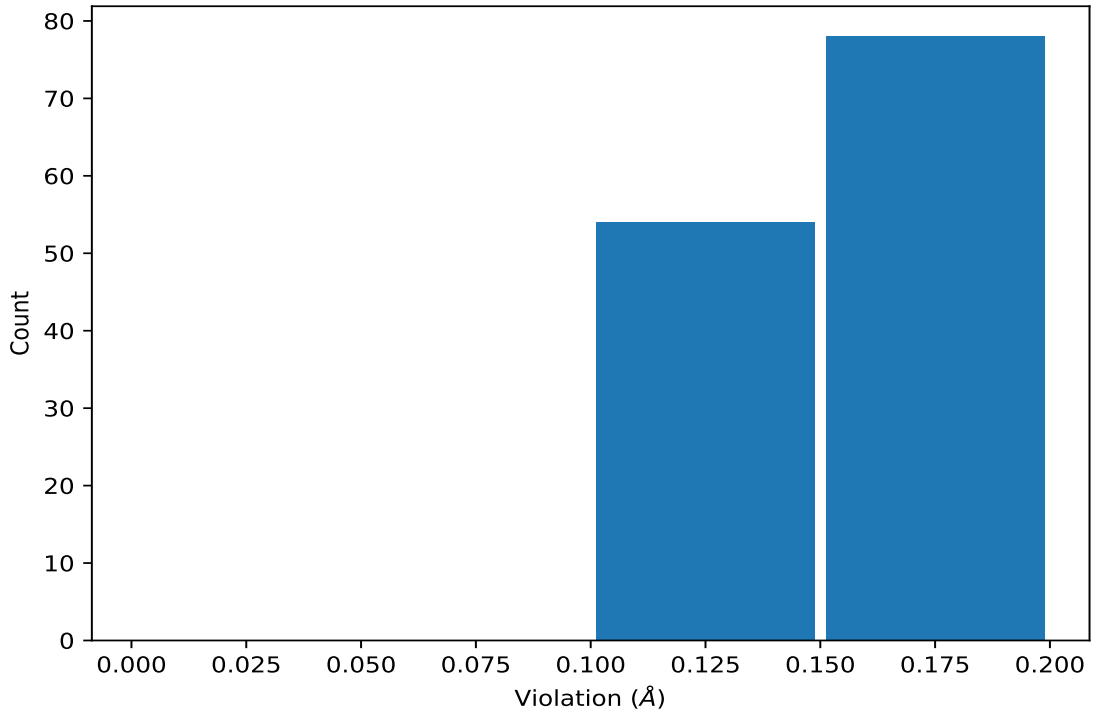
Key	Atom-1	Atom-2	Models[1]	Mean (Å)	SD[1] (Å)	Median (Å)
(1,1183)	1:A:76:SER:H	1:A:77:ALA:H	20	0.17	0.01	0.17
(1,444)	1:A:98:ASP:HA	1:A:99:LEU:HB3	20	0.17	0.01	0.17
(1,551)	1:A:27:PRO:HA	1:A:27:PRO:HG2	20	0.13	0.0	0.13
(1,999)	1:A:37:ILE:H	1:A:37:ILE:HG21	15	0.16	0.01	0.16
(1,999)	1:A:37:ILE:H	1:A:37:ILE:HG22	15	0.16	0.01	0.16
(1,999)	1:A:37:ILE:H	1:A:37:ILE:HG23	15	0.16	0.01	0.16
(1,1184)	1:A:77:ALA:H	1:A:76:SER:HA	13	0.19	0.0	0.19
(1,1182)	1:A:76:SER:H	1:A:76:SER:HB3	7	0.14	0.01	0.14
(1,1185)	1:A:77:ALA:H	1:A:76:SER:HB3	7	0.13	0.0	0.13

[1]Number of violated models, [2]Standard deviation

9.5 All violated distance restraints (i)

9.5.1 Histogram : Distribution of distance violations (i)

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



9.5.2 Table : All distance violations (i)

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

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1184)	1:A:77:ALA:H	1:A:76:SER:HA	2	0.19
(1,1184)	1:A:77:ALA:H	1:A:76:SER:HA	3	0.19
(1,1184)	1:A:77:ALA:H	1:A:76:SER:HA	4	0.19
(1,1184)	1:A:77:ALA:H	1:A:76:SER:HA	5	0.19
(1,1184)	1:A:77:ALA:H	1:A:76:SER:HA	6	0.19
(1,1184)	1:A:77:ALA:H	1:A:76:SER:HA	14	0.19
(1,1184)	1:A:77:ALA:H	1:A:76:SER:HA	20	0.19
(1,999)	1:A:37:ILE:H	1:A:37:ILE:HG21	14	0.18
(1,999)	1:A:37:ILE:H	1:A:37:ILE:HG22	14	0.18
(1,999)	1:A:37:ILE:H	1:A:37:ILE:HG23	14	0.18

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,444)	1:A:98:ASP:HA	1:A:99:LEU:HB3	10	0.18
(1,444)	1:A:98:ASP:HA	1:A:99:LEU:HB3	19	0.18
(1,1184)	1:A:77:ALA:H	1:A:76:SER:HA	1	0.18
(1,1184)	1:A:77:ALA:H	1:A:76:SER:HA	7	0.18
(1,1184)	1:A:77:ALA:H	1:A:76:SER:HA	8	0.18
(1,1184)	1:A:77:ALA:H	1:A:76:SER:HA	10	0.18
(1,1184)	1:A:77:ALA:H	1:A:76:SER:HA	13	0.18
(1,1184)	1:A:77:ALA:H	1:A:76:SER:HA	16	0.18
(1,1183)	1:A:76:SER:H	1:A:77:ALA:H	9	0.18
(1,1183)	1:A:76:SER:H	1:A:77:ALA:H	11	0.18
(1,1183)	1:A:76:SER:H	1:A:77:ALA:H	13	0.18
(1,1183)	1:A:76:SER:H	1:A:77:ALA:H	16	0.18
(1,1183)	1:A:76:SER:H	1:A:77:ALA:H	19	0.18
(1,999)	1:A:37:ILE:H	1:A:37:ILE:HG21	3	0.17
(1,999)	1:A:37:ILE:H	1:A:37:ILE:HG22	3	0.17
(1,999)	1:A:37:ILE:H	1:A:37:ILE:HG23	3	0.17
(1,999)	1:A:37:ILE:H	1:A:37:ILE:HG21	6	0.17
(1,999)	1:A:37:ILE:H	1:A:37:ILE:HG22	6	0.17
(1,999)	1:A:37:ILE:H	1:A:37:ILE:HG23	6	0.17
(1,444)	1:A:98:ASP:HA	1:A:99:LEU:HB3	1	0.17
(1,444)	1:A:98:ASP:HA	1:A:99:LEU:HB3	2	0.17
(1,444)	1:A:98:ASP:HA	1:A:99:LEU:HB3	4	0.17
(1,444)	1:A:98:ASP:HA	1:A:99:LEU:HB3	5	0.17
(1,444)	1:A:98:ASP:HA	1:A:99:LEU:HB3	8	0.17
(1,444)	1:A:98:ASP:HA	1:A:99:LEU:HB3	11	0.17
(1,444)	1:A:98:ASP:HA	1:A:99:LEU:HB3	12	0.17
(1,444)	1:A:98:ASP:HA	1:A:99:LEU:HB3	13	0.17
(1,444)	1:A:98:ASP:HA	1:A:99:LEU:HB3	14	0.17
(1,444)	1:A:98:ASP:HA	1:A:99:LEU:HB3	17	0.17
(1,1183)	1:A:76:SER:H	1:A:77:ALA:H	1	0.17
(1,1183)	1:A:76:SER:H	1:A:77:ALA:H	2	0.17
(1,1183)	1:A:76:SER:H	1:A:77:ALA:H	3	0.17
(1,1183)	1:A:76:SER:H	1:A:77:ALA:H	4	0.17
(1,1183)	1:A:76:SER:H	1:A:77:ALA:H	5	0.17
(1,1183)	1:A:76:SER:H	1:A:77:ALA:H	6	0.17
(1,1183)	1:A:76:SER:H	1:A:77:ALA:H	7	0.17
(1,1183)	1:A:76:SER:H	1:A:77:ALA:H	8	0.17
(1,1183)	1:A:76:SER:H	1:A:77:ALA:H	10	0.17
(1,1183)	1:A:76:SER:H	1:A:77:ALA:H	14	0.17
(1,1183)	1:A:76:SER:H	1:A:77:ALA:H	15	0.17
(1,1183)	1:A:76:SER:H	1:A:77:ALA:H	17	0.17
(1,1183)	1:A:76:SER:H	1:A:77:ALA:H	18	0.17

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1183)	1:A:76:SER:H	1:A:77:ALA:H	20	0.17
(1,999)	1:A:37:ILE:H	1:A:37:ILE:HG21	2	0.16
(1,999)	1:A:37:ILE:H	1:A:37:ILE:HG22	2	0.16
(1,999)	1:A:37:ILE:H	1:A:37:ILE:HG23	2	0.16
(1,999)	1:A:37:ILE:H	1:A:37:ILE:HG21	7	0.16
(1,999)	1:A:37:ILE:H	1:A:37:ILE:HG22	7	0.16
(1,999)	1:A:37:ILE:H	1:A:37:ILE:HG23	7	0.16
(1,999)	1:A:37:ILE:H	1:A:37:ILE:HG21	10	0.16
(1,999)	1:A:37:ILE:H	1:A:37:ILE:HG22	10	0.16
(1,999)	1:A:37:ILE:H	1:A:37:ILE:HG23	10	0.16
(1,999)	1:A:37:ILE:H	1:A:37:ILE:HG21	18	0.16
(1,999)	1:A:37:ILE:H	1:A:37:ILE:HG22	18	0.16
(1,999)	1:A:37:ILE:H	1:A:37:ILE:HG23	18	0.16
(1,999)	1:A:37:ILE:H	1:A:37:ILE:HG21	19	0.16
(1,999)	1:A:37:ILE:H	1:A:37:ILE:HG22	19	0.16
(1,999)	1:A:37:ILE:H	1:A:37:ILE:HG23	19	0.16
(1,444)	1:A:98:ASP:HA	1:A:99:LEU:HB3	3	0.16
(1,444)	1:A:98:ASP:HA	1:A:99:LEU:HB3	6	0.16
(1,444)	1:A:98:ASP:HA	1:A:99:LEU:HB3	7	0.16
(1,444)	1:A:98:ASP:HA	1:A:99:LEU:HB3	9	0.16
(1,444)	1:A:98:ASP:HA	1:A:99:LEU:HB3	15	0.16
(1,444)	1:A:98:ASP:HA	1:A:99:LEU:HB3	16	0.16
(1,444)	1:A:98:ASP:HA	1:A:99:LEU:HB3	18	0.16
(1,444)	1:A:98:ASP:HA	1:A:99:LEU:HB3	20	0.16
(1,1183)	1:A:76:SER:H	1:A:77:ALA:H	12	0.16
(1,1182)	1:A:76:SER:H	1:A:76:SER:HB3	12	0.16
(1,999)	1:A:37:ILE:H	1:A:37:ILE:HG21	1	0.15
(1,999)	1:A:37:ILE:H	1:A:37:ILE:HG22	1	0.15
(1,999)	1:A:37:ILE:H	1:A:37:ILE:HG23	1	0.15
(1,999)	1:A:37:ILE:H	1:A:37:ILE:HG21	4	0.15
(1,999)	1:A:37:ILE:H	1:A:37:ILE:HG22	4	0.15
(1,999)	1:A:37:ILE:H	1:A:37:ILE:HG23	4	0.15
(1,999)	1:A:37:ILE:H	1:A:37:ILE:HG21	8	0.15
(1,999)	1:A:37:ILE:H	1:A:37:ILE:HG22	8	0.15
(1,999)	1:A:37:ILE:H	1:A:37:ILE:HG23	8	0.15
(1,999)	1:A:37:ILE:H	1:A:37:ILE:HG21	12	0.15
(1,999)	1:A:37:ILE:H	1:A:37:ILE:HG22	12	0.15
(1,999)	1:A:37:ILE:H	1:A:37:ILE:HG23	12	0.15
(1,999)	1:A:37:ILE:H	1:A:37:ILE:HG21	13	0.15
(1,999)	1:A:37:ILE:H	1:A:37:ILE:HG22	13	0.15
(1,999)	1:A:37:ILE:H	1:A:37:ILE:HG23	13	0.15
(1,1182)	1:A:76:SER:H	1:A:76:SER:HB3	17	0.15

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,999)	1:A:37:ILE:H	1:A:37:ILE:HG21	15	0.14
(1,999)	1:A:37:ILE:H	1:A:37:ILE:HG22	15	0.14
(1,999)	1:A:37:ILE:H	1:A:37:ILE:HG23	15	0.14
(1,1185)	1:A:77:ALA:H	1:A:76:SER:HB3	9	0.14
(1,1185)	1:A:77:ALA:H	1:A:76:SER:HB3	18	0.14
(1,1182)	1:A:76:SER:H	1:A:76:SER:HB3	15	0.14
(1,1182)	1:A:76:SER:H	1:A:76:SER:HB3	18	0.14
(1,1182)	1:A:76:SER:H	1:A:76:SER:HB3	19	0.14
(1,551)	1:A:27:PRO:HA	1:A:27:PRO:HG2	2	0.13
(1,551)	1:A:27:PRO:HA	1:A:27:PRO:HG2	4	0.13
(1,551)	1:A:27:PRO:HA	1:A:27:PRO:HG2	5	0.13
(1,551)	1:A:27:PRO:HA	1:A:27:PRO:HG2	6	0.13
(1,551)	1:A:27:PRO:HA	1:A:27:PRO:HG2	7	0.13
(1,551)	1:A:27:PRO:HA	1:A:27:PRO:HG2	9	0.13
(1,551)	1:A:27:PRO:HA	1:A:27:PRO:HG2	10	0.13
(1,551)	1:A:27:PRO:HA	1:A:27:PRO:HG2	11	0.13
(1,551)	1:A:27:PRO:HA	1:A:27:PRO:HG2	13	0.13
(1,551)	1:A:27:PRO:HA	1:A:27:PRO:HG2	14	0.13
(1,551)	1:A:27:PRO:HA	1:A:27:PRO:HG2	16	0.13
(1,551)	1:A:27:PRO:HA	1:A:27:PRO:HG2	17	0.13
(1,551)	1:A:27:PRO:HA	1:A:27:PRO:HG2	19	0.13
(1,551)	1:A:27:PRO:HA	1:A:27:PRO:HG2	20	0.13
(1,1185)	1:A:77:ALA:H	1:A:76:SER:HB3	11	0.13
(1,1185)	1:A:77:ALA:H	1:A:76:SER:HB3	12	0.13
(1,1185)	1:A:77:ALA:H	1:A:76:SER:HB3	15	0.13
(1,1185)	1:A:77:ALA:H	1:A:76:SER:HB3	17	0.13
(1,1185)	1:A:77:ALA:H	1:A:76:SER:HB3	19	0.13
(1,1182)	1:A:76:SER:H	1:A:76:SER:HB3	9	0.13
(1,1182)	1:A:76:SER:H	1:A:76:SER:HB3	11	0.13
(1,999)	1:A:37:ILE:H	1:A:37:ILE:HG21	20	0.12
(1,999)	1:A:37:ILE:H	1:A:37:ILE:HG22	20	0.12
(1,999)	1:A:37:ILE:H	1:A:37:ILE:HG23	20	0.12
(1,551)	1:A:27:PRO:HA	1:A:27:PRO:HG2	1	0.12
(1,551)	1:A:27:PRO:HA	1:A:27:PRO:HG2	3	0.12
(1,551)	1:A:27:PRO:HA	1:A:27:PRO:HG2	8	0.12
(1,551)	1:A:27:PRO:HA	1:A:27:PRO:HG2	12	0.12
(1,551)	1:A:27:PRO:HA	1:A:27:PRO:HG2	15	0.12
(1,551)	1:A:27:PRO:HA	1:A:27:PRO:HG2	18	0.12

10 Dihedral-angle violation analysis (i)

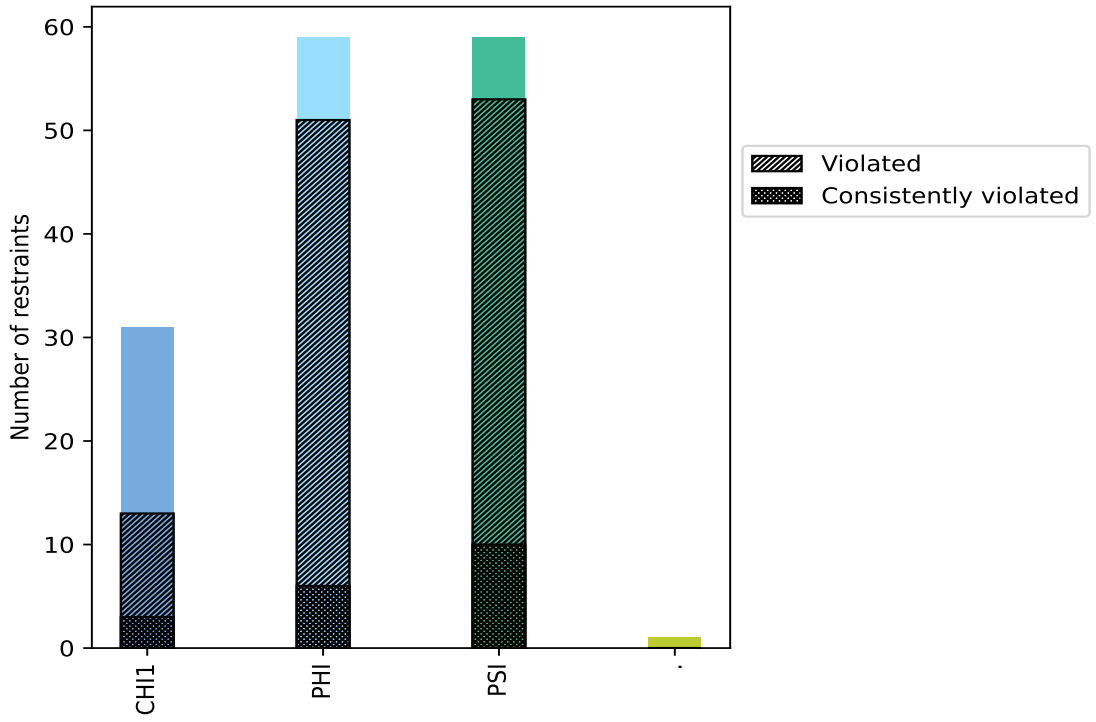
10.1 Summary of dihedral-angle violations (i)

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

Angle type	Count	%[1]	Violated[3]			Consistently Violated[4]		
			Count	%[2]	%[1]	Count	%[2]	%[1]
CHI1	31	20.7	13	41.9	8.7	3	9.7	2.0
PHI	59	39.3	51	86.4	34.0	6	10.2	4.0
PSI	59	39.3	53	89.8	35.3	10	16.9	6.7
.	1	0.7	0	0.0	0.0	0	0.0	0.0
Total	150	100.0	117	78.0	78.0	19	12.7	12.7

[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)



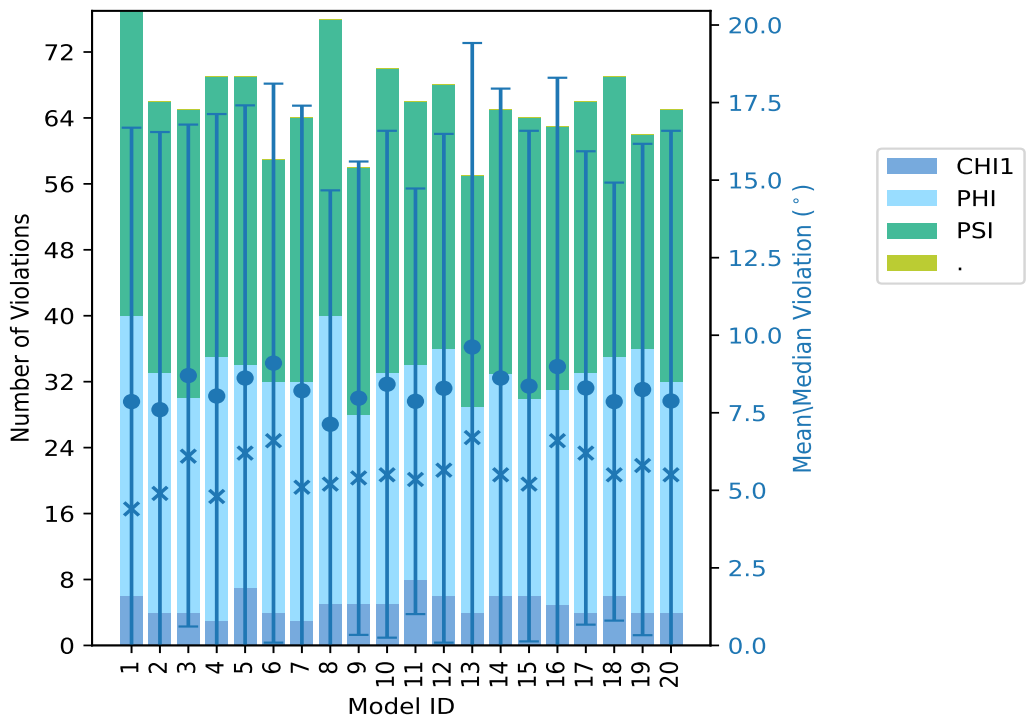
Violated and consistently violated restraints are shown using different hatch patterns in their respective categories

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 (°)
	CHI1	PHI	PSI	.	Total				
1	6	34	37	0	77	7.86	44.6	8.83	4.4
2	4	29	33	0	66	7.6	45.4	8.95	4.9
3	4	26	35	0	65	8.7	44.8	8.09	6.1
4	3	32	34	0	69	8.04	44.8	9.09	4.8
5	7	27	35	0	69	8.62	45.0	8.79	6.2
6	4	28	27	0	59	9.1	45.5	9.01	6.6
7	3	29	32	0	64	8.21	44.7	9.19	5.1
8	5	35	36	0	76	7.13	44.2	7.54	5.2
9	5	23	30	0	58	7.97	36.1	7.63	5.4
10	5	28	37	0	70	8.42	44.5	8.17	5.5
11	8	26	32	0	66	7.87	33.9	6.86	5.35
12	6	30	32	0	68	8.29	35.7	8.2	5.65
13	4	25	28	0	57	9.62	44.2	9.8	6.7
14	6	27	32	0	65	8.62	45.4	9.33	5.5
15	6	24	34	0	64	8.36	34.7	8.23	5.2
16	5	26	32	0	63	8.99	44.0	9.31	6.6
17	4	29	33	0	66	8.3	33.7	7.63	6.2
18	6	29	34	0	69	7.86	33.8	7.06	5.5
19	4	32	26	0	62	8.25	42.5	7.92	5.8
20	4	28	33	0	65	7.88	45.6	8.71	5.5

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



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

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

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

Number of violated restraints					Fraction of the ensemble	
CHI1	PHI	PSI	.	Total	Count[1]	%
3	1	1	0	5	1	5.0
1	4	2	0	7	2	10.0
1	2	1	0	4	3	15.0
2	6	4	0	12	4	20.0
1	2	3	0	6	5	25.0
1	1	5	0	7	6	30.0
0	3	2	0	5	7	35.0
0	1	0	0	1	8	40.0
0	4	2	0	6	9	45.0
0	3	2	0	5	10	50.0
0	0	0	0	0	11	55.0

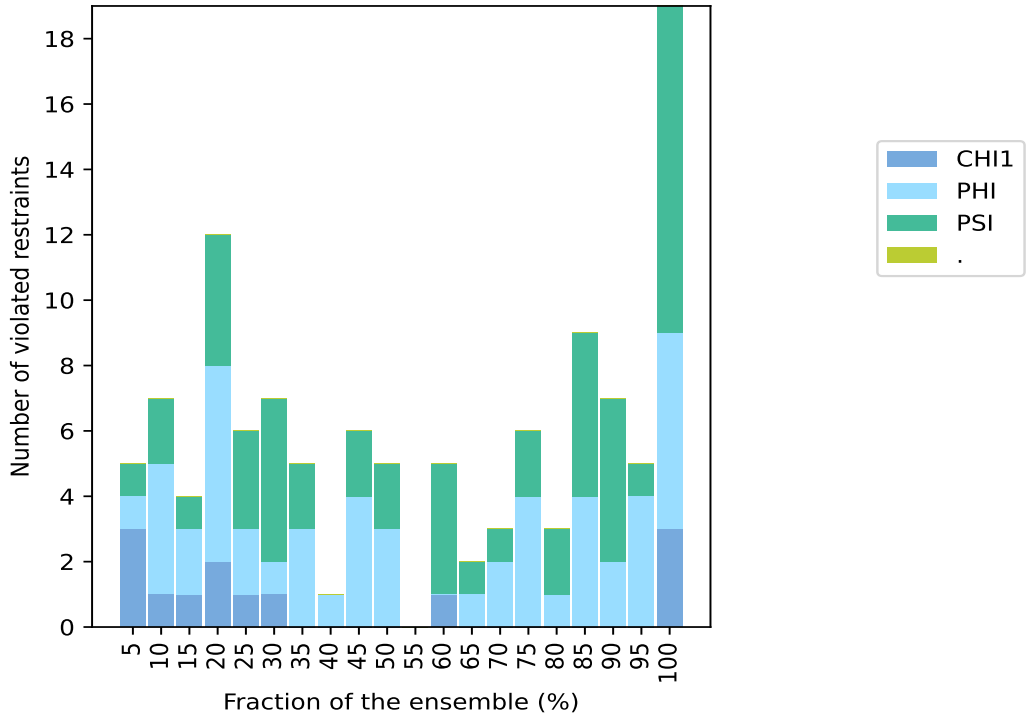
Continued on next page...

Continued from previous page...

Number of violated restraints					Fraction of the ensemble	
CHI1	PHI	PSI	.	Total	Count[1]	%
1	0	4	0	5	12	60.0
0	1	1	0	2	13	65.0
0	2	1	0	3	14	70.0
0	4	2	0	6	15	75.0
0	1	2	0	3	16	80.0
0	4	5	0	9	17	85.0
0	2	5	0	7	18	90.0
0	4	1	0	5	19	95.0
3	6	10	0	19	20	100.0

[1] Number of models with violations

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

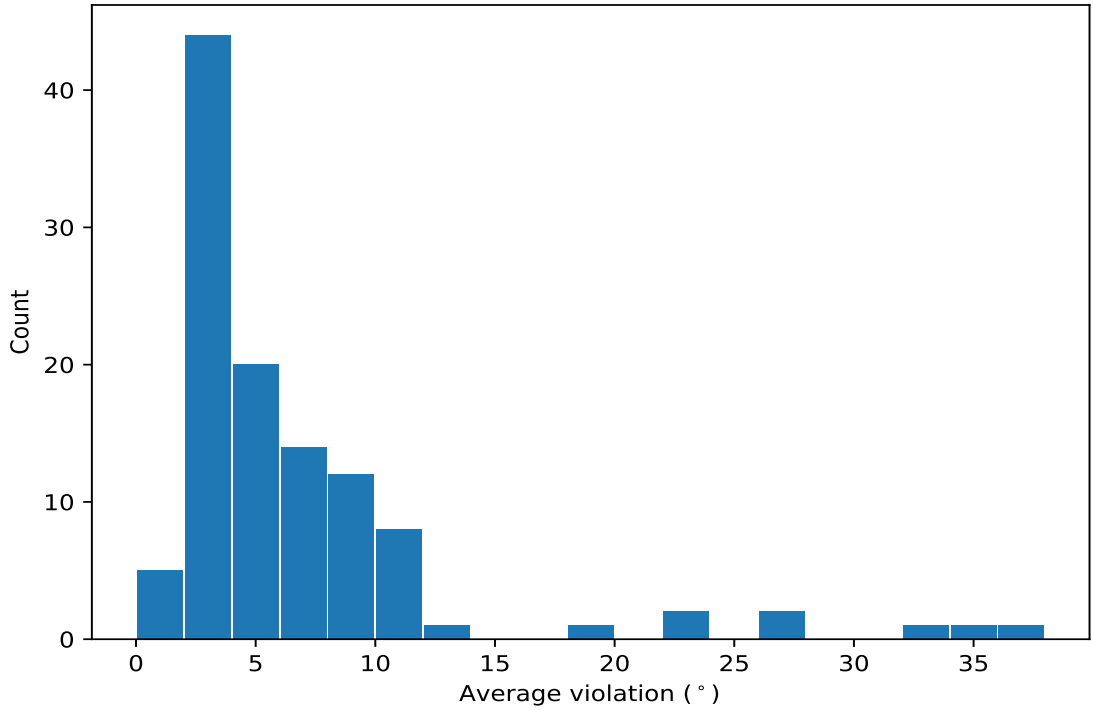


10.4 Most violated dihedral-angle restraints in the ensemble (i)

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
(1,71)	1:A:74:LYS:C	1:A:75:VAL:N	1:A:75:VAL:CA	1:A:75:VAL:C	20	37.13	5.25	37.25
(1,74)	1:A:76:SER:N	1:A:76:SER:CA	1:A:76:SER:C	1:A:77:ALA:N	20	35.51	12.72	44.35
(1,146)	1:A:18:VAL:N	1:A:18:VAL:CA	1:A:18:VAL:CB	1:A:18:VAL:CG1	20	33.24	2.76	33.75
(1,72)	1:A:75:VAL:N	1:A:75:VAL:CA	1:A:75:VAL:C	1:A:76:SER:N	20	27.91	2.57	27.5
(1,133)	1:A:13:LEU:N	1:A:13:LEU:CA	1:A:13:LEU:CB	1:A:13:LEU:CG	20	26.56	9.57	31.5
(1,102)	1:A:101:LEU:N	1:A:101:LEU:CA	1:A:101:LEU:C	1:A:102:HIS:N	20	18.29	6.04	21.2
(1,43)	1:A:47:ALA:C	1:A:48:LEU:N	1:A:48:LEU:CA	1:A:48:LEU:C	20	12.24	1.26	12.35
(1,62)	1:A:64:GLN:N	1:A:64:GLN:CA	1:A:64:GLN:C	1:A:65:ARG:N	20	11.71	4.67	12.2
(1,111)	1:A:105:LYS:C	1:A:106:LEU:N	1:A:106:LEU:CA	1:A:106:LEU:C	20	11.63	2.79	12.35
(1,22)	1:A:17:LEU:N	1:A:17:LEU:CA	1:A:17:LEU:C	1:A:18:VAL:N	20	10.34	2.14	10.65
(1,114)	1:A:107:PHE:N	1:A:107:PHE:CA	1:A:107:PHE:C	1:A:108:ARG:N	20	9.93	1.27	10.0
(1,110)	1:A:105:LYS:N	1:A:105:LYS:CA	1:A:105:LYS:C	1:A:106:LEU:N	20	9.47	1.68	9.4
(1,55)	1:A:58:SER:C	1:A:59:ALA:N	1:A:59:ALA:CA	1:A:59:ALA:C	20	8.94	3.49	8.95
(1,128)	1:A:94:GLN:N	1:A:94:GLN:CA	1:A:94:GLN:CB	1:A:94:GLN:CG	20	8.56	1.13	8.35
(1,115)	1:A:107:PHE:C	1:A:108:ARG:N	1:A:108:ARG:CA	1:A:108:ARG:C	20	8.47	3.37	8.3
(1,88)	1:A:94:GLN:N	1:A:94:GLN:CA	1:A:94:GLN:C	1:A:95:PHE:N	20	8.2	2.45	7.6
(1,36)	1:A:44:TYR:N	1:A:44:TYR:CA	1:A:44:TYR:C	1:A:45:CYS:N	20	8.03	3.0	7.45
(1,67)	1:A:66:MET:C	1:A:67:LEU:N	1:A:67:LEU:CA	1:A:67:LEU:C	20	6.37	2.04	6.6
(1,24)	1:A:18:VAL:N	1:A:18:VAL:CA	1:A:18:VAL:C	1:A:19:ASN:N	20	5.45	0.94	5.45
(1,86)	1:A:93:ALA:N	1:A:93:ALA:CA	1:A:93:ALA:C	1:A:94:GLN:N	19	8.97	3.08	9.3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Models[1]	Mean	SD[2]	Median
(1,83)	1:A:91:GLU:C	1:A:92:VAL:N	1:A:92:VAL:CA	1:A:92:VAL:C	19	7.44	3.09	7.2
(1,51)	1:A:51:LEU:C	1:A:52:ILE:N	1:A:52:ILE:CA	1:A:52:ILE:C	19	6.41	2.31	6.4
(1,63)	1:A:64:GLN:C	1:A:65:ARG:N	1:A:65:ARG:CA	1:A:65:ARG:C	19	4.26	1.28	4.3
(1,101)	1:A:100:LEU:C	1:A:101:LEU:N	1:A:101:LEU:CA	1:A:101:LEU:C	19	3.95	1.62	3.9
(1,10)	1:A:11:ARG:N	1:A:11:ARG:CA	1:A:11:ARG:C	1:A:12:GLU:N	18	11.52	2.55	12.2
(1,112)	1:A:106:LEU:N	1:A:106:LEU:CA	1:A:106:LEU:C	1:A:107:PHE:N	18	10.01	3.27	11.05
(1,60)	1:A:63:THR:N	1:A:63:THR:CA	1:A:63:THR:C	1:A:64:GLN:N	18	6.62	1.84	6.4
(1,28)	1:A:20:ILE:N	1:A:20:ILE:CA	1:A:20:ILE:C	1:A:21:THR:N	18	6.01	2.88	6.35
(1,12)	1:A:12:GLU:N	1:A:12:GLU:CA	1:A:12:GLU:C	1:A:13:LEU:N	18	4.97	2.33	4.1
(1,65)	1:A:65:ARG:C	1:A:66:MET:N	1:A:66:MET:CA	1:A:66:MET:C	18	4.67	1.41	5.0
(1,9)	1:A:10:LEU:C	1:A:11:ARG:N	1:A:11:ARG:CA	1:A:11:ARG:C	18	2.36	0.78	2.15
(1,40)	1:A:46:ALA:N	1:A:46:ALA:CA	1:A:46:ALA:C	1:A:47:ALA:N	17	6.45	3.76	5.6
(1,38)	1:A:45:CYS:N	1:A:45:CYS:CA	1:A:45:CYS:C	1:A:46:ALA:N	17	5.79	2.59	6.1
(1,29)	1:A:20:ILE:C	1:A:21:THR:N	1:A:21:THR:CA	1:A:21:THR:C	17	5.71	2.97	5.0
(1,16)	1:A:14:ILE:N	1:A:14:ILE:CA	1:A:14:ILE:C	1:A:15:GLU:N	17	4.95	2.45	4.8
(1,25)	1:A:18:VAL:C	1:A:19:ASN:N	1:A:19:ASN:CA	1:A:19:ASN:C	17	4.58	1.6	4.4
(1,47)	1:A:49:GLU:C	1:A:50:SER:N	1:A:50:SER:CA	1:A:50:SER:C	17	3.97	1.49	4.0
(1,66)	1:A:66:MET:N	1:A:66:MET:CA	1:A:66:MET:C	1:A:67:LEU:N	17	3.77	1.88	3.2
(1,99)	1:A:99:LEU:C	1:A:100:LEU:N	1:A:100:LEU:CA	1:A:100:LEU:C	17	3.44	1.52	3.1
(1,26)	1:A:19:ASN:N	1:A:19:ASN:CA	1:A:19:ASN:C	1:A:20:ILE:N	17	2.66	1.46	2.3
(1,90)	1:A:95:PHE:N	1:A:95:PHE:CA	1:A:95:PHE:C	1:A:96:VAL:N	16	7.18	3.84	7.35
(1,53)	1:A:53:ASN:C	1:A:54:VAL:N	1:A:54:VAL:CA	1:A:54:VAL:C	16	6.21	2.33	6.5
(1,6)	1:A:9:ALA:N	1:A:9:ALA:CA	1:A:9:ALA:C	1:A:10:LEU:N	16	3.79	1.75	3.3
(1,33)	1:A:42:GLY:C	1:A:43:MET:N	1:A:43:MET:CA	1:A:43:MET:C	15	10.41	7.23	9.0
(1,75)	1:A:87:ASP:C	1:A:88:THR:N	1:A:88:THR:CA	1:A:88:THR:C	15	9.54	6.4	9.4
(1,117)	1:A:108:ARG:C	1:A:109:GLU:N	1:A:109:GLU:CA	1:A:109:GLU:C	15	7.33	2.98	6.5
(1,4)	1:A:8:THR:N	1:A:8:THR:CA	1:A:8:THR:C	1:A:9:ALA:N	15	3.67	1.63	3.7
(1,37)	1:A:44:TYR:C	1:A:45:CYS:N	1:A:45:CYS:CA	1:A:45:CYS:C	15	3.67	1.34	3.7
(1,42)	1:A:47:ALA:N	1:A:47:ALA:CA	1:A:47:ALA:C	1:A:48:LEU:N	15	3.0	1.54	2.7
(1,105)	1:A:102:HIS:C	1:A:103:LEU:N	1:A:103:LEU:CA	1:A:103:LEU:C	14	5.68	3.91	4.1
(1,56)	1:A:59:ALA:N	1:A:59:ALA:CA	1:A:59:ALA:C	1:A:60:ILE:N	14	3.71	1.9	4.25
(1,57)	1:A:61:GLU:C	1:A:62:LYS:N	1:A:62:LYS:CA	1:A:62:LYS:C	14	2.27	0.88	2.2
(1,118)	1:A:109:GLU:N	1:A:109:GLU:CA	1:A:109:GLU:C	1:A:110:GLY:N	13	4.98	1.45	5.0
(1,13)	1:A:12:GLU:C	1:A:13:LEU:N	1:A:13:LEU:CA	1:A:13:LEU:C	13	3.26	1.43	3.0
(1,32)	1:A:34:VAL:N	1:A:34:VAL:CA	1:A:34:VAL:C	1:A:35:TRP:N	12	7.32	4.96	6.75
(1,119)	1:A:12:GLU:N	1:A:12:GLU:CA	1:A:12:GLU:CB	1:A:12:GLU:CG	12	4.87	2.6	4.3
(1,14)	1:A:13:LEU:N	1:A:13:LEU:CA	1:A:13:LEU:C	1:A:14:ILE:N	12	3.16	1.39	3.25
(1,106)	1:A:103:LEU:N	1:A:103:LEU:CA	1:A:103:LEU:C	1:A:104:LYS:N	12	2.81	0.96	2.55
(1,116)	1:A:108:ARG:N	1:A:108:ARG:CA	1:A:108:ARG:C	1:A:109:GLU:N	12	2.32	0.91	1.9
(1,80)	1:A:90:ILE:N	1:A:90:ILE:CA	1:A:90:ILE:C	1:A:91:GLU:N	10	9.2	6.58	8.0
(1,64)	1:A:65:ARG:N	1:A:65:ARG:CA	1:A:65:ARG:C	1:A:66:MET:N	10	3.91	0.97	4.4
(1,7)	1:A:9:ALA:C	1:A:10:LEU:N	1:A:10:LEU:CA	1:A:10:LEU:C	10	3.81	1.14	4.0
(1,93)	1:A:96:VAL:C	1:A:97:LYS:N	1:A:97:LYS:CA	1:A:97:LYS:C	10	3.13	1.03	3.5
(1,69)	1:A:67:LEU:C	1:A:68:SER:N	1:A:68:SER:CA	1:A:68:SER:C	10	2.41	1.36	2.05
(1,97)	1:A:98:ASP:C	1:A:99:LEU:N	1:A:99:LEU:CA	1:A:99:LEU:C	9	8.03	4.59	6.0
(1,81)	1:A:90:ILE:C	1:A:91:GLU:N	1:A:91:GLU:CA	1:A:91:GLU:C	9	8.01	3.12	7.2
(1,49)	1:A:50:SER:C	1:A:51:LEU:N	1:A:51:LEU:CA	1:A:51:LEU:C	9	3.59	1.54	3.5
(1,8)	1:A:10:LEU:N	1:A:10:LEU:CA	1:A:10:LEU:C	1:A:11:ARG:N	9	3.08	1.4	2.6
(1,79)	1:A:89:LYS:C	1:A:90:ILE:N	1:A:90:ILE:CA	1:A:90:ILE:C	9	2.49	1.25	1.7
(1,46)	1:A:49:GLU:N	1:A:49:GLU:CA	1:A:49:GLU:C	1:A:50:SER:N	9	2.09	1.11	1.7
(1,23)	1:A:17:LEU:C	1:A:18:VAL:N	1:A:18:VAL:CA	1:A:18:VAL:C	8	2.58	0.63	2.85

Continued on next page...

Continued from previous page...

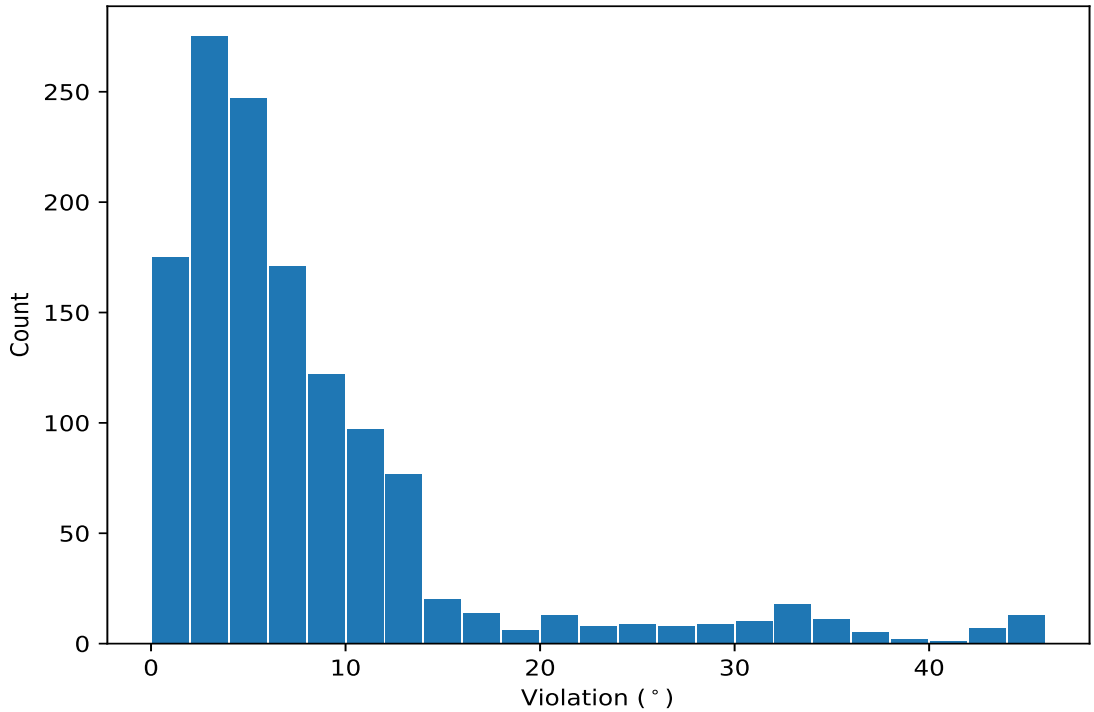
Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Models[1]	Mean	SD[2]	Median
(1,73)	1:A:75:VAL:C	1:A:76:SER:N	1:A:76:SER:CA	1:A:76:SER:C	7	23.87	2.88	23.9
(1,31)	1:A:33:MET:C	1:A:34:VAL:N	1:A:34:VAL:CA	1:A:34:VAL:C	7	4.77	3.0	3.8
(1,92)	1:A:96:VAL:N	1:A:96:VAL:CA	1:A:96:VAL:C	1:A:97:LYS:N	7	4.23	1.97	5.0
(1,50)	1:A:51:LEU:N	1:A:51:LEU:CA	1:A:51:LEU:C	1:A:52:ILE:N	7	3.14	1.49	2.4
(1,19)	1:A:15:GLU:C	1:A:16:GLU:N	1:A:16:GLU:CA	1:A:16:GLU:C	7	2.34	0.74	2.4
(1,96)	1:A:98:ASP:N	1:A:98:ASP:CA	1:A:98:ASP:C	1:A:99:LEU:N	6	6.25	2.1	6.7
(1,34)	1:A:43:MET:N	1:A:43:MET:CA	1:A:43:MET:C	1:A:44:TYR:N	6	5.6	2.23	4.75
(1,58)	1:A:62:LYS:N	1:A:62:LYS:CA	1:A:62:LYS:C	1:A:63:THR:N	6	5.18	1.15	5.05
(1,84)	1:A:92:VAL:N	1:A:92:VAL:CA	1:A:92:VAL:C	1:A:93:ALA:N	6	4.33	2.47	3.5
(1,5)	1:A:8:THR:C	1:A:9:ALA:N	1:A:9:ALA:CA	1:A:9:ALA:C	6	3.85	2.28	3.1
(1,142)	1:A:99:LEU:N	1:A:99:LEU:CA	1:A:99:LEU:CB	1:A:99:LEU:CG	6	2.9	1.15	2.8
(1,54)	1:A:54:VAL:N	1:A:54:VAL:CA	1:A:54:VAL:C	1:A:55:SER:N	6	2.5	0.83	2.3
(1,137)	1:A:35:TRP:N	1:A:35:TRP:CA	1:A:35:TRP:CB	1:A:35:TRP:CG	5	11.48	5.2	9.9
(1,104)	1:A:102:HIS:N	1:A:102:HIS:CA	1:A:102:HIS:C	1:A:103:LEU:N	5	11.18	4.05	11.2
(1,78)	1:A:89:LYS:N	1:A:89:LYS:CA	1:A:89:LYS:C	1:A:90:ILE:N	5	4.26	2.53	3.4
(1,20)	1:A:16:GLU:N	1:A:16:GLU:CA	1:A:16:GLU:C	1:A:17:LEU:N	5	2.9	1.4	2.3
(1,1)	1:A:6:PRO:C	1:A:7:SER:N	1:A:7:SER:CA	1:A:7:SER:C	5	2.06	1.43	1.4
(1,17)	1:A:14:ILE:C	1:A:15:GLU:N	1:A:15:GLU:CA	1:A:15:GLU:C	5	1.8	0.89	1.3
(1,135)	1:A:23:ASN:N	1:A:23:ASN:CA	1:A:23:ASN:CB	1:A:23:ASN:CG	4	6.17	0.95	5.75
(1,77)	1:A:88:THR:C	1:A:89:LYS:N	1:A:89:LYS:CA	1:A:89:LYS:C	4	5.03	1.68	5.2
(1,136)	1:A:24:GLN:N	1:A:24:GLN:CA	1:A:24:GLN:CB	1:A:24:GLN:CG	4	3.4	2.02	2.85
(1,35)	1:A:43:MET:C	1:A:44:TYR:N	1:A:44:TYR:CA	1:A:44:TYR:C	4	3.2	1.59	2.9
(1,98)	1:A:99:LEU:N	1:A:99:LEU:CA	1:A:99:LEU:C	1:A:100:LEU:N	4	3.08	1.59	2.9
(1,109)	1:A:104:LYS:C	1:A:105:LYS:N	1:A:105:LYS:CA	1:A:105:LYS:C	4	2.95	0.98	3.3
(1,108)	1:A:104:LYS:N	1:A:104:LYS:CA	1:A:104:LYS:C	1:A:105:LYS:N	4	2.88	1.39	2.8
(1,18)	1:A:15:GLU:N	1:A:15:GLU:CA	1:A:15:GLU:C	1:A:16:GLU:N	4	2.68	0.7	2.6
(1,15)	1:A:13:LEU:C	1:A:14:ILE:N	1:A:14:ILE:CA	1:A:14:ILE:C	4	2.5	1.41	2.25
(1,94)	1:A:97:LYS:N	1:A:97:LYS:CA	1:A:97:LYS:C	1:A:98:ASP:N	4	2.42	1.12	2.25
(1,91)	1:A:95:PHE:C	1:A:96:VAL:N	1:A:96:VAL:CA	1:A:96:VAL:C	4	2.32	1.0	2.05
(1,87)	1:A:93:ALA:C	1:A:94:GLN:N	1:A:94:GLN:CA	1:A:94:GLN:C	4	1.52	0.15	1.55
(1,145)	1:A:111:ARG:N	1:A:111:ARG:CA	1:A:111:ARG:CB	1:A:111:ARG:CG	3	23.2	11.15	26.8
(1,76)	1:A:88:THR:N	1:A:88:THR:CA	1:A:88:THR:C	1:A:89:LYS:N	3	6.97	2.93	7.9
(1,3)	1:A:7:SER:C	1:A:8:THR:N	1:A:8:THR:CA	1:A:8:THR:C	3	2.57	1.21	2.2
(1,61)	1:A:63:THR:C	1:A:64:GLN:N	1:A:64:GLN:CA	1:A:64:GLN:C	3	2.2	0.79	1.8
(1,100)	1:A:100:LEU:N	1:A:100:LEU:CA	1:A:100:LEU:C	1:A:101:LEU:N	2	7.05	2.95	7.05
(1,103)	1:A:101:LEU:C	1:A:102:HIS:N	1:A:102:HIS:CA	1:A:102:HIS:C	2	5.25	3.25	5.25
(1,124)	1:A:64:GLN:N	1:A:64:GLN:CA	1:A:64:GLN:CB	1:A:64:GLN:CG	2	4.85	1.95	4.85
(1,2)	1:A:7:SER:N	1:A:7:SER:CA	1:A:7:SER:C	1:A:8:THR:N	2	3.05	0.25	3.05
(1,113)	1:A:106:LEU:C	1:A:107:PHE:N	1:A:107:PHE:CA	1:A:107:PHE:C	2	1.7	0.2	1.7
(1,95)	1:A:97:LYS:C	1:A:98:ASP:N	1:A:98:ASP:CA	1:A:98:ASP:C	2	1.5	0.3	1.5
(1,89)	1:A:94:GLN:C	1:A:95:PHE:N	1:A:95:PHE:CA	1:A:95:PHE:C	2	1.25	0.05	1.25

[1] Number of violated models, [2]Standard 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 (°)
(1,74)	1:A:76:SER:N	1:A:76:SER:CA	1:A:76:SER:C	1:A:77:ALA:N	20	45.6
(1,74)	1:A:76:SER:N	1:A:76:SER:CA	1:A:76:SER:C	1:A:77:ALA:N	6	45.5
(1,74)	1:A:76:SER:N	1:A:76:SER:CA	1:A:76:SER:C	1:A:77:ALA:N	2	45.4
(1,74)	1:A:76:SER:N	1:A:76:SER:CA	1:A:76:SER:C	1:A:77:ALA:N	14	45.4
(1,74)	1:A:76:SER:N	1:A:76:SER:CA	1:A:76:SER:C	1:A:77:ALA:N	5	45.0
(1,74)	1:A:76:SER:N	1:A:76:SER:CA	1:A:76:SER:C	1:A:77:ALA:N	3	44.8
(1,74)	1:A:76:SER:N	1:A:76:SER:CA	1:A:76:SER:C	1:A:77:ALA:N	4	44.8
(1,74)	1:A:76:SER:N	1:A:76:SER:CA	1:A:76:SER:C	1:A:77:ALA:N	7	44.7
(1,74)	1:A:76:SER:N	1:A:76:SER:CA	1:A:76:SER:C	1:A:77:ALA:N	1	44.6
(1,74)	1:A:76:SER:N	1:A:76:SER:CA	1:A:76:SER:C	1:A:77:ALA:N	10	44.5
(1,74)	1:A:76:SER:N	1:A:76:SER:CA	1:A:76:SER:C	1:A:77:ALA:N	8	44.2
(1,74)	1:A:76:SER:N	1:A:76:SER:CA	1:A:76:SER:C	1:A:77:ALA:N	13	44.2
(1,74)	1:A:76:SER:N	1:A:76:SER:CA	1:A:76:SER:C	1:A:77:ALA:N	16	44.0
(1,71)	1:A:74:LYS:C	1:A:75:VAL:N	1:A:75:VAL:CA	1:A:75:VAL:C	7	43.7

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,71)	1:A:74:LYS:C	1:A:75:VAL:N	1:A:75:VAL:CA	1:A:75:VAL:C	4	43.4
(1,71)	1:A:74:LYS:C	1:A:75:VAL:N	1:A:75:VAL:CA	1:A:75:VAL:C	6	43.0
(1,71)	1:A:74:LYS:C	1:A:75:VAL:N	1:A:75:VAL:CA	1:A:75:VAL:C	14	43.0
(1,71)	1:A:74:LYS:C	1:A:75:VAL:N	1:A:75:VAL:CA	1:A:75:VAL:C	2	42.5
(1,71)	1:A:74:LYS:C	1:A:75:VAL:N	1:A:75:VAL:CA	1:A:75:VAL:C	19	42.5
(1,71)	1:A:74:LYS:C	1:A:75:VAL:N	1:A:75:VAL:CA	1:A:75:VAL:C	20	42.1
(1,71)	1:A:74:LYS:C	1:A:75:VAL:N	1:A:75:VAL:CA	1:A:75:VAL:C	16	41.4
(1,71)	1:A:74:LYS:C	1:A:75:VAL:N	1:A:75:VAL:CA	1:A:75:VAL:C	5	39.7
(1,71)	1:A:74:LYS:C	1:A:75:VAL:N	1:A:75:VAL:CA	1:A:75:VAL:C	13	38.4
(1,146)	1:A:18:VAL:N	1:A:18:VAL:CA	1:A:18:VAL:CB	1:A:18:VAL:CG1	19	37.2
(1,133)	1:A:13:LEU:N	1:A:13:LEU:CA	1:A:13:LEU:CB	1:A:13:LEU:CG	14	37.2
(1,133)	1:A:13:LEU:N	1:A:13:LEU:CA	1:A:13:LEU:CB	1:A:13:LEU:CG	1	37.0
(1,133)	1:A:13:LEU:N	1:A:13:LEU:CA	1:A:13:LEU:CB	1:A:13:LEU:CG	13	36.7
(1,71)	1:A:74:LYS:C	1:A:75:VAL:N	1:A:75:VAL:CA	1:A:75:VAL:C	9	36.1
(1,146)	1:A:18:VAL:N	1:A:18:VAL:CA	1:A:18:VAL:CB	1:A:18:VAL:CG1	5	35.8
(1,146)	1:A:18:VAL:N	1:A:18:VAL:CA	1:A:18:VAL:CB	1:A:18:VAL:CG1	12	35.7
(1,146)	1:A:18:VAL:N	1:A:18:VAL:CA	1:A:18:VAL:CB	1:A:18:VAL:CG1	8	35.4
(1,133)	1:A:13:LEU:N	1:A:13:LEU:CA	1:A:13:LEU:CB	1:A:13:LEU:CG	16	35.1
(1,146)	1:A:18:VAL:N	1:A:18:VAL:CA	1:A:18:VAL:CB	1:A:18:VAL:CG1	1	35.0
(1,146)	1:A:18:VAL:N	1:A:18:VAL:CA	1:A:18:VAL:CB	1:A:18:VAL:CG1	16	34.9
(1,145)	1:A:111:ARG:N	1:A:111:ARG:CA	1:A:111:ARG:CB	1:A:111:ARG:CG	15	34.7
(1,146)	1:A:18:VAL:N	1:A:18:VAL:CA	1:A:18:VAL:CB	1:A:18:VAL:CG1	4	34.6
(1,146)	1:A:18:VAL:N	1:A:18:VAL:CA	1:A:18:VAL:CB	1:A:18:VAL:CG1	2	34.5
(1,133)	1:A:13:LEU:N	1:A:13:LEU:CA	1:A:13:LEU:CB	1:A:13:LEU:CG	12	34.3
(1,133)	1:A:13:LEU:N	1:A:13:LEU:CA	1:A:13:LEU:CB	1:A:13:LEU:CG	7	34.2
(1,71)	1:A:74:LYS:C	1:A:75:VAL:N	1:A:75:VAL:CA	1:A:75:VAL:C	11	33.9
(1,146)	1:A:18:VAL:N	1:A:18:VAL:CA	1:A:18:VAL:CB	1:A:18:VAL:CG1	9	33.9
(1,146)	1:A:18:VAL:N	1:A:18:VAL:CA	1:A:18:VAL:CB	1:A:18:VAL:CG1	18	33.8
(1,72)	1:A:75:VAL:N	1:A:75:VAL:CA	1:A:75:VAL:C	1:A:76:SER:N	12	33.7
(1,146)	1:A:18:VAL:N	1:A:18:VAL:CA	1:A:18:VAL:CB	1:A:18:VAL:CG1	7	33.7
(1,146)	1:A:18:VAL:N	1:A:18:VAL:CA	1:A:18:VAL:CB	1:A:18:VAL:CG1	17	33.7
(1,71)	1:A:74:LYS:C	1:A:75:VAL:N	1:A:75:VAL:CA	1:A:75:VAL:C	1	33.5
(1,146)	1:A:18:VAL:N	1:A:18:VAL:CA	1:A:18:VAL:CB	1:A:18:VAL:CG1	13	33.5
(1,71)	1:A:74:LYS:C	1:A:75:VAL:N	1:A:75:VAL:CA	1:A:75:VAL:C	3	33.4
(1,146)	1:A:18:VAL:N	1:A:18:VAL:CA	1:A:18:VAL:CB	1:A:18:VAL:CG1	20	33.4
(1,146)	1:A:18:VAL:N	1:A:18:VAL:CA	1:A:18:VAL:CB	1:A:18:VAL:CG1	14	33.2
(1,146)	1:A:18:VAL:N	1:A:18:VAL:CA	1:A:18:VAL:CB	1:A:18:VAL:CG1	3	33.0
(1,71)	1:A:74:LYS:C	1:A:75:VAL:N	1:A:75:VAL:CA	1:A:75:VAL:C	18	32.8
(1,71)	1:A:74:LYS:C	1:A:75:VAL:N	1:A:75:VAL:CA	1:A:75:VAL:C	10	32.4
(1,71)	1:A:74:LYS:C	1:A:75:VAL:N	1:A:75:VAL:CA	1:A:75:VAL:C	15	32.3
(1,133)	1:A:13:LEU:N	1:A:13:LEU:CA	1:A:13:LEU:CB	1:A:13:LEU:CG	6	32.3
(1,133)	1:A:13:LEU:N	1:A:13:LEU:CA	1:A:13:LEU:CB	1:A:13:LEU:CG	4	32.0
(1,133)	1:A:13:LEU:N	1:A:13:LEU:CA	1:A:13:LEU:CB	1:A:13:LEU:CG	15	32.0
(1,71)	1:A:74:LYS:C	1:A:75:VAL:N	1:A:75:VAL:CA	1:A:75:VAL:C	8	31.9
(1,72)	1:A:75:VAL:N	1:A:75:VAL:CA	1:A:75:VAL:C	1:A:76:SER:N	17	31.5
(1,133)	1:A:13:LEU:N	1:A:13:LEU:CA	1:A:13:LEU:CB	1:A:13:LEU:CG	5	31.5
(1,133)	1:A:13:LEU:N	1:A:13:LEU:CA	1:A:13:LEU:CB	1:A:13:LEU:CG	17	31.5
(1,133)	1:A:13:LEU:N	1:A:13:LEU:CA	1:A:13:LEU:CB	1:A:13:LEU:CG	10	31.3
(1,72)	1:A:75:VAL:N	1:A:75:VAL:CA	1:A:75:VAL:C	1:A:76:SER:N	8	31.0
(1,72)	1:A:75:VAL:N	1:A:75:VAL:CA	1:A:75:VAL:C	1:A:76:SER:N	3	30.3
(1,72)	1:A:75:VAL:N	1:A:75:VAL:CA	1:A:75:VAL:C	1:A:76:SER:N	10	30.3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,146)	1:A:18:VAL:N	1:A:18:VAL:CA	1:A:18:VAL:CB	1:A:18:VAL:CG1	6	30.2
(1,146)	1:A:18:VAL:N	1:A:18:VAL:CA	1:A:18:VAL:CB	1:A:18:VAL:CG1	11	30.0
(1,72)	1:A:75:VAL:N	1:A:75:VAL:CA	1:A:75:VAL:C	1:A:76:SER:N	1	29.9
(1,71)	1:A:74:LYS:C	1:A:75:VAL:N	1:A:75:VAL:CA	1:A:75:VAL:C	17	29.9
(1,72)	1:A:75:VAL:N	1:A:75:VAL:CA	1:A:75:VAL:C	1:A:76:SER:N	15	29.8
(1,72)	1:A:75:VAL:N	1:A:75:VAL:CA	1:A:75:VAL:C	1:A:76:SER:N	18	29.1
(1,133)	1:A:13:LEU:N	1:A:13:LEU:CA	1:A:13:LEU:CB	1:A:13:LEU:CG	2	29.0
(1,33)	1:A:42:GLY:C	1:A:43:MET:N	1:A:43:MET:CA	1:A:43:MET:C	13	28.4
(1,73)	1:A:75:VAL:C	1:A:76:SER:N	1:A:76:SER:CA	1:A:76:SER:C	12	28.3
(1,72)	1:A:75:VAL:N	1:A:75:VAL:CA	1:A:75:VAL:C	1:A:76:SER:N	13	28.1
(1,72)	1:A:75:VAL:N	1:A:75:VAL:CA	1:A:75:VAL:C	1:A:76:SER:N	11	28.0
(1,146)	1:A:18:VAL:N	1:A:18:VAL:CA	1:A:18:VAL:CB	1:A:18:VAL:CG1	15	27.4
(1,72)	1:A:75:VAL:N	1:A:75:VAL:CA	1:A:75:VAL:C	1:A:76:SER:N	5	27.0
(1,72)	1:A:75:VAL:N	1:A:75:VAL:CA	1:A:75:VAL:C	1:A:76:SER:N	9	26.8
(1,145)	1:A:111:ARG:N	1:A:111:ARG:CA	1:A:111:ARG:CB	1:A:111:ARG:CG	1	26.8
(1,75)	1:A:87:ASP:C	1:A:88:THR:N	1:A:88:THR:CA	1:A:88:THR:C	12	26.7
(1,73)	1:A:75:VAL:C	1:A:76:SER:N	1:A:76:SER:CA	1:A:76:SER:C	17	26.7
(1,71)	1:A:74:LYS:C	1:A:75:VAL:N	1:A:75:VAL:CA	1:A:75:VAL:C	12	26.7
(1,72)	1:A:75:VAL:N	1:A:75:VAL:CA	1:A:75:VAL:C	1:A:76:SER:N	16	26.1
(1,146)	1:A:18:VAL:N	1:A:18:VAL:CA	1:A:18:VAL:CB	1:A:18:VAL:CG1	10	25.8
(1,72)	1:A:75:VAL:N	1:A:75:VAL:CA	1:A:75:VAL:C	1:A:76:SER:N	7	25.6
(1,72)	1:A:75:VAL:N	1:A:75:VAL:CA	1:A:75:VAL:C	1:A:76:SER:N	20	25.5
(1,72)	1:A:75:VAL:N	1:A:75:VAL:CA	1:A:75:VAL:C	1:A:76:SER:N	4	25.3
(1,72)	1:A:75:VAL:N	1:A:75:VAL:CA	1:A:75:VAL:C	1:A:76:SER:N	6	25.2
(1,72)	1:A:75:VAL:N	1:A:75:VAL:CA	1:A:75:VAL:C	1:A:76:SER:N	14	25.1
(1,72)	1:A:75:VAL:N	1:A:75:VAL:CA	1:A:75:VAL:C	1:A:76:SER:N	19	25.0
(1,72)	1:A:75:VAL:N	1:A:75:VAL:CA	1:A:75:VAL:C	1:A:76:SER:N	2	24.9
(1,73)	1:A:75:VAL:C	1:A:76:SER:N	1:A:76:SER:CA	1:A:76:SER:C	15	24.6
(1,73)	1:A:75:VAL:C	1:A:76:SER:N	1:A:76:SER:CA	1:A:76:SER:C	19	23.9
(1,102)	1:A:101:LEU:N	1:A:101:LEU:CA	1:A:101:LEU:C	1:A:102:HIS:N	11	23.6
(1,33)	1:A:42:GLY:C	1:A:43:MET:N	1:A:43:MET:CA	1:A:43:MET:C	10	23.5
(1,102)	1:A:101:LEU:N	1:A:101:LEU:CA	1:A:101:LEU:C	1:A:102:HIS:N	1	23.3
(1,102)	1:A:101:LEU:N	1:A:101:LEU:CA	1:A:101:LEU:C	1:A:102:HIS:N	16	23.3
(1,102)	1:A:101:LEU:N	1:A:101:LEU:CA	1:A:101:LEU:C	1:A:102:HIS:N	20	23.3
(1,102)	1:A:101:LEU:N	1:A:101:LEU:CA	1:A:101:LEU:C	1:A:102:HIS:N	4	23.0
(1,73)	1:A:75:VAL:C	1:A:76:SER:N	1:A:76:SER:CA	1:A:76:SER:C	18	22.8
(1,73)	1:A:75:VAL:C	1:A:76:SER:N	1:A:76:SER:CA	1:A:76:SER:C	11	21.9
(1,102)	1:A:101:LEU:N	1:A:101:LEU:CA	1:A:101:LEU:C	1:A:102:HIS:N	17	21.9
(1,102)	1:A:101:LEU:N	1:A:101:LEU:CA	1:A:101:LEU:C	1:A:102:HIS:N	13	21.7
(1,102)	1:A:101:LEU:N	1:A:101:LEU:CA	1:A:101:LEU:C	1:A:102:HIS:N	2	21.6
(1,102)	1:A:101:LEU:N	1:A:101:LEU:CA	1:A:101:LEU:C	1:A:102:HIS:N	14	21.3
(1,102)	1:A:101:LEU:N	1:A:101:LEU:CA	1:A:101:LEU:C	1:A:102:HIS:N	18	21.3
(1,80)	1:A:90:ILE:N	1:A:90:ILE:CA	1:A:90:ILE:C	1:A:91:GLU:N	16	21.2
(1,102)	1:A:101:LEU:N	1:A:101:LEU:CA	1:A:101:LEU:C	1:A:102:HIS:N	5	21.1
(1,102)	1:A:101:LEU:N	1:A:101:LEU:CA	1:A:101:LEU:C	1:A:102:HIS:N	9	20.9
(1,102)	1:A:101:LEU:N	1:A:101:LEU:CA	1:A:101:LEU:C	1:A:102:HIS:N	12	20.6
(1,102)	1:A:101:LEU:N	1:A:101:LEU:CA	1:A:101:LEU:C	1:A:102:HIS:N	15	20.5
(1,74)	1:A:76:SER:N	1:A:76:SER:CA	1:A:76:SER:C	1:A:77:ALA:N	9	20.0
(1,132)	1:A:10:LEU:N	1:A:10:LEU:CA	1:A:10:LEU:CB	1:A:10:LEU:CG	19	20.0
(1,137)	1:A:35:TRP:N	1:A:35:TRP:CA	1:A:35:TRP:CB	1:A:35:TRP:CG	18	19.0
(1,73)	1:A:75:VAL:C	1:A:76:SER:N	1:A:76:SER:CA	1:A:76:SER:C	9	18.9

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,80)	1:A:90:ILE:N	1:A:90:ILE:CA	1:A:90:ILE:C	1:A:91:GLU:N	9	18.8
(1,74)	1:A:76:SER:N	1:A:76:SER:CA	1:A:76:SER:C	1:A:77:ALA:N	18	18.6
(1,62)	1:A:64:GLN:N	1:A:64:GLN:CA	1:A:64:GLN:C	1:A:65:ARG:N	10	18.5
(1,74)	1:A:76:SER:N	1:A:76:SER:CA	1:A:76:SER:C	1:A:77:ALA:N	11	18.4
(1,74)	1:A:76:SER:N	1:A:76:SER:CA	1:A:76:SER:C	1:A:77:ALA:N	15	17.9
(1,74)	1:A:76:SER:N	1:A:76:SER:CA	1:A:76:SER:C	1:A:77:ALA:N	19	17.9
(1,75)	1:A:87:ASP:C	1:A:88:THR:N	1:A:88:THR:CA	1:A:88:THR:C	5	17.7
(1,74)	1:A:76:SER:N	1:A:76:SER:CA	1:A:76:SER:C	1:A:77:ALA:N	12	17.5
(1,74)	1:A:76:SER:N	1:A:76:SER:CA	1:A:76:SER:C	1:A:77:ALA:N	17	17.1
(1,104)	1:A:102:HIS:N	1:A:102:HIS:CA	1:A:102:HIS:C	1:A:103:LEU:N	12	17.1
(1,62)	1:A:64:GLN:N	1:A:64:GLN:CA	1:A:64:GLN:C	1:A:65:ARG:N	17	16.8
(1,133)	1:A:13:LEU:N	1:A:13:LEU:CA	1:A:13:LEU:CB	1:A:13:LEU:CG	9	16.8
(1,62)	1:A:64:GLN:N	1:A:64:GLN:CA	1:A:64:GLN:C	1:A:65:ARG:N	3	16.6
(1,97)	1:A:98:ASP:C	1:A:99:LEU:N	1:A:99:LEU:CA	1:A:99:LEU:C	3	16.5
(1,62)	1:A:64:GLN:N	1:A:64:GLN:CA	1:A:64:GLN:C	1:A:65:ARG:N	4	16.2
(1,62)	1:A:64:GLN:N	1:A:64:GLN:CA	1:A:64:GLN:C	1:A:65:ARG:N	6	16.2
(1,75)	1:A:87:ASP:C	1:A:88:THR:N	1:A:88:THR:CA	1:A:88:THR:C	4	16.1
(1,137)	1:A:35:TRP:N	1:A:35:TRP:CA	1:A:35:TRP:CB	1:A:35:TRP:CG	3	16.0
(1,62)	1:A:64:GLN:N	1:A:64:GLN:CA	1:A:64:GLN:C	1:A:65:ARG:N	16	15.7
(1,111)	1:A:105:LYS:C	1:A:106:LEU:N	1:A:106:LEU:CA	1:A:106:LEU:C	13	15.6
(1,55)	1:A:58:SER:C	1:A:59:ALA:N	1:A:59:ALA:CA	1:A:59:ALA:C	11	15.4
(1,33)	1:A:42:GLY:C	1:A:43:MET:N	1:A:43:MET:CA	1:A:43:MET:C	3	15.4
(1,102)	1:A:101:LEU:N	1:A:101:LEU:CA	1:A:101:LEU:C	1:A:102:HIS:N	19	15.4
(1,112)	1:A:106:LEU:N	1:A:106:LEU:CA	1:A:106:LEU:C	1:A:107:PHE:N	8	15.3
(1,97)	1:A:98:ASP:C	1:A:99:LEU:N	1:A:99:LEU:CA	1:A:99:LEU:C	7	15.1
(1,33)	1:A:42:GLY:C	1:A:43:MET:N	1:A:43:MET:CA	1:A:43:MET:C	4	15.1
(1,62)	1:A:64:GLN:N	1:A:64:GLN:CA	1:A:64:GLN:C	1:A:65:ARG:N	19	14.9
(1,133)	1:A:13:LEU:N	1:A:13:LEU:CA	1:A:13:LEU:CB	1:A:13:LEU:CG	18	14.8
(1,90)	1:A:95:PHE:N	1:A:95:PHE:CA	1:A:95:PHE:C	1:A:96:VAL:N	20	14.7
(1,133)	1:A:13:LEU:N	1:A:13:LEU:CA	1:A:13:LEU:CB	1:A:13:LEU:CG	20	14.7
(1,102)	1:A:101:LEU:N	1:A:101:LEU:CA	1:A:101:LEU:C	1:A:102:HIS:N	6	14.7
(1,55)	1:A:58:SER:C	1:A:59:ALA:N	1:A:59:ALA:CA	1:A:59:ALA:C	3	14.6
(1,40)	1:A:46:ALA:N	1:A:46:ALA:CA	1:A:46:ALA:C	1:A:47:ALA:N	19	14.5
(1,133)	1:A:13:LEU:N	1:A:13:LEU:CA	1:A:13:LEU:CB	1:A:13:LEU:CG	11	14.5
(1,43)	1:A:47:ALA:C	1:A:48:LEU:N	1:A:48:LEU:CA	1:A:48:LEU:C	16	14.4
(1,111)	1:A:105:LYS:C	1:A:106:LEU:N	1:A:106:LEU:CA	1:A:106:LEU:C	6	14.4
(1,62)	1:A:64:GLN:N	1:A:64:GLN:CA	1:A:64:GLN:C	1:A:65:ARG:N	9	14.2
(1,43)	1:A:47:ALA:C	1:A:48:LEU:N	1:A:48:LEU:CA	1:A:48:LEU:C	15	14.1
(1,10)	1:A:11:ARG:N	1:A:11:ARG:CA	1:A:11:ARG:C	1:A:12:GLU:N	3	13.9
(1,115)	1:A:107:PHE:C	1:A:108:ARG:N	1:A:108:ARG:CA	1:A:108:ARG:C	14	13.8
(1,112)	1:A:106:LEU:N	1:A:106:LEU:CA	1:A:106:LEU:C	1:A:107:PHE:N	3	13.7
(1,111)	1:A:105:LYS:C	1:A:106:LEU:N	1:A:106:LEU:CA	1:A:106:LEU:C	14	13.7
(1,43)	1:A:47:ALA:C	1:A:48:LEU:N	1:A:48:LEU:CA	1:A:48:LEU:C	17	13.6
(1,32)	1:A:34:VAL:N	1:A:34:VAL:CA	1:A:34:VAL:C	1:A:35:TRP:N	18	13.6
(1,83)	1:A:91:GLU:C	1:A:92:VAL:N	1:A:92:VAL:CA	1:A:92:VAL:C	14	13.5
(1,43)	1:A:47:ALA:C	1:A:48:LEU:N	1:A:48:LEU:CA	1:A:48:LEU:C	18	13.5
(1,36)	1:A:44:TYR:N	1:A:44:TYR:CA	1:A:44:TYR:C	1:A:45:CYS:N	14	13.5
(1,32)	1:A:34:VAL:N	1:A:34:VAL:CA	1:A:34:VAL:C	1:A:35:TRP:N	5	13.5
(1,22)	1:A:17:LEU:N	1:A:17:LEU:CA	1:A:17:LEU:C	1:A:18:VAL:N	11	13.5
(1,111)	1:A:105:LYS:C	1:A:106:LEU:N	1:A:106:LEU:CA	1:A:106:LEU:C	10	13.5
(1,111)	1:A:105:LYS:C	1:A:106:LEU:N	1:A:106:LEU:CA	1:A:106:LEU:C	15	13.5

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,105)	1:A:102:HIS:C	1:A:103:LEU:N	1:A:103:LEU:CA	1:A:103:LEU:C	12	13.5
(1,55)	1:A:58:SER:C	1:A:59:ALA:N	1:A:59:ALA:CA	1:A:59:ALA:C	13	13.4
(1,86)	1:A:93:ALA:N	1:A:93:ALA:CA	1:A:93:ALA:C	1:A:94:GLN:N	12	13.3
(1,115)	1:A:107:PHE:C	1:A:108:ARG:N	1:A:108:ARG:CA	1:A:108:ARG:C	6	13.3
(1,111)	1:A:105:LYS:C	1:A:106:LEU:N	1:A:106:LEU:CA	1:A:106:LEU:C	18	13.3
(1,10)	1:A:11:ARG:N	1:A:11:ARG:CA	1:A:11:ARG:C	1:A:12:GLU:N	17	13.3
(1,43)	1:A:47:ALA:C	1:A:48:LEU:N	1:A:48:LEU:CA	1:A:48:LEU:C	11	13.2
(1,115)	1:A:107:PHE:C	1:A:108:ARG:N	1:A:108:ARG:CA	1:A:108:ARG:C	7	13.2
(1,114)	1:A:107:PHE:N	1:A:107:PHE:CA	1:A:107:PHE:C	1:A:108:ARG:N	15	13.2
(1,112)	1:A:106:LEU:N	1:A:106:LEU:CA	1:A:106:LEU:C	1:A:107:PHE:N	19	13.2
(1,80)	1:A:90:ILE:N	1:A:90:ILE:CA	1:A:90:ILE:C	1:A:91:GLU:N	5	13.1
(1,62)	1:A:64:GLN:N	1:A:64:GLN:CA	1:A:64:GLN:C	1:A:65:ARG:N	5	13.1
(1,43)	1:A:47:ALA:C	1:A:48:LEU:N	1:A:48:LEU:CA	1:A:48:LEU:C	20	13.1
(1,111)	1:A:105:LYS:C	1:A:106:LEU:N	1:A:106:LEU:CA	1:A:106:LEU:C	17	13.1
(1,10)	1:A:11:ARG:N	1:A:11:ARG:CA	1:A:11:ARG:C	1:A:12:GLU:N	11	13.1
(1,133)	1:A:13:LEU:N	1:A:13:LEU:CA	1:A:13:LEU:CB	1:A:13:LEU:CG	19	13.0
(1,110)	1:A:105:LYS:N	1:A:105:LYS:CA	1:A:105:LYS:C	1:A:106:LEU:N	15	13.0
(1,104)	1:A:102:HIS:N	1:A:102:HIS:CA	1:A:102:HIS:C	1:A:103:LEU:N	10	13.0
(1,10)	1:A:11:ARG:N	1:A:11:ARG:CA	1:A:11:ARG:C	1:A:12:GLU:N	10	13.0
(1,88)	1:A:94:GLN:N	1:A:94:GLN:CA	1:A:94:GLN:C	1:A:95:PHE:N	15	12.9
(1,55)	1:A:58:SER:C	1:A:59:ALA:N	1:A:59:ALA:CA	1:A:59:ALA:C	10	12.9
(1,32)	1:A:34:VAL:N	1:A:34:VAL:CA	1:A:34:VAL:C	1:A:35:TRP:N	3	12.9
(1,10)	1:A:11:ARG:N	1:A:11:ARG:CA	1:A:11:ARG:C	1:A:12:GLU:N	9	12.9
(1,32)	1:A:34:VAL:N	1:A:34:VAL:CA	1:A:34:VAL:C	1:A:35:TRP:N	14	12.8
(1,86)	1:A:93:ALA:N	1:A:93:ALA:CA	1:A:93:ALA:C	1:A:94:GLN:N	1	12.7
(1,43)	1:A:47:ALA:C	1:A:48:LEU:N	1:A:48:LEU:CA	1:A:48:LEU:C	2	12.7
(1,43)	1:A:47:ALA:C	1:A:48:LEU:N	1:A:48:LEU:CA	1:A:48:LEU:C	5	12.7
(1,22)	1:A:17:LEU:N	1:A:17:LEU:CA	1:A:17:LEU:C	1:A:18:VAL:N	10	12.7
(1,81)	1:A:90:ILE:C	1:A:91:GLU:N	1:A:91:GLU:CA	1:A:91:GLU:C	7	12.6
(1,43)	1:A:47:ALA:C	1:A:48:LEU:N	1:A:48:LEU:CA	1:A:48:LEU:C	19	12.6
(1,10)	1:A:11:ARG:N	1:A:11:ARG:CA	1:A:11:ARG:C	1:A:12:GLU:N	5	12.6
(1,10)	1:A:11:ARG:N	1:A:11:ARG:CA	1:A:11:ARG:C	1:A:12:GLU:N	7	12.6
(1,88)	1:A:94:GLN:N	1:A:94:GLN:CA	1:A:94:GLN:C	1:A:95:PHE:N	20	12.5
(1,43)	1:A:47:ALA:C	1:A:48:LEU:N	1:A:48:LEU:CA	1:A:48:LEU:C	10	12.5
(1,36)	1:A:44:TYR:N	1:A:44:TYR:CA	1:A:44:TYR:C	1:A:45:CYS:N	3	12.5
(1,22)	1:A:17:LEU:N	1:A:17:LEU:CA	1:A:17:LEU:C	1:A:18:VAL:N	16	12.5
(1,111)	1:A:105:LYS:C	1:A:106:LEU:N	1:A:106:LEU:CA	1:A:106:LEU:C	5	12.5
(1,111)	1:A:105:LYS:C	1:A:106:LEU:N	1:A:106:LEU:CA	1:A:106:LEU:C	9	12.5
(1,10)	1:A:11:ARG:N	1:A:11:ARG:CA	1:A:11:ARG:C	1:A:12:GLU:N	14	12.5
(1,88)	1:A:94:GLN:N	1:A:94:GLN:CA	1:A:94:GLN:C	1:A:95:PHE:N	16	12.4
(1,83)	1:A:91:GLU:C	1:A:92:VAL:N	1:A:92:VAL:CA	1:A:92:VAL:C	11	12.4
(1,62)	1:A:64:GLN:N	1:A:64:GLN:CA	1:A:64:GLN:C	1:A:65:ARG:N	12	12.4
(1,133)	1:A:13:LEU:N	1:A:13:LEU:CA	1:A:13:LEU:CB	1:A:13:LEU:CG	8	12.4
(1,111)	1:A:105:LYS:C	1:A:106:LEU:N	1:A:106:LEU:CA	1:A:106:LEU:C	7	12.4
(1,117)	1:A:108:ARG:C	1:A:109:GLU:N	1:A:109:GLU:CA	1:A:109:GLU:C	6	12.3
(1,111)	1:A:105:LYS:C	1:A:106:LEU:N	1:A:106:LEU:CA	1:A:106:LEU:C	1	12.3
(1,10)	1:A:11:ARG:N	1:A:11:ARG:CA	1:A:11:ARG:C	1:A:12:GLU:N	16	12.3
(1,86)	1:A:93:ALA:N	1:A:93:ALA:CA	1:A:93:ALA:C	1:A:94:GLN:N	13	12.2
(1,81)	1:A:90:ILE:C	1:A:91:GLU:N	1:A:91:GLU:CA	1:A:91:GLU:C	10	12.2
(1,43)	1:A:47:ALA:C	1:A:48:LEU:N	1:A:48:LEU:CA	1:A:48:LEU:C	1	12.2
(1,43)	1:A:47:ALA:C	1:A:48:LEU:N	1:A:48:LEU:CA	1:A:48:LEU:C	7	12.2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,22)	1:A:17:LEU:N	1:A:17:LEU:CA	1:A:17:LEU:C	1:A:18:VAL:N	20	12.2
(1,115)	1:A:107:PHE:C	1:A:108:ARG:N	1:A:108:ARG:CA	1:A:108:ARG:C	13	12.2
(1,112)	1:A:106:LEU:N	1:A:106:LEU:CA	1:A:106:LEU:C	1:A:107:PHE:N	18	12.2
(1,111)	1:A:105:LYS:C	1:A:106:LEU:N	1:A:106:LEU:CA	1:A:106:LEU:C	12	12.2
(1,88)	1:A:94:GLN:N	1:A:94:GLN:CA	1:A:94:GLN:C	1:A:95:PHE:N	19	12.1
(1,86)	1:A:93:ALA:N	1:A:93:ALA:CA	1:A:93:ALA:C	1:A:94:GLN:N	7	12.1
(1,112)	1:A:106:LEU:N	1:A:106:LEU:CA	1:A:106:LEU:C	1:A:107:PHE:N	16	12.1
(1,110)	1:A:105:LYS:N	1:A:105:LYS:CA	1:A:105:LYS:C	1:A:106:LEU:N	9	12.1
(1,10)	1:A:11:ARG:N	1:A:11:ARG:CA	1:A:11:ARG:C	1:A:12:GLU:N	4	12.1
(1,90)	1:A:95:PHE:N	1:A:95:PHE:CA	1:A:95:PHE:C	1:A:96:VAL:N	13	12.0
(1,62)	1:A:64:GLN:N	1:A:64:GLN:CA	1:A:64:GLN:C	1:A:65:ARG:N	11	12.0
(1,55)	1:A:58:SER:C	1:A:59:ALA:N	1:A:59:ALA:CA	1:A:59:ALA:C	1	12.0
(1,22)	1:A:17:LEU:N	1:A:17:LEU:CA	1:A:17:LEU:C	1:A:18:VAL:N	6	12.0
(1,90)	1:A:95:PHE:N	1:A:95:PHE:CA	1:A:95:PHE:C	1:A:96:VAL:N	8	11.9
(1,55)	1:A:58:SER:C	1:A:59:ALA:N	1:A:59:ALA:CA	1:A:59:ALA:C	7	11.9
(1,43)	1:A:47:ALA:C	1:A:48:LEU:N	1:A:48:LEU:CA	1:A:48:LEU:C	6	11.9
(1,43)	1:A:47:ALA:C	1:A:48:LEU:N	1:A:48:LEU:CA	1:A:48:LEU:C	13	11.9
(1,53)	1:A:53:ASN:C	1:A:54:VAL:N	1:A:54:VAL:CA	1:A:54:VAL:C	5	11.8
(1,36)	1:A:44:TYR:N	1:A:44:TYR:CA	1:A:44:TYR:C	1:A:45:CYS:N	8	11.8
(1,36)	1:A:44:TYR:N	1:A:44:TYR:CA	1:A:44:TYR:C	1:A:45:CYS:N	19	11.8
(1,22)	1:A:17:LEU:N	1:A:17:LEU:CA	1:A:17:LEU:C	1:A:18:VAL:N	1	11.8
(1,117)	1:A:108:ARG:C	1:A:109:GLU:N	1:A:109:GLU:CA	1:A:109:GLU:C	14	11.8
(1,105)	1:A:102:HIS:C	1:A:103:LEU:N	1:A:103:LEU:CA	1:A:103:LEU:C	3	11.8
(1,10)	1:A:11:ARG:N	1:A:11:ARG:CA	1:A:11:ARG:C	1:A:12:GLU:N	18	11.8
(1,22)	1:A:17:LEU:N	1:A:17:LEU:CA	1:A:17:LEU:C	1:A:18:VAL:N	3	11.7
(1,12)	1:A:12:GLU:N	1:A:12:GLU:CA	1:A:12:GLU:C	1:A:13:LEU:N	8	11.7
(1,114)	1:A:107:PHE:N	1:A:107:PHE:CA	1:A:107:PHE:C	1:A:108:ARG:N	9	11.7
(1,10)	1:A:11:ARG:N	1:A:11:ARG:CA	1:A:11:ARG:C	1:A:12:GLU:N	15	11.7
(1,86)	1:A:93:ALA:N	1:A:93:ALA:CA	1:A:93:ALA:C	1:A:94:GLN:N	10	11.6
(1,128)	1:A:94:GLN:N	1:A:94:GLN:CA	1:A:94:GLN:CB	1:A:94:GLN:CG	14	11.6
(1,75)	1:A:87:ASP:C	1:A:88:THR:N	1:A:88:THR:CA	1:A:88:THR:C	7	11.4
(1,60)	1:A:63:THR:N	1:A:63:THR:CA	1:A:63:THR:C	1:A:64:GLN:N	10	11.4
(1,43)	1:A:47:ALA:C	1:A:48:LEU:N	1:A:48:LEU:CA	1:A:48:LEU:C	4	11.4
(1,43)	1:A:47:ALA:C	1:A:48:LEU:N	1:A:48:LEU:CA	1:A:48:LEU:C	12	11.4
(1,80)	1:A:90:ILE:N	1:A:90:ILE:CA	1:A:90:ILE:C	1:A:91:GLU:N	11	11.3
(1,36)	1:A:44:TYR:N	1:A:44:TYR:CA	1:A:44:TYR:C	1:A:45:CYS:N	1	11.3
(1,110)	1:A:105:LYS:N	1:A:105:LYS:CA	1:A:105:LYS:C	1:A:106:LEU:N	11	11.3
(1,86)	1:A:93:ALA:N	1:A:93:ALA:CA	1:A:93:ALA:C	1:A:94:GLN:N	20	11.2
(1,43)	1:A:47:ALA:C	1:A:48:LEU:N	1:A:48:LEU:CA	1:A:48:LEU:C	8	11.2
(1,22)	1:A:17:LEU:N	1:A:17:LEU:CA	1:A:17:LEU:C	1:A:18:VAL:N	7	11.2
(1,115)	1:A:107:PHE:C	1:A:108:ARG:N	1:A:108:ARG:CA	1:A:108:ARG:C	9	11.2
(1,112)	1:A:106:LEU:N	1:A:106:LEU:CA	1:A:106:LEU:C	1:A:107:PHE:N	4	11.2
(1,112)	1:A:106:LEU:N	1:A:106:LEU:CA	1:A:106:LEU:C	1:A:107:PHE:N	14	11.2
(1,105)	1:A:102:HIS:C	1:A:103:LEU:N	1:A:103:LEU:CA	1:A:103:LEU:C	10	11.2
(1,104)	1:A:102:HIS:N	1:A:102:HIS:CA	1:A:102:HIS:C	1:A:103:LEU:N	3	11.2
(1,10)	1:A:11:ARG:N	1:A:11:ARG:CA	1:A:11:ARG:C	1:A:12:GLU:N	13	11.2
(1,10)	1:A:11:ARG:N	1:A:11:ARG:CA	1:A:11:ARG:C	1:A:12:GLU:N	20	11.2
(1,43)	1:A:47:ALA:C	1:A:48:LEU:N	1:A:48:LEU:CA	1:A:48:LEU:C	14	11.1
(1,40)	1:A:46:ALA:N	1:A:46:ALA:CA	1:A:46:ALA:C	1:A:47:ALA:N	8	11.1
(1,22)	1:A:17:LEU:N	1:A:17:LEU:CA	1:A:17:LEU:C	1:A:18:VAL:N	4	11.1
(1,112)	1:A:106:LEU:N	1:A:106:LEU:CA	1:A:106:LEU:C	1:A:107:PHE:N	1	11.1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,112)	1:A:106:LEU:N	1:A:106:LEU:CA	1:A:106:LEU:C	1:A:107:PHE:N	6	11.1
(1,83)	1:A:91:GLU:C	1:A:92:VAL:N	1:A:92:VAL:CA	1:A:92:VAL:C	7	11.0
(1,81)	1:A:90:ILE:C	1:A:91:GLU:N	1:A:91:GLU:CA	1:A:91:GLU:C	13	11.0
(1,67)	1:A:66:MET:C	1:A:67:LEU:N	1:A:67:LEU:CA	1:A:67:LEU:C	19	11.0
(1,62)	1:A:64:GLN:N	1:A:64:GLN:CA	1:A:64:GLN:C	1:A:65:ARG:N	1	11.0
(1,62)	1:A:64:GLN:N	1:A:64:GLN:CA	1:A:64:GLN:C	1:A:65:ARG:N	15	11.0
(1,133)	1:A:13:LEU:N	1:A:13:LEU:CA	1:A:13:LEU:CB	1:A:13:LEU:CG	3	11.0
(1,114)	1:A:107:PHE:N	1:A:107:PHE:CA	1:A:107:PHE:C	1:A:108:ARG:N	7	11.0
(1,112)	1:A:106:LEU:N	1:A:106:LEU:CA	1:A:106:LEU:C	1:A:107:PHE:N	5	11.0
(1,111)	1:A:105:LYS:C	1:A:106:LEU:N	1:A:106:LEU:CA	1:A:106:LEU:C	2	11.0
(1,111)	1:A:105:LYS:C	1:A:106:LEU:N	1:A:106:LEU:CA	1:A:106:LEU:C	4	11.0
(1,111)	1:A:105:LYS:C	1:A:106:LEU:N	1:A:106:LEU:CA	1:A:106:LEU:C	20	11.0
(1,110)	1:A:105:LYS:N	1:A:105:LYS:CA	1:A:105:LYS:C	1:A:106:LEU:N	13	11.0
(1,83)	1:A:91:GLU:C	1:A:92:VAL:N	1:A:92:VAL:CA	1:A:92:VAL:C	3	10.9
(1,114)	1:A:107:PHE:N	1:A:107:PHE:CA	1:A:107:PHE:C	1:A:108:ARG:N	19	10.9
(1,110)	1:A:105:LYS:N	1:A:105:LYS:CA	1:A:105:LYS:C	1:A:106:LEU:N	2	10.9
(1,32)	1:A:34:VAL:N	1:A:34:VAL:CA	1:A:34:VAL:C	1:A:35:TRP:N	19	10.8
(1,29)	1:A:20:ILE:C	1:A:21:THR:N	1:A:21:THR:CA	1:A:21:THR:C	14	10.8
(1,111)	1:A:105:LYS:C	1:A:106:LEU:N	1:A:106:LEU:CA	1:A:106:LEU:C	11	10.8
(1,38)	1:A:45:CYS:N	1:A:45:CYS:CA	1:A:45:CYS:C	1:A:46:ALA:N	5	10.7
(1,22)	1:A:17:LEU:N	1:A:17:LEU:CA	1:A:17:LEU:C	1:A:18:VAL:N	13	10.7
(1,112)	1:A:106:LEU:N	1:A:106:LEU:CA	1:A:106:LEU:C	1:A:107:PHE:N	17	10.7
(1,10)	1:A:11:ARG:N	1:A:11:ARG:CA	1:A:11:ARG:C	1:A:12:GLU:N	6	10.7
(1,86)	1:A:93:ALA:N	1:A:93:ALA:CA	1:A:93:ALA:C	1:A:94:GLN:N	4	10.6
(1,40)	1:A:46:ALA:N	1:A:46:ALA:CA	1:A:46:ALA:C	1:A:47:ALA:N	18	10.6
(1,22)	1:A:17:LEU:N	1:A:17:LEU:CA	1:A:17:LEU:C	1:A:18:VAL:N	9	10.6
(1,115)	1:A:107:PHE:C	1:A:108:ARG:N	1:A:108:ARG:CA	1:A:108:ARG:C	18	10.6
(1,110)	1:A:105:LYS:N	1:A:105:LYS:CA	1:A:105:LYS:C	1:A:106:LEU:N	8	10.6
(1,10)	1:A:11:ARG:N	1:A:11:ARG:CA	1:A:11:ARG:C	1:A:12:GLU:N	1	10.6
(1,62)	1:A:64:GLN:N	1:A:64:GLN:CA	1:A:64:GLN:C	1:A:65:ARG:N	2	10.5
(1,51)	1:A:51:LEU:C	1:A:52:ILE:N	1:A:52:ILE:CA	1:A:52:ILE:C	19	10.5
(1,22)	1:A:17:LEU:N	1:A:17:LEU:CA	1:A:17:LEU:C	1:A:18:VAL:N	18	10.5
(1,90)	1:A:95:PHE:N	1:A:95:PHE:CA	1:A:95:PHE:C	1:A:96:VAL:N	1	10.4
(1,86)	1:A:93:ALA:N	1:A:93:ALA:CA	1:A:93:ALA:C	1:A:94:GLN:N	2	10.4
(1,62)	1:A:64:GLN:N	1:A:64:GLN:CA	1:A:64:GLN:C	1:A:65:ARG:N	20	10.4
(1,115)	1:A:107:PHE:C	1:A:108:ARG:N	1:A:108:ARG:CA	1:A:108:ARG:C	10	10.4
(1,114)	1:A:107:PHE:N	1:A:107:PHE:CA	1:A:107:PHE:C	1:A:108:ARG:N	6	10.4
(1,114)	1:A:107:PHE:N	1:A:107:PHE:CA	1:A:107:PHE:C	1:A:108:ARG:N	16	10.4
(1,114)	1:A:107:PHE:N	1:A:107:PHE:CA	1:A:107:PHE:C	1:A:108:ARG:N	20	10.4
(1,111)	1:A:105:LYS:C	1:A:106:LEU:N	1:A:106:LEU:CA	1:A:106:LEU:C	3	10.4
(1,86)	1:A:93:ALA:N	1:A:93:ALA:CA	1:A:93:ALA:C	1:A:94:GLN:N	8	10.3
(1,75)	1:A:87:ASP:C	1:A:88:THR:N	1:A:88:THR:CA	1:A:88:THR:C	13	10.3
(1,22)	1:A:17:LEU:N	1:A:17:LEU:CA	1:A:17:LEU:C	1:A:18:VAL:N	15	10.3
(1,128)	1:A:94:GLN:N	1:A:94:GLN:CA	1:A:94:GLN:CB	1:A:94:GLN:CG	16	10.3
(1,60)	1:A:63:THR:N	1:A:63:THR:CA	1:A:63:THR:C	1:A:64:GLN:N	13	10.2
(1,31)	1:A:33:MET:C	1:A:34:VAL:N	1:A:34:VAL:CA	1:A:34:VAL:C	20	10.2
(1,114)	1:A:107:PHE:N	1:A:107:PHE:CA	1:A:107:PHE:C	1:A:108:ARG:N	4	10.2
(1,40)	1:A:46:ALA:N	1:A:46:ALA:CA	1:A:46:ALA:C	1:A:47:ALA:N	2	10.1
(1,33)	1:A:42:GLY:C	1:A:43:MET:N	1:A:43:MET:CA	1:A:43:MET:C	17	10.1
(1,117)	1:A:108:ARG:C	1:A:109:GLU:N	1:A:109:GLU:CA	1:A:109:GLU:C	18	10.1
(1,115)	1:A:107:PHE:C	1:A:108:ARG:N	1:A:108:ARG:CA	1:A:108:ARG:C	15	10.1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,114)	1:A:107:PHE:N	1:A:107:PHE:CA	1:A:107:PHE:C	1:A:108:ARG:N	10	10.1
(1,114)	1:A:107:PHE:N	1:A:107:PHE:CA	1:A:107:PHE:C	1:A:108:ARG:N	18	10.1
(1,83)	1:A:91:GLU:C	1:A:92:VAL:N	1:A:92:VAL:CA	1:A:92:VAL:C	17	10.0
(1,80)	1:A:90:ILE:N	1:A:90:ILE:CA	1:A:90:ILE:C	1:A:91:GLU:N	14	10.0
(1,76)	1:A:88:THR:N	1:A:88:THR:CA	1:A:88:THR:C	1:A:89:LYS:N	13	10.0
(1,28)	1:A:20:ILE:N	1:A:20:ILE:CA	1:A:20:ILE:C	1:A:21:THR:N	14	10.0
(1,28)	1:A:20:ILE:N	1:A:20:ILE:CA	1:A:20:ILE:C	1:A:21:THR:N	15	10.0
(1,100)	1:A:100:LEU:N	1:A:100:LEU:CA	1:A:100:LEU:C	1:A:101:LEU:N	12	10.0
(1,75)	1:A:87:ASP:C	1:A:88:THR:N	1:A:88:THR:CA	1:A:88:THR:C	1	9.9
(1,43)	1:A:47:ALA:C	1:A:48:LEU:N	1:A:48:LEU:CA	1:A:48:LEU:C	9	9.9
(1,40)	1:A:46:ALA:N	1:A:46:ALA:CA	1:A:46:ALA:C	1:A:47:ALA:N	1	9.9
(1,29)	1:A:20:ILE:C	1:A:21:THR:N	1:A:21:THR:CA	1:A:21:THR:C	10	9.9
(1,137)	1:A:35:TRP:N	1:A:35:TRP:CA	1:A:35:TRP:CB	1:A:35:TRP:CG	5	9.9
(1,117)	1:A:108:ARG:C	1:A:109:GLU:N	1:A:109:GLU:CA	1:A:109:GLU:C	17	9.9
(1,114)	1:A:107:PHE:N	1:A:107:PHE:CA	1:A:107:PHE:C	1:A:108:ARG:N	11	9.9
(1,112)	1:A:106:LEU:N	1:A:106:LEU:CA	1:A:106:LEU:C	1:A:107:PHE:N	2	9.9
(1,110)	1:A:105:LYS:N	1:A:105:LYS:CA	1:A:105:LYS:C	1:A:106:LEU:N	19	9.9
(1,104)	1:A:102:HIS:N	1:A:102:HIS:CA	1:A:102:HIS:C	1:A:103:LEU:N	8	9.9
(1,10)	1:A:11:ARG:N	1:A:11:ARG:CA	1:A:11:ARG:C	1:A:12:GLU:N	2	9.9
(1,55)	1:A:58:SER:C	1:A:59:ALA:N	1:A:59:ALA:CA	1:A:59:ALA:C	6	9.8
(1,128)	1:A:94:GLN:N	1:A:94:GLN:CA	1:A:94:GLN:CB	1:A:94:GLN:CG	15	9.8
(1,117)	1:A:108:ARG:C	1:A:109:GLU:N	1:A:109:GLU:CA	1:A:109:GLU:C	5	9.8
(1,110)	1:A:105:LYS:N	1:A:105:LYS:CA	1:A:105:LYS:C	1:A:106:LEU:N	20	9.8
(1,83)	1:A:91:GLU:C	1:A:92:VAL:N	1:A:92:VAL:CA	1:A:92:VAL:C	5	9.7
(1,75)	1:A:87:ASP:C	1:A:88:THR:N	1:A:88:THR:CA	1:A:88:THR:C	17	9.7
(1,51)	1:A:51:LEU:C	1:A:52:ILE:N	1:A:52:ILE:CA	1:A:52:ILE:C	2	9.7
(1,51)	1:A:51:LEU:C	1:A:52:ILE:N	1:A:52:ILE:CA	1:A:52:ILE:C	17	9.7
(1,34)	1:A:43:MET:N	1:A:43:MET:CA	1:A:43:MET:C	1:A:44:TYR:N	10	9.7
(1,22)	1:A:17:LEU:N	1:A:17:LEU:CA	1:A:17:LEU:C	1:A:18:VAL:N	12	9.7
(1,16)	1:A:14:ILE:N	1:A:14:ILE:CA	1:A:14:ILE:C	1:A:15:GLU:N	20	9.7
(1,114)	1:A:107:PHE:N	1:A:107:PHE:CA	1:A:107:PHE:C	1:A:108:ARG:N	13	9.7
(1,114)	1:A:107:PHE:N	1:A:107:PHE:CA	1:A:107:PHE:C	1:A:108:ARG:N	17	9.7
(1,36)	1:A:44:TYR:N	1:A:44:TYR:CA	1:A:44:TYR:C	1:A:45:CYS:N	5	9.6
(1,117)	1:A:108:ARG:C	1:A:109:GLU:N	1:A:109:GLU:CA	1:A:109:GLU:C	1	9.6
(1,111)	1:A:105:LYS:C	1:A:106:LEU:N	1:A:106:LEU:CA	1:A:106:LEU:C	16	9.6
(1,88)	1:A:94:GLN:N	1:A:94:GLN:CA	1:A:94:GLN:C	1:A:95:PHE:N	13	9.5
(1,36)	1:A:44:TYR:N	1:A:44:TYR:CA	1:A:44:TYR:C	1:A:45:CYS:N	6	9.5
(1,36)	1:A:44:TYR:N	1:A:44:TYR:CA	1:A:44:TYR:C	1:A:45:CYS:N	18	9.5
(1,33)	1:A:42:GLY:C	1:A:43:MET:N	1:A:43:MET:CA	1:A:43:MET:C	16	9.5
(1,28)	1:A:20:ILE:N	1:A:20:ILE:CA	1:A:20:ILE:C	1:A:21:THR:N	13	9.5
(1,110)	1:A:105:LYS:N	1:A:105:LYS:CA	1:A:105:LYS:C	1:A:106:LEU:N	5	9.5
(1,90)	1:A:95:PHE:N	1:A:95:PHE:CA	1:A:95:PHE:C	1:A:96:VAL:N	12	9.4
(1,75)	1:A:87:ASP:C	1:A:88:THR:N	1:A:88:THR:CA	1:A:88:THR:C	15	9.4
(1,62)	1:A:64:GLN:N	1:A:64:GLN:CA	1:A:64:GLN:C	1:A:65:ARG:N	18	9.4
(1,55)	1:A:58:SER:C	1:A:59:ALA:N	1:A:59:ALA:CA	1:A:59:ALA:C	16	9.4
(1,22)	1:A:17:LEU:N	1:A:17:LEU:CA	1:A:17:LEU:C	1:A:18:VAL:N	2	9.4
(1,128)	1:A:94:GLN:N	1:A:94:GLN:CA	1:A:94:GLN:CB	1:A:94:GLN:CG	4	9.4
(1,110)	1:A:105:LYS:N	1:A:105:LYS:CA	1:A:105:LYS:C	1:A:106:LEU:N	3	9.4
(1,110)	1:A:105:LYS:N	1:A:105:LYS:CA	1:A:105:LYS:C	1:A:106:LEU:N	4	9.4
(1,110)	1:A:105:LYS:N	1:A:105:LYS:CA	1:A:105:LYS:C	1:A:106:LEU:N	6	9.4
(1,97)	1:A:98:ASP:C	1:A:99:LEU:N	1:A:99:LEU:CA	1:A:99:LEU:C	18	9.3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,96)	1:A:98:ASP:N	1:A:98:ASP:CA	1:A:98:ASP:C	1:A:99:LEU:N	3	9.3
(1,86)	1:A:93:ALA:N	1:A:93:ALA:CA	1:A:93:ALA:C	1:A:94:GLN:N	6	9.3
(1,43)	1:A:47:ALA:C	1:A:48:LEU:N	1:A:48:LEU:CA	1:A:48:LEU:C	3	9.3
(1,33)	1:A:42:GLY:C	1:A:43:MET:N	1:A:43:MET:CA	1:A:43:MET:C	1	9.3
(1,28)	1:A:20:ILE:N	1:A:20:ILE:CA	1:A:20:ILE:C	1:A:21:THR:N	6	9.3
(1,128)	1:A:94:GLN:N	1:A:94:GLN:CA	1:A:94:GLN:CB	1:A:94:GLN:CG	19	9.3
(1,119)	1:A:12:GLU:N	1:A:12:GLU:CA	1:A:12:GLU:CB	1:A:12:GLU:CG	5	9.3
(1,114)	1:A:107:PHE:N	1:A:107:PHE:CA	1:A:107:PHE:C	1:A:108:ARG:N	1	9.3
(1,114)	1:A:107:PHE:N	1:A:107:PHE:CA	1:A:107:PHE:C	1:A:108:ARG:N	8	9.3
(1,86)	1:A:93:ALA:N	1:A:93:ALA:CA	1:A:93:ALA:C	1:A:94:GLN:N	3	9.2
(1,38)	1:A:45:CYS:N	1:A:45:CYS:CA	1:A:45:CYS:C	1:A:46:ALA:N	17	9.2
(1,22)	1:A:17:LEU:N	1:A:17:LEU:CA	1:A:17:LEU:C	1:A:18:VAL:N	8	9.2
(1,115)	1:A:107:PHE:C	1:A:108:ARG:N	1:A:108:ARG:CA	1:A:108:ARG:C	17	9.2
(1,114)	1:A:107:PHE:N	1:A:107:PHE:CA	1:A:107:PHE:C	1:A:108:ARG:N	5	9.2
(1,88)	1:A:94:GLN:N	1:A:94:GLN:CA	1:A:94:GLN:C	1:A:95:PHE:N	1	9.1
(1,55)	1:A:58:SER:C	1:A:59:ALA:N	1:A:59:ALA:CA	1:A:59:ALA:C	12	9.1
(1,55)	1:A:58:SER:C	1:A:59:ALA:N	1:A:59:ALA:CA	1:A:59:ALA:C	14	9.1
(1,16)	1:A:14:ILE:N	1:A:14:ILE:CA	1:A:14:ILE:C	1:A:15:GLU:N	18	9.1
(1,128)	1:A:94:GLN:N	1:A:94:GLN:CA	1:A:94:GLN:CB	1:A:94:GLN:CG	1	9.1
(1,33)	1:A:42:GLY:C	1:A:43:MET:N	1:A:43:MET:CA	1:A:43:MET:C	14	9.0
(1,119)	1:A:12:GLU:N	1:A:12:GLU:CA	1:A:12:GLU:CB	1:A:12:GLU:CG	10	9.0
(1,22)	1:A:17:LEU:N	1:A:17:LEU:CA	1:A:17:LEU:C	1:A:18:VAL:N	14	8.9
(1,16)	1:A:14:ILE:N	1:A:14:ILE:CA	1:A:14:ILE:C	1:A:15:GLU:N	10	8.9
(1,128)	1:A:94:GLN:N	1:A:94:GLN:CA	1:A:94:GLN:CB	1:A:94:GLN:CG	13	8.9
(1,114)	1:A:107:PHE:N	1:A:107:PHE:CA	1:A:107:PHE:C	1:A:108:ARG:N	3	8.9
(1,114)	1:A:107:PHE:N	1:A:107:PHE:CA	1:A:107:PHE:C	1:A:108:ARG:N	14	8.9
(1,88)	1:A:94:GLN:N	1:A:94:GLN:CA	1:A:94:GLN:C	1:A:95:PHE:N	12	8.8
(1,55)	1:A:58:SER:C	1:A:59:ALA:N	1:A:59:ALA:CA	1:A:59:ALA:C	4	8.8
(1,38)	1:A:45:CYS:N	1:A:45:CYS:CA	1:A:45:CYS:C	1:A:46:ALA:N	16	8.8
(1,29)	1:A:20:ILE:C	1:A:21:THR:N	1:A:21:THR:CA	1:A:21:THR:C	6	8.8
(1,29)	1:A:20:ILE:C	1:A:21:THR:N	1:A:21:THR:CA	1:A:21:THR:C	8	8.8
(1,29)	1:A:20:ILE:C	1:A:21:THR:N	1:A:21:THR:CA	1:A:21:THR:C	11	8.8
(1,28)	1:A:20:ILE:N	1:A:20:ILE:CA	1:A:20:ILE:C	1:A:21:THR:N	10	8.8
(1,128)	1:A:94:GLN:N	1:A:94:GLN:CA	1:A:94:GLN:CB	1:A:94:GLN:CG	9	8.8
(1,112)	1:A:106:LEU:N	1:A:106:LEU:CA	1:A:106:LEU:C	1:A:107:PHE:N	20	8.8
(1,110)	1:A:105:LYS:N	1:A:105:LYS:CA	1:A:105:LYS:C	1:A:106:LEU:N	17	8.8
(1,90)	1:A:95:PHE:N	1:A:95:PHE:CA	1:A:95:PHE:C	1:A:96:VAL:N	19	8.7
(1,84)	1:A:92:VAL:N	1:A:92:VAL:CA	1:A:92:VAL:C	1:A:93:ALA:N	20	8.7
(1,75)	1:A:87:ASP:C	1:A:88:THR:N	1:A:88:THR:CA	1:A:88:THR:C	8	8.7
(1,67)	1:A:66:MET:C	1:A:67:LEU:N	1:A:67:LEU:CA	1:A:67:LEU:C	6	8.7
(1,67)	1:A:66:MET:C	1:A:67:LEU:N	1:A:67:LEU:CA	1:A:67:LEU:C	17	8.7
(1,33)	1:A:42:GLY:C	1:A:43:MET:N	1:A:43:MET:CA	1:A:43:MET:C	18	8.7
(1,32)	1:A:34:VAL:N	1:A:34:VAL:CA	1:A:34:VAL:C	1:A:35:TRP:N	13	8.7
(1,110)	1:A:105:LYS:N	1:A:105:LYS:CA	1:A:105:LYS:C	1:A:106:LEU:N	12	8.7
(1,86)	1:A:93:ALA:N	1:A:93:ALA:CA	1:A:93:ALA:C	1:A:94:GLN:N	18	8.6
(1,128)	1:A:94:GLN:N	1:A:94:GLN:CA	1:A:94:GLN:CB	1:A:94:GLN:CG	20	8.6
(1,110)	1:A:105:LYS:N	1:A:105:LYS:CA	1:A:105:LYS:C	1:A:106:LEU:N	1	8.6
(1,110)	1:A:105:LYS:N	1:A:105:LYS:CA	1:A:105:LYS:C	1:A:106:LEU:N	16	8.6
(1,78)	1:A:89:LYS:N	1:A:89:LYS:CA	1:A:89:LYS:C	1:A:90:ILE:N	10	8.5
(1,53)	1:A:53:ASN:C	1:A:54:VAL:N	1:A:54:VAL:CA	1:A:54:VAL:C	16	8.5
(1,118)	1:A:109:GLU:N	1:A:109:GLU:CA	1:A:109:GLU:C	1:A:110:GLY:N	14	8.5

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,114)	1:A:107:PHE:N	1:A:107:PHE:CA	1:A:107:PHE:C	1:A:108:ARG:N	2	8.5
(1,103)	1:A:101:LEU:C	1:A:102:HIS:N	1:A:102:HIS:CA	1:A:102:HIS:C	12	8.5
(1,90)	1:A:95:PHE:N	1:A:95:PHE:CA	1:A:95:PHE:C	1:A:96:VAL:N	4	8.4
(1,40)	1:A:46:ALA:N	1:A:46:ALA:CA	1:A:46:ALA:C	1:A:47:ALA:N	20	8.4
(1,29)	1:A:20:ILE:C	1:A:21:THR:N	1:A:21:THR:CA	1:A:21:THR:C	13	8.4
(1,128)	1:A:94:GLN:N	1:A:94:GLN:CA	1:A:94:GLN:CB	1:A:94:GLN:CG	7	8.4
(1,112)	1:A:106:LEU:N	1:A:106:LEU:CA	1:A:106:LEU:C	1:A:107:PHE:N	7	8.4
(1,112)	1:A:106:LEU:N	1:A:106:LEU:CA	1:A:106:LEU:C	1:A:107:PHE:N	11	8.4
(1,88)	1:A:94:GLN:N	1:A:94:GLN:CA	1:A:94:GLN:C	1:A:95:PHE:N	7	8.3
(1,128)	1:A:94:GLN:N	1:A:94:GLN:CA	1:A:94:GLN:CB	1:A:94:GLN:CG	5	8.3
(1,115)	1:A:107:PHE:C	1:A:108:ARG:N	1:A:108:ARG:CA	1:A:108:ARG:C	1	8.3
(1,115)	1:A:107:PHE:C	1:A:108:ARG:N	1:A:108:ARG:CA	1:A:108:ARG:C	5	8.3
(1,67)	1:A:66:MET:C	1:A:67:LEU:N	1:A:67:LEU:CA	1:A:67:LEU:C	12	8.2
(1,51)	1:A:51:LEU:C	1:A:52:ILE:N	1:A:52:ILE:CA	1:A:52:ILE:C	9	8.2
(1,38)	1:A:45:CYS:N	1:A:45:CYS:CA	1:A:45:CYS:C	1:A:46:ALA:N	15	8.2
(1,128)	1:A:94:GLN:N	1:A:94:GLN:CA	1:A:94:GLN:CB	1:A:94:GLN:CG	2	8.2
(1,128)	1:A:94:GLN:N	1:A:94:GLN:CA	1:A:94:GLN:CB	1:A:94:GLN:CG	3	8.2
(1,102)	1:A:101:LEU:N	1:A:101:LEU:CA	1:A:101:LEU:C	1:A:102:HIS:N	8	8.2
(1,81)	1:A:90:ILE:C	1:A:91:GLU:N	1:A:91:GLU:CA	1:A:91:GLU:C	1	8.1
(1,67)	1:A:66:MET:C	1:A:67:LEU:N	1:A:67:LEU:CA	1:A:67:LEU:C	4	8.1
(1,51)	1:A:51:LEU:C	1:A:52:ILE:N	1:A:52:ILE:CA	1:A:52:ILE:C	7	8.1
(1,145)	1:A:111:ARG:N	1:A:111:ARG:CA	1:A:111:ARG:CB	1:A:111:ARG:CG	8	8.1
(1,88)	1:A:94:GLN:N	1:A:94:GLN:CA	1:A:94:GLN:C	1:A:95:PHE:N	4	8.0
(1,83)	1:A:91:GLU:C	1:A:92:VAL:N	1:A:92:VAL:CA	1:A:92:VAL:C	16	8.0
(1,60)	1:A:63:THR:N	1:A:63:THR:CA	1:A:63:THR:C	1:A:64:GLN:N	5	8.0
(1,128)	1:A:94:GLN:N	1:A:94:GLN:CA	1:A:94:GLN:CB	1:A:94:GLN:CG	8	8.0
(1,110)	1:A:105:LYS:N	1:A:105:LYS:CA	1:A:105:LYS:C	1:A:106:LEU:N	18	8.0
(1,105)	1:A:102:HIS:C	1:A:103:LEU:N	1:A:103:LEU:CA	1:A:103:LEU:C	8	8.0
(1,76)	1:A:88:THR:N	1:A:88:THR:CA	1:A:88:THR:C	1:A:89:LYS:N	17	7.9
(1,55)	1:A:58:SER:C	1:A:59:ALA:N	1:A:59:ALA:CA	1:A:59:ALA:C	9	7.9
(1,55)	1:A:58:SER:C	1:A:59:ALA:N	1:A:59:ALA:CA	1:A:59:ALA:C	15	7.9
(1,40)	1:A:46:ALA:N	1:A:46:ALA:CA	1:A:46:ALA:C	1:A:47:ALA:N	13	7.9
(1,38)	1:A:45:CYS:N	1:A:45:CYS:CA	1:A:45:CYS:C	1:A:46:ALA:N	12	7.9
(1,28)	1:A:20:ILE:N	1:A:20:ILE:CA	1:A:20:ILE:C	1:A:21:THR:N	11	7.9
(1,90)	1:A:95:PHE:N	1:A:95:PHE:CA	1:A:95:PHE:C	1:A:96:VAL:N	16	7.8
(1,86)	1:A:93:ALA:N	1:A:93:ALA:CA	1:A:93:ALA:C	1:A:94:GLN:N	15	7.8
(1,83)	1:A:91:GLU:C	1:A:92:VAL:N	1:A:92:VAL:CA	1:A:92:VAL:C	6	7.8
(1,51)	1:A:51:LEU:C	1:A:52:ILE:N	1:A:52:ILE:CA	1:A:52:ILE:C	6	7.8
(1,33)	1:A:42:GLY:C	1:A:43:MET:N	1:A:43:MET:CA	1:A:43:MET:C	5	7.8
(1,22)	1:A:17:LEU:N	1:A:17:LEU:CA	1:A:17:LEU:C	1:A:18:VAL:N	17	7.8
(1,135)	1:A:23:ASN:N	1:A:23:ASN:CA	1:A:23:ASN:CB	1:A:23:ASN:CG	5	7.8
(1,88)	1:A:94:GLN:N	1:A:94:GLN:CA	1:A:94:GLN:C	1:A:95:PHE:N	9	7.7
(1,60)	1:A:63:THR:N	1:A:63:THR:CA	1:A:63:THR:C	1:A:64:GLN:N	4	7.7
(1,28)	1:A:20:ILE:N	1:A:20:ILE:CA	1:A:20:ILE:C	1:A:21:THR:N	17	7.7
(1,128)	1:A:94:GLN:N	1:A:94:GLN:CA	1:A:94:GLN:CB	1:A:94:GLN:CG	11	7.7
(1,115)	1:A:107:PHE:C	1:A:108:ARG:N	1:A:108:ARG:CA	1:A:108:ARG:C	4	7.7
(1,105)	1:A:102:HIS:C	1:A:103:LEU:N	1:A:103:LEU:CA	1:A:103:LEU:C	19	7.7
(1,96)	1:A:98:ASP:N	1:A:98:ASP:CA	1:A:98:ASP:C	1:A:99:LEU:N	9	7.6
(1,83)	1:A:91:GLU:C	1:A:92:VAL:N	1:A:92:VAL:CA	1:A:92:VAL:C	20	7.6
(1,36)	1:A:44:TYR:N	1:A:44:TYR:CA	1:A:44:TYR:C	1:A:45:CYS:N	11	7.6
(1,36)	1:A:44:TYR:N	1:A:44:TYR:CA	1:A:44:TYR:C	1:A:45:CYS:N	13	7.6

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,128)	1:A:94:GLN:N	1:A:94:GLN:CA	1:A:94:GLN:CB	1:A:94:GLN:CG	10	7.6
(1,128)	1:A:94:GLN:N	1:A:94:GLN:CA	1:A:94:GLN:CB	1:A:94:GLN:CG	12	7.6
(1,111)	1:A:105:LYS:C	1:A:106:LEU:N	1:A:106:LEU:CA	1:A:106:LEU:C	8	7.6
(1,97)	1:A:98:ASP:C	1:A:99:LEU:N	1:A:99:LEU:CA	1:A:99:LEU:C	8	7.5
(1,88)	1:A:94:GLN:N	1:A:94:GLN:CA	1:A:94:GLN:C	1:A:95:PHE:N	11	7.5
(1,86)	1:A:93:ALA:N	1:A:93:ALA:CA	1:A:93:ALA:C	1:A:94:GLN:N	11	7.5
(1,67)	1:A:66:MET:C	1:A:67:LEU:N	1:A:67:LEU:CA	1:A:67:LEU:C	15	7.5
(1,6)	1:A:9:ALA:N	1:A:9:ALA:CA	1:A:9:ALA:C	1:A:10:LEU:N	2	7.5
(1,53)	1:A:53:ASN:C	1:A:54:VAL:N	1:A:54:VAL:CA	1:A:54:VAL:C	1	7.5
(1,53)	1:A:53:ASN:C	1:A:54:VAL:N	1:A:54:VAL:CA	1:A:54:VAL:C	15	7.5
(1,53)	1:A:53:ASN:C	1:A:54:VAL:N	1:A:54:VAL:CA	1:A:54:VAL:C	19	7.5
(1,40)	1:A:46:ALA:N	1:A:46:ALA:CA	1:A:46:ALA:C	1:A:47:ALA:N	4	7.5
(1,128)	1:A:94:GLN:N	1:A:94:GLN:CA	1:A:94:GLN:CB	1:A:94:GLN:CG	6	7.5
(1,117)	1:A:108:ARG:C	1:A:109:GLU:N	1:A:109:GLU:CA	1:A:109:GLU:C	12	7.5
(1,65)	1:A:65:ARG:C	1:A:66:MET:N	1:A:66:MET:CA	1:A:66:MET:C	16	7.4
(1,28)	1:A:20:ILE:N	1:A:20:ILE:CA	1:A:20:ILE:C	1:A:21:THR:N	5	7.4
(1,12)	1:A:12:GLU:N	1:A:12:GLU:CA	1:A:12:GLU:C	1:A:13:LEU:N	2	7.4
(1,115)	1:A:107:PHE:C	1:A:108:ARG:N	1:A:108:ARG:CA	1:A:108:ARG:C	12	7.4
(1,88)	1:A:94:GLN:N	1:A:94:GLN:CA	1:A:94:GLN:C	1:A:95:PHE:N	6	7.3
(1,55)	1:A:58:SER:C	1:A:59:ALA:N	1:A:59:ALA:CA	1:A:59:ALA:C	8	7.3
(1,5)	1:A:8:THR:C	1:A:9:ALA:N	1:A:9:ALA:CA	1:A:9:ALA:C	5	7.3
(1,36)	1:A:44:TYR:N	1:A:44:TYR:CA	1:A:44:TYR:C	1:A:45:CYS:N	2	7.3
(1,36)	1:A:44:TYR:N	1:A:44:TYR:CA	1:A:44:TYR:C	1:A:45:CYS:N	4	7.3
(1,128)	1:A:94:GLN:N	1:A:94:GLN:CA	1:A:94:GLN:CB	1:A:94:GLN:CG	18	7.3
(1,115)	1:A:107:PHE:C	1:A:108:ARG:N	1:A:108:ARG:CA	1:A:108:ARG:C	16	7.3
(1,110)	1:A:105:LYS:N	1:A:105:LYS:CA	1:A:105:LYS:C	1:A:106:LEU:N	7	7.3
(1,86)	1:A:93:ALA:N	1:A:93:ALA:CA	1:A:93:ALA:C	1:A:94:GLN:N	17	7.2
(1,83)	1:A:91:GLU:C	1:A:92:VAL:N	1:A:92:VAL:CA	1:A:92:VAL:C	15	7.2
(1,81)	1:A:90:ILE:C	1:A:91:GLU:N	1:A:91:GLU:CA	1:A:91:GLU:C	17	7.2
(1,77)	1:A:88:THR:C	1:A:89:LYS:N	1:A:89:LYS:CA	1:A:89:LYS:C	12	7.2
(1,38)	1:A:45:CYS:N	1:A:45:CYS:CA	1:A:45:CYS:C	1:A:46:ALA:N	19	7.2
(1,25)	1:A:18:VAL:C	1:A:19:ASN:N	1:A:19:ASN:CA	1:A:19:ASN:C	6	7.2
(1,24)	1:A:18:VAL:N	1:A:18:VAL:CA	1:A:18:VAL:C	1:A:19:ASN:N	11	7.2
(1,110)	1:A:105:LYS:N	1:A:105:LYS:CA	1:A:105:LYS:C	1:A:106:LEU:N	10	7.2
(1,83)	1:A:91:GLU:C	1:A:92:VAL:N	1:A:92:VAL:CA	1:A:92:VAL:C	18	7.1
(1,67)	1:A:66:MET:C	1:A:67:LEU:N	1:A:67:LEU:CA	1:A:67:LEU:C	9	7.1
(1,66)	1:A:66:MET:N	1:A:66:MET:CA	1:A:66:MET:C	1:A:67:LEU:N	2	7.1
(1,63)	1:A:64:GLN:C	1:A:65:ARG:N	1:A:65:ARG:CA	1:A:65:ARG:C	3	7.1
(1,60)	1:A:63:THR:N	1:A:63:THR:CA	1:A:63:THR:C	1:A:64:GLN:N	18	7.1
(1,53)	1:A:53:ASN:C	1:A:54:VAL:N	1:A:54:VAL:CA	1:A:54:VAL:C	18	7.1
(1,51)	1:A:51:LEU:C	1:A:52:ILE:N	1:A:52:ILE:CA	1:A:52:ILE:C	14	7.1
(1,51)	1:A:51:LEU:C	1:A:52:ILE:N	1:A:52:ILE:CA	1:A:52:ILE:C	16	7.1
(1,36)	1:A:44:TYR:N	1:A:44:TYR:CA	1:A:44:TYR:C	1:A:45:CYS:N	7	7.1
(1,34)	1:A:43:MET:N	1:A:43:MET:CA	1:A:43:MET:C	1:A:44:TYR:N	5	7.1
(1,31)	1:A:33:MET:C	1:A:34:VAL:N	1:A:34:VAL:CA	1:A:34:VAL:C	1	7.1
(1,119)	1:A:12:GLU:N	1:A:12:GLU:CA	1:A:12:GLU:CB	1:A:12:GLU:CG	17	7.1
(1,102)	1:A:101:LEU:N	1:A:101:LEU:CA	1:A:101:LEU:C	1:A:102:HIS:N	7	7.1
(1,60)	1:A:63:THR:N	1:A:63:THR:CA	1:A:63:THR:C	1:A:64:GLN:N	6	7.0
(1,53)	1:A:53:ASN:C	1:A:54:VAL:N	1:A:54:VAL:CA	1:A:54:VAL:C	10	7.0
(1,42)	1:A:47:ALA:N	1:A:47:ALA:CA	1:A:47:ALA:C	1:A:48:LEU:N	19	7.0
(1,4)	1:A:8:THR:N	1:A:8:THR:CA	1:A:8:THR:C	1:A:9:ALA:N	16	7.0

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,38)	1:A:45:CYS:N	1:A:45:CYS:CA	1:A:45:CYS:C	1:A:46:ALA:N	8	7.0
(1,28)	1:A:20:ILE:N	1:A:20:ILE:CA	1:A:20:ILE:C	1:A:21:THR:N	12	7.0
(1,26)	1:A:19:ASN:N	1:A:19:ASN:CA	1:A:19:ASN:C	1:A:20:ILE:N	5	7.0
(1,25)	1:A:18:VAL:C	1:A:19:ASN:N	1:A:19:ASN:CA	1:A:19:ASN:C	10	7.0
(1,25)	1:A:18:VAL:C	1:A:19:ASN:N	1:A:19:ASN:CA	1:A:19:ASN:C	11	7.0
(1,24)	1:A:18:VAL:N	1:A:18:VAL:CA	1:A:18:VAL:C	1:A:19:ASN:N	6	7.0
(1,90)	1:A:95:PHE:N	1:A:95:PHE:CA	1:A:95:PHE:C	1:A:96:VAL:N	14	6.9
(1,88)	1:A:94:GLN:N	1:A:94:GLN:CA	1:A:94:GLN:C	1:A:95:PHE:N	10	6.9
(1,81)	1:A:90:ILE:C	1:A:91:GLU:N	1:A:91:GLU:CA	1:A:91:GLU:C	4	6.9
(1,60)	1:A:63:THR:N	1:A:63:THR:CA	1:A:63:THR:C	1:A:64:GLN:N	11	6.9
(1,6)	1:A:9:ALA:N	1:A:9:ALA:CA	1:A:9:ALA:C	1:A:10:LEU:N	17	6.9
(1,29)	1:A:20:ILE:C	1:A:21:THR:N	1:A:21:THR:CA	1:A:21:THR:C	1	6.9
(1,137)	1:A:35:TRP:N	1:A:35:TRP:CA	1:A:35:TRP:CB	1:A:35:TRP:CG	16	6.9
(1,12)	1:A:12:GLU:N	1:A:12:GLU:CA	1:A:12:GLU:C	1:A:13:LEU:N	5	6.9
(1,119)	1:A:12:GLU:N	1:A:12:GLU:CA	1:A:12:GLU:CB	1:A:12:GLU:CG	15	6.9
(1,102)	1:A:101:LEU:N	1:A:101:LEU:CA	1:A:101:LEU:C	1:A:102:HIS:N	3	6.9
(1,99)	1:A:99:LEU:C	1:A:100:LEU:N	1:A:100:LEU:CA	1:A:100:LEU:C	7	6.8
(1,96)	1:A:98:ASP:N	1:A:98:ASP:CA	1:A:98:ASP:C	1:A:99:LEU:N	7	6.8
(1,67)	1:A:66:MET:C	1:A:67:LEU:N	1:A:67:LEU:CA	1:A:67:LEU:C	1	6.8
(1,67)	1:A:66:MET:C	1:A:67:LEU:N	1:A:67:LEU:CA	1:A:67:LEU:C	8	6.8
(1,65)	1:A:65:ARG:C	1:A:66:MET:N	1:A:66:MET:CA	1:A:66:MET:C	9	6.8
(1,58)	1:A:62:LYS:N	1:A:62:LYS:CA	1:A:62:LYS:C	1:A:63:THR:N	10	6.8
(1,124)	1:A:64:GLN:N	1:A:64:GLN:CA	1:A:64:GLN:CB	1:A:64:GLN:CG	8	6.8
(1,114)	1:A:107:PHE:N	1:A:107:PHE:CA	1:A:107:PHE:C	1:A:108:ARG:N	12	6.8
(1,101)	1:A:100:LEU:C	1:A:101:LEU:N	1:A:101:LEU:CA	1:A:101:LEU:C	12	6.8
(1,92)	1:A:96:VAL:N	1:A:96:VAL:CA	1:A:96:VAL:C	1:A:97:LYS:N	14	6.7
(1,67)	1:A:66:MET:C	1:A:67:LEU:N	1:A:67:LEU:CA	1:A:67:LEU:C	16	6.7
(1,51)	1:A:51:LEU:C	1:A:52:ILE:N	1:A:52:ILE:CA	1:A:52:ILE:C	13	6.7
(1,47)	1:A:49:GLU:C	1:A:50:SER:N	1:A:50:SER:CA	1:A:50:SER:C	16	6.7
(1,36)	1:A:44:TYR:N	1:A:44:TYR:CA	1:A:44:TYR:C	1:A:45:CYS:N	15	6.7
(1,136)	1:A:24:GLN:N	1:A:24:GLN:CA	1:A:24:GLN:CB	1:A:24:GLN:CG	14	6.7
(1,101)	1:A:100:LEU:C	1:A:101:LEU:N	1:A:101:LEU:CA	1:A:101:LEU:C	11	6.7
(1,96)	1:A:98:ASP:N	1:A:98:ASP:CA	1:A:98:ASP:C	1:A:99:LEU:N	8	6.6
(1,88)	1:A:94:GLN:N	1:A:94:GLN:CA	1:A:94:GLN:C	1:A:95:PHE:N	14	6.6
(1,60)	1:A:63:THR:N	1:A:63:THR:CA	1:A:63:THR:C	1:A:64:GLN:N	16	6.6
(1,56)	1:A:59:ALA:N	1:A:59:ALA:CA	1:A:59:ALA:C	1:A:60:ILE:N	7	6.6
(1,53)	1:A:53:ASN:C	1:A:54:VAL:N	1:A:54:VAL:CA	1:A:54:VAL:C	6	6.6
(1,128)	1:A:94:GLN:N	1:A:94:GLN:CA	1:A:94:GLN:CB	1:A:94:GLN:CG	17	6.6
(1,12)	1:A:12:GLU:N	1:A:12:GLU:CA	1:A:12:GLU:C	1:A:13:LEU:N	16	6.6
(1,67)	1:A:66:MET:C	1:A:67:LEU:N	1:A:67:LEU:CA	1:A:67:LEU:C	3	6.5
(1,60)	1:A:63:THR:N	1:A:63:THR:CA	1:A:63:THR:C	1:A:64:GLN:N	9	6.5
(1,58)	1:A:62:LYS:N	1:A:62:LYS:CA	1:A:62:LYS:C	1:A:63:THR:N	8	6.5
(1,5)	1:A:8:THR:C	1:A:9:ALA:N	1:A:9:ALA:CA	1:A:9:ALA:C	6	6.5
(1,36)	1:A:44:TYR:N	1:A:44:TYR:CA	1:A:44:TYR:C	1:A:45:CYS:N	16	6.5
(1,117)	1:A:108:ARG:C	1:A:109:GLU:N	1:A:109:GLU:CA	1:A:109:GLU:C	2	6.5
(1,88)	1:A:94:GLN:N	1:A:94:GLN:CA	1:A:94:GLN:C	1:A:95:PHE:N	17	6.4
(1,81)	1:A:90:ILE:C	1:A:91:GLU:N	1:A:91:GLU:CA	1:A:91:GLU:C	2	6.4
(1,55)	1:A:58:SER:C	1:A:59:ALA:N	1:A:59:ALA:CA	1:A:59:ALA:C	5	6.4
(1,53)	1:A:53:ASN:C	1:A:54:VAL:N	1:A:54:VAL:CA	1:A:54:VAL:C	12	6.4
(1,51)	1:A:51:LEU:C	1:A:52:ILE:N	1:A:52:ILE:CA	1:A:52:ILE:C	1	6.4
(1,51)	1:A:51:LEU:C	1:A:52:ILE:N	1:A:52:ILE:CA	1:A:52:ILE:C	8	6.4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,31)	1:A:33:MET:C	1:A:34:VAL:N	1:A:34:VAL:CA	1:A:34:VAL:C	17	6.4
(1,22)	1:A:17:LEU:N	1:A:17:LEU:CA	1:A:17:LEU:C	1:A:18:VAL:N	19	6.4
(1,13)	1:A:12:GLU:C	1:A:13:LEU:N	1:A:13:LEU:CA	1:A:13:LEU:C	3	6.4
(1,117)	1:A:108:ARG:C	1:A:109:GLU:N	1:A:109:GLU:CA	1:A:109:GLU:C	4	6.4
(1,88)	1:A:94:GLN:N	1:A:94:GLN:CA	1:A:94:GLN:C	1:A:95:PHE:N	2	6.3
(1,84)	1:A:92:VAL:N	1:A:92:VAL:CA	1:A:92:VAL:C	1:A:93:ALA:N	1	6.3
(1,75)	1:A:87:ASP:C	1:A:88:THR:N	1:A:88:THR:CA	1:A:88:THR:C	10	6.3
(1,60)	1:A:63:THR:N	1:A:63:THR:CA	1:A:63:THR:C	1:A:64:GLN:N	17	6.3
(1,56)	1:A:59:ALA:N	1:A:59:ALA:CA	1:A:59:ALA:C	1:A:60:ILE:N	2	6.3
(1,118)	1:A:109:GLU:N	1:A:109:GLU:CA	1:A:109:GLU:C	1:A:110:GLY:N	12	6.3
(1,66)	1:A:66:MET:N	1:A:66:MET:CA	1:A:66:MET:C	1:A:67:LEU:N	1	6.2
(1,60)	1:A:63:THR:N	1:A:63:THR:CA	1:A:63:THR:C	1:A:64:GLN:N	1	6.2
(1,50)	1:A:51:LEU:N	1:A:51:LEU:CA	1:A:51:LEU:C	1:A:52:ILE:N	9	6.2
(1,49)	1:A:50:SER:C	1:A:51:LEU:N	1:A:51:LEU:CA	1:A:51:LEU:C	3	6.2
(1,37)	1:A:44:TYR:C	1:A:45:CYS:N	1:A:45:CYS:CA	1:A:45:CYS:C	3	6.2
(1,24)	1:A:18:VAL:N	1:A:18:VAL:CA	1:A:18:VAL:C	1:A:19:ASN:N	3	6.2
(1,24)	1:A:18:VAL:N	1:A:18:VAL:CA	1:A:18:VAL:C	1:A:19:ASN:N	13	6.2
(1,24)	1:A:18:VAL:N	1:A:18:VAL:CA	1:A:18:VAL:C	1:A:19:ASN:N	14	6.2
(1,16)	1:A:14:ILE:N	1:A:14:ILE:CA	1:A:14:ILE:C	1:A:15:GLU:N	12	6.2
(1,118)	1:A:109:GLU:N	1:A:109:GLU:CA	1:A:109:GLU:C	1:A:110:GLY:N	5	6.2
(1,102)	1:A:101:LEU:N	1:A:101:LEU:CA	1:A:101:LEU:C	1:A:102:HIS:N	10	6.2
(1,88)	1:A:94:GLN:N	1:A:94:GLN:CA	1:A:94:GLN:C	1:A:95:PHE:N	8	6.1
(1,83)	1:A:91:GLU:C	1:A:92:VAL:N	1:A:92:VAL:CA	1:A:92:VAL:C	4	6.1
(1,69)	1:A:67:LEU:C	1:A:68:SER:N	1:A:68:SER:CA	1:A:68:SER:C	16	6.1
(1,67)	1:A:66:MET:C	1:A:67:LEU:N	1:A:67:LEU:CA	1:A:67:LEU:C	2	6.1
(1,67)	1:A:66:MET:C	1:A:67:LEU:N	1:A:67:LEU:CA	1:A:67:LEU:C	11	6.1
(1,63)	1:A:64:GLN:C	1:A:65:ARG:N	1:A:65:ARG:CA	1:A:65:ARG:C	17	6.1
(1,53)	1:A:53:ASN:C	1:A:54:VAL:N	1:A:54:VAL:CA	1:A:54:VAL:C	7	6.1
(1,38)	1:A:45:CYS:N	1:A:45:CYS:CA	1:A:45:CYS:C	1:A:46:ALA:N	7	6.1
(1,38)	1:A:45:CYS:N	1:A:45:CYS:CA	1:A:45:CYS:C	1:A:46:ALA:N	20	6.1
(1,25)	1:A:18:VAL:C	1:A:19:ASN:N	1:A:19:ASN:CA	1:A:19:ASN:C	3	6.1
(1,24)	1:A:18:VAL:N	1:A:18:VAL:CA	1:A:18:VAL:C	1:A:19:ASN:N	18	6.1
(1,16)	1:A:14:ILE:N	1:A:14:ILE:CA	1:A:14:ILE:C	1:A:15:GLU:N	6	6.1
(1,12)	1:A:12:GLU:N	1:A:12:GLU:CA	1:A:12:GLU:C	1:A:13:LEU:N	6	6.1
(1,12)	1:A:12:GLU:N	1:A:12:GLU:CA	1:A:12:GLU:C	1:A:13:LEU:N	10	6.1
(1,12)	1:A:12:GLU:N	1:A:12:GLU:CA	1:A:12:GLU:C	1:A:13:LEU:N	19	6.1
(1,97)	1:A:98:ASP:C	1:A:99:LEU:N	1:A:99:LEU:CA	1:A:99:LEU:C	15	6.0
(1,80)	1:A:90:ILE:N	1:A:90:ILE:CA	1:A:90:ILE:C	1:A:91:GLU:N	3	6.0
(1,66)	1:A:66:MET:N	1:A:66:MET:CA	1:A:66:MET:C	1:A:67:LEU:N	8	6.0
(1,66)	1:A:66:MET:N	1:A:66:MET:CA	1:A:66:MET:C	1:A:67:LEU:N	15	6.0
(1,65)	1:A:65:ARG:C	1:A:66:MET:N	1:A:66:MET:CA	1:A:66:MET:C	5	6.0
(1,55)	1:A:58:SER:C	1:A:59:ALA:N	1:A:59:ALA:CA	1:A:59:ALA:C	19	6.0
(1,53)	1:A:53:ASN:C	1:A:54:VAL:N	1:A:54:VAL:CA	1:A:54:VAL:C	14	6.0
(1,47)	1:A:49:GLU:C	1:A:50:SER:N	1:A:50:SER:CA	1:A:50:SER:C	17	6.0
(1,33)	1:A:42:GLY:C	1:A:43:MET:N	1:A:43:MET:CA	1:A:43:MET:C	19	6.0
(1,101)	1:A:100:LEU:C	1:A:101:LEU:N	1:A:101:LEU:CA	1:A:101:LEU:C	3	6.0
(1,83)	1:A:91:GLU:C	1:A:92:VAL:N	1:A:92:VAL:CA	1:A:92:VAL:C	8	5.9
(1,24)	1:A:18:VAL:N	1:A:18:VAL:CA	1:A:18:VAL:C	1:A:19:ASN:N	17	5.9
(1,24)	1:A:18:VAL:N	1:A:18:VAL:CA	1:A:18:VAL:C	1:A:19:ASN:N	20	5.9
(1,16)	1:A:14:ILE:N	1:A:14:ILE:CA	1:A:14:ILE:C	1:A:15:GLU:N	16	5.9
(1,135)	1:A:23:ASN:N	1:A:23:ASN:CA	1:A:23:ASN:CB	1:A:23:ASN:CG	18	5.9

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,12)	1:A:12:GLU:N	1:A:12:GLU:CA	1:A:12:GLU:C	1:A:13:LEU:N	17	5.9
(1,115)	1:A:107:PHE:C	1:A:108:ARG:N	1:A:108:ARG:CA	1:A:108:ARG:C	20	5.9
(1,99)	1:A:99:LEU:C	1:A:100:LEU:N	1:A:100:LEU:CA	1:A:100:LEU:C	6	5.8
(1,97)	1:A:98:ASP:C	1:A:99:LEU:N	1:A:99:LEU:CA	1:A:99:LEU:C	19	5.8
(1,97)	1:A:98:ASP:C	1:A:99:LEU:N	1:A:99:LEU:CA	1:A:99:LEU:C	20	5.8
(1,90)	1:A:95:PHE:N	1:A:95:PHE:CA	1:A:95:PHE:C	1:A:96:VAL:N	15	5.8
(1,67)	1:A:66:MET:C	1:A:67:LEU:N	1:A:67:LEU:CA	1:A:67:LEU:C	20	5.8
(1,60)	1:A:63:THR:N	1:A:63:THR:CA	1:A:63:THR:C	1:A:64:GLN:N	19	5.8
(1,6)	1:A:9:ALA:N	1:A:9:ALA:CA	1:A:9:ALA:C	1:A:10:LEU:N	16	5.8
(1,4)	1:A:8:THR:N	1:A:8:THR:CA	1:A:8:THR:C	1:A:9:ALA:N	20	5.8
(1,37)	1:A:44:TYR:C	1:A:45:CYS:N	1:A:45:CYS:CA	1:A:45:CYS:C	18	5.8
(1,29)	1:A:20:ILE:C	1:A:21:THR:N	1:A:21:THR:CA	1:A:21:THR:C	19	5.8
(1,24)	1:A:18:VAL:N	1:A:18:VAL:CA	1:A:18:VAL:C	1:A:19:ASN:N	10	5.8
(1,110)	1:A:105:LYS:N	1:A:105:LYS:CA	1:A:105:LYS:C	1:A:106:LEU:N	14	5.8
(1,66)	1:A:66:MET:N	1:A:66:MET:CA	1:A:66:MET:C	1:A:67:LEU:N	12	5.7
(1,47)	1:A:49:GLU:C	1:A:50:SER:N	1:A:50:SER:CA	1:A:50:SER:C	20	5.7
(1,33)	1:A:42:GLY:C	1:A:43:MET:N	1:A:43:MET:CA	1:A:43:MET:C	7	5.7
(1,28)	1:A:20:ILE:N	1:A:20:ILE:CA	1:A:20:ILE:C	1:A:21:THR:N	1	5.7
(1,25)	1:A:18:VAL:C	1:A:19:ASN:N	1:A:19:ASN:CA	1:A:19:ASN:C	18	5.7
(1,16)	1:A:14:ILE:N	1:A:14:ILE:CA	1:A:14:ILE:C	1:A:15:GLU:N	2	5.7
(1,13)	1:A:12:GLU:C	1:A:13:LEU:N	1:A:13:LEU:CA	1:A:13:LEU:C	8	5.7
(1,119)	1:A:12:GLU:N	1:A:12:GLU:CA	1:A:12:GLU:CB	1:A:12:GLU:CG	20	5.7
(1,88)	1:A:94:GLN:N	1:A:94:GLN:CA	1:A:94:GLN:C	1:A:95:PHE:N	18	5.6
(1,60)	1:A:63:THR:N	1:A:63:THR:CA	1:A:63:THR:C	1:A:64:GLN:N	12	5.6
(1,55)	1:A:58:SER:C	1:A:59:ALA:N	1:A:59:ALA:CA	1:A:59:ALA:C	20	5.6
(1,40)	1:A:46:ALA:N	1:A:46:ALA:CA	1:A:46:ALA:C	1:A:47:ALA:N	17	5.6
(1,35)	1:A:43:MET:C	1:A:44:TYR:N	1:A:44:TYR:CA	1:A:44:TYR:C	16	5.6
(1,24)	1:A:18:VAL:N	1:A:18:VAL:CA	1:A:18:VAL:C	1:A:19:ASN:N	9	5.6
(1,14)	1:A:13:LEU:N	1:A:13:LEU:CA	1:A:13:LEU:C	1:A:14:ILE:N	6	5.6
(1,137)	1:A:35:TRP:N	1:A:35:TRP:CA	1:A:35:TRP:CB	1:A:35:TRP:CG	11	5.6
(1,135)	1:A:23:ASN:N	1:A:23:ASN:CA	1:A:23:ASN:CB	1:A:23:ASN:CG	11	5.6
(1,115)	1:A:107:PHE:C	1:A:108:ARG:N	1:A:108:ARG:CA	1:A:108:ARG:C	3	5.6
(1,86)	1:A:93:ALA:N	1:A:93:ALA:CA	1:A:93:ALA:C	1:A:94:GLN:N	9	5.5
(1,78)	1:A:89:LYS:N	1:A:89:LYS:CA	1:A:89:LYS:C	1:A:90:ILE:N	18	5.5
(1,67)	1:A:66:MET:C	1:A:67:LEU:N	1:A:67:LEU:CA	1:A:67:LEU:C	5	5.5
(1,65)	1:A:65:ARG:C	1:A:66:MET:N	1:A:66:MET:CA	1:A:66:MET:C	6	5.5
(1,62)	1:A:64:GLN:N	1:A:64:GLN:CA	1:A:64:GLN:C	1:A:65:ARG:N	14	5.5
(1,56)	1:A:59:ALA:N	1:A:59:ALA:CA	1:A:59:ALA:C	1:A:60:ILE:N	18	5.5
(1,4)	1:A:8:THR:N	1:A:8:THR:CA	1:A:8:THR:C	1:A:9:ALA:N	8	5.5
(1,118)	1:A:109:GLU:N	1:A:109:GLU:CA	1:A:109:GLU:C	1:A:110:GLY:N	2	5.5
(1,118)	1:A:109:GLU:N	1:A:109:GLU:CA	1:A:109:GLU:C	1:A:110:GLY:N	20	5.5
(1,101)	1:A:100:LEU:C	1:A:101:LEU:N	1:A:101:LEU:CA	1:A:101:LEU:C	17	5.5
(1,92)	1:A:96:VAL:N	1:A:96:VAL:CA	1:A:96:VAL:C	1:A:97:LYS:N	18	5.4
(1,88)	1:A:94:GLN:N	1:A:94:GLN:CA	1:A:94:GLN:C	1:A:95:PHE:N	3	5.4
(1,77)	1:A:88:THR:C	1:A:89:LYS:N	1:A:89:LYS:CA	1:A:89:LYS:C	19	5.4
(1,7)	1:A:9:ALA:C	1:A:10:LEU:N	1:A:10:LEU:CA	1:A:10:LEU:C	8	5.4
(1,65)	1:A:65:ARG:C	1:A:66:MET:N	1:A:66:MET:CA	1:A:66:MET:C	17	5.4
(1,65)	1:A:65:ARG:C	1:A:66:MET:N	1:A:66:MET:CA	1:A:66:MET:C	19	5.4
(1,63)	1:A:64:GLN:C	1:A:65:ARG:N	1:A:65:ARG:CA	1:A:65:ARG:C	6	5.4
(1,63)	1:A:64:GLN:C	1:A:65:ARG:N	1:A:65:ARG:CA	1:A:65:ARG:C	9	5.4
(1,60)	1:A:63:THR:N	1:A:63:THR:CA	1:A:63:THR:C	1:A:64:GLN:N	3	5.4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,60)	1:A:63:THR:N	1:A:63:THR:CA	1:A:63:THR:C	1:A:64:GLN:N	7	5.4
(1,47)	1:A:49:GLU:C	1:A:50:SER:N	1:A:50:SER:CA	1:A:50:SER:C	11	5.4
(1,36)	1:A:44:TYR:N	1:A:44:TYR:CA	1:A:44:TYR:C	1:A:45:CYS:N	9	5.4
(1,135)	1:A:23:ASN:N	1:A:23:ASN:CA	1:A:23:ASN:CB	1:A:23:ASN:CG	9	5.4
(1,117)	1:A:108:ARG:C	1:A:109:GLU:N	1:A:109:GLU:CA	1:A:109:GLU:C	11	5.4
(1,117)	1:A:108:ARG:C	1:A:109:GLU:N	1:A:109:GLU:CA	1:A:109:GLU:C	20	5.4
(1,115)	1:A:107:PHE:C	1:A:108:ARG:N	1:A:108:ARG:CA	1:A:108:ARG:C	2	5.4
(1,56)	1:A:59:ALA:N	1:A:59:ALA:CA	1:A:59:ALA:C	1:A:60:ILE:N	19	5.3
(1,51)	1:A:51:LEU:C	1:A:52:ILE:N	1:A:52:ILE:CA	1:A:52:ILE:C	4	5.3
(1,26)	1:A:19:ASN:N	1:A:19:ASN:CA	1:A:19:ASN:C	1:A:20:ILE:N	17	5.3
(1,25)	1:A:18:VAL:C	1:A:19:ASN:N	1:A:19:ASN:CA	1:A:19:ASN:C	20	5.3
(1,24)	1:A:18:VAL:N	1:A:18:VAL:CA	1:A:18:VAL:C	1:A:19:ASN:N	4	5.3
(1,24)	1:A:18:VAL:N	1:A:18:VAL:CA	1:A:18:VAL:C	1:A:19:ASN:N	7	5.3
(1,16)	1:A:14:ILE:N	1:A:14:ILE:CA	1:A:14:ILE:C	1:A:15:GLU:N	15	5.3
(1,115)	1:A:107:PHE:C	1:A:108:ARG:N	1:A:108:ARG:CA	1:A:108:ARG:C	11	5.3
(1,98)	1:A:99:LEU:N	1:A:99:LEU:CA	1:A:99:LEU:C	1:A:100:LEU:N	10	5.2
(1,90)	1:A:95:PHE:N	1:A:95:PHE:CA	1:A:95:PHE:C	1:A:96:VAL:N	2	5.2
(1,90)	1:A:95:PHE:N	1:A:95:PHE:CA	1:A:95:PHE:C	1:A:96:VAL:N	5	5.2
(1,65)	1:A:65:ARG:C	1:A:66:MET:N	1:A:66:MET:CA	1:A:66:MET:C	3	5.2
(1,6)	1:A:9:ALA:N	1:A:9:ALA:CA	1:A:9:ALA:C	1:A:10:LEU:N	6	5.2
(1,51)	1:A:51:LEU:C	1:A:52:ILE:N	1:A:52:ILE:CA	1:A:52:ILE:C	3	5.2
(1,51)	1:A:51:LEU:C	1:A:52:ILE:N	1:A:52:ILE:CA	1:A:52:ILE:C	20	5.2
(1,24)	1:A:18:VAL:N	1:A:18:VAL:CA	1:A:18:VAL:C	1:A:19:ASN:N	5	5.2
(1,24)	1:A:18:VAL:N	1:A:18:VAL:CA	1:A:18:VAL:C	1:A:19:ASN:N	8	5.2
(1,118)	1:A:109:GLU:N	1:A:109:GLU:CA	1:A:109:GLU:C	1:A:110:GLY:N	8	5.2
(1,92)	1:A:96:VAL:N	1:A:96:VAL:CA	1:A:96:VAL:C	1:A:97:LYS:N	11	5.1
(1,83)	1:A:91:GLU:C	1:A:92:VAL:N	1:A:92:VAL:CA	1:A:92:VAL:C	19	5.1
(1,8)	1:A:10:LEU:N	1:A:10:LEU:CA	1:A:10:LEU:C	1:A:11:ARG:N	18	5.1
(1,65)	1:A:65:ARG:C	1:A:66:MET:N	1:A:66:MET:CA	1:A:66:MET:C	10	5.1
(1,65)	1:A:65:ARG:C	1:A:66:MET:N	1:A:66:MET:CA	1:A:66:MET:C	20	5.1
(1,58)	1:A:62:LYS:N	1:A:62:LYS:CA	1:A:62:LYS:C	1:A:63:THR:N	17	5.1
(1,55)	1:A:58:SER:C	1:A:59:ALA:N	1:A:59:ALA:CA	1:A:59:ALA:C	18	5.1
(1,51)	1:A:51:LEU:C	1:A:52:ILE:N	1:A:52:ILE:CA	1:A:52:ILE:C	11	5.1
(1,49)	1:A:50:SER:C	1:A:51:LEU:N	1:A:51:LEU:CA	1:A:51:LEU:C	4	5.1
(1,49)	1:A:50:SER:C	1:A:51:LEU:N	1:A:51:LEU:CA	1:A:51:LEU:C	8	5.1
(1,47)	1:A:49:GLU:C	1:A:50:SER:N	1:A:50:SER:CA	1:A:50:SER:C	13	5.1
(1,38)	1:A:45:CYS:N	1:A:45:CYS:CA	1:A:45:CYS:C	1:A:46:ALA:N	13	5.1
(1,36)	1:A:44:TYR:N	1:A:44:TYR:CA	1:A:44:TYR:C	1:A:45:CYS:N	17	5.1
(1,25)	1:A:18:VAL:C	1:A:19:ASN:N	1:A:19:ASN:CA	1:A:19:ASN:C	15	5.1
(1,24)	1:A:18:VAL:N	1:A:18:VAL:CA	1:A:18:VAL:C	1:A:19:ASN:N	15	5.1
(1,20)	1:A:16:GLU:N	1:A:16:GLU:CA	1:A:16:GLU:C	1:A:17:LEU:N	10	5.1
(1,112)	1:A:106:LEU:N	1:A:106:LEU:CA	1:A:106:LEU:C	1:A:107:PHE:N	10	5.1
(1,99)	1:A:99:LEU:C	1:A:100:LEU:N	1:A:100:LEU:CA	1:A:100:LEU:C	8	5.0
(1,93)	1:A:96:VAL:C	1:A:97:LYS:N	1:A:97:LYS:CA	1:A:97:LYS:C	14	5.0
(1,92)	1:A:96:VAL:N	1:A:96:VAL:CA	1:A:96:VAL:C	1:A:97:LYS:N	5	5.0
(1,77)	1:A:88:THR:C	1:A:89:LYS:N	1:A:89:LYS:CA	1:A:89:LYS:C	10	5.0
(1,66)	1:A:66:MET:N	1:A:66:MET:CA	1:A:66:MET:C	1:A:67:LEU:N	18	5.0
(1,63)	1:A:64:GLN:C	1:A:65:ARG:N	1:A:65:ARG:CA	1:A:65:ARG:C	4	5.0
(1,58)	1:A:62:LYS:N	1:A:62:LYS:CA	1:A:62:LYS:C	1:A:63:THR:N	12	5.0
(1,29)	1:A:20:ILE:C	1:A:21:THR:N	1:A:21:THR:CA	1:A:21:THR:C	3	5.0
(1,142)	1:A:99:LEU:N	1:A:99:LEU:CA	1:A:99:LEU:CB	1:A:99:LEU:CG	14	5.0

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,118)	1:A:109:GLU:N	1:A:109:GLU:CA	1:A:109:GLU:C	1:A:110:GLY:N	11	5.0
(1,117)	1:A:108:ARG:C	1:A:109:GLU:N	1:A:109:GLU:CA	1:A:109:GLU:C	3	5.0
(1,101)	1:A:100:LEU:C	1:A:101:LEU:N	1:A:101:LEU:CA	1:A:101:LEU:C	15	5.0
(1,101)	1:A:100:LEU:C	1:A:101:LEU:N	1:A:101:LEU:CA	1:A:101:LEU:C	18	5.0
(1,92)	1:A:96:VAL:N	1:A:96:VAL:CA	1:A:96:VAL:C	1:A:97:LYS:N	3	4.9
(1,86)	1:A:93:ALA:N	1:A:93:ALA:CA	1:A:93:ALA:C	1:A:94:GLN:N	19	4.9
(1,80)	1:A:90:ILE:N	1:A:90:ILE:CA	1:A:90:ILE:C	1:A:91:GLU:N	6	4.9
(1,7)	1:A:9:ALA:C	1:A:10:LEU:N	1:A:10:LEU:CA	1:A:10:LEU:C	3	4.9
(1,7)	1:A:9:ALA:C	1:A:10:LEU:N	1:A:10:LEU:CA	1:A:10:LEU:C	14	4.9
(1,65)	1:A:65:ARG:C	1:A:66:MET:N	1:A:66:MET:CA	1:A:66:MET:C	12	4.9
(1,64)	1:A:65:ARG:N	1:A:65:ARG:CA	1:A:65:ARG:C	1:A:66:MET:N	2	4.9
(1,63)	1:A:64:GLN:C	1:A:65:ARG:N	1:A:65:ARG:CA	1:A:65:ARG:C	16	4.9
(1,60)	1:A:63:THR:N	1:A:63:THR:CA	1:A:63:THR:C	1:A:64:GLN:N	2	4.9
(1,60)	1:A:63:THR:N	1:A:63:THR:CA	1:A:63:THR:C	1:A:64:GLN:N	15	4.9
(1,56)	1:A:59:ALA:N	1:A:59:ALA:CA	1:A:59:ALA:C	1:A:60:ILE:N	11	4.9
(1,51)	1:A:51:LEU:C	1:A:52:ILE:N	1:A:52:ILE:CA	1:A:52:ILE:C	15	4.9
(1,47)	1:A:49:GLU:C	1:A:50:SER:N	1:A:50:SER:CA	1:A:50:SER:C	2	4.9
(1,46)	1:A:49:GLU:N	1:A:49:GLU:CA	1:A:49:GLU:C	1:A:50:SER:N	11	4.9
(1,37)	1:A:44:TYR:C	1:A:45:CYS:N	1:A:45:CYS:CA	1:A:45:CYS:C	1	4.9
(1,29)	1:A:20:ILE:C	1:A:21:THR:N	1:A:21:THR:CA	1:A:21:THR:C	5	4.9
(1,25)	1:A:18:VAL:C	1:A:19:ASN:N	1:A:19:ASN:CA	1:A:19:ASN:C	4	4.9
(1,116)	1:A:108:ARG:N	1:A:108:ARG:CA	1:A:108:ARG:C	1:A:109:GLU:N	13	4.9
(1,112)	1:A:106:LEU:N	1:A:106:LEU:CA	1:A:106:LEU:C	1:A:107:PHE:N	12	4.9
(1,1)	1:A:6:PRO:C	1:A:7:SER:N	1:A:7:SER:CA	1:A:7:SER:C	7	4.9
(1,99)	1:A:99:LEU:C	1:A:100:LEU:N	1:A:100:LEU:CA	1:A:100:LEU:C	15	4.8
(1,8)	1:A:10:LEU:N	1:A:10:LEU:CA	1:A:10:LEU:C	1:A:11:ARG:N	14	4.8
(1,64)	1:A:65:ARG:N	1:A:65:ARG:CA	1:A:65:ARG:C	1:A:66:MET:N	12	4.8
(1,63)	1:A:64:GLN:C	1:A:65:ARG:N	1:A:65:ARG:CA	1:A:65:ARG:C	10	4.8
(1,56)	1:A:59:ALA:N	1:A:59:ALA:CA	1:A:59:ALA:C	1:A:60:ILE:N	17	4.8
(1,42)	1:A:47:ALA:N	1:A:47:ALA:CA	1:A:47:ALA:C	1:A:48:LEU:N	4	4.8
(1,40)	1:A:46:ALA:N	1:A:46:ALA:CA	1:A:46:ALA:C	1:A:47:ALA:N	10	4.8
(1,34)	1:A:43:MET:N	1:A:43:MET:CA	1:A:43:MET:C	1:A:44:TYR:N	16	4.8
(1,32)	1:A:34:VAL:N	1:A:34:VAL:CA	1:A:34:VAL:C	1:A:35:TRP:N	6	4.8
(1,24)	1:A:18:VAL:N	1:A:18:VAL:CA	1:A:18:VAL:C	1:A:19:ASN:N	2	4.8
(1,16)	1:A:14:ILE:N	1:A:14:ILE:CA	1:A:14:ILE:C	1:A:15:GLU:N	11	4.8
(1,14)	1:A:13:LEU:N	1:A:13:LEU:CA	1:A:13:LEU:C	1:A:14:ILE:N	5	4.8
(1,105)	1:A:102:HIS:C	1:A:103:LEU:N	1:A:103:LEU:CA	1:A:103:LEU:C	11	4.8
(1,101)	1:A:100:LEU:C	1:A:101:LEU:N	1:A:101:LEU:CA	1:A:101:LEU:C	7	4.8
(1,101)	1:A:100:LEU:C	1:A:101:LEU:N	1:A:101:LEU:CA	1:A:101:LEU:C	10	4.8
(1,88)	1:A:94:GLN:N	1:A:94:GLN:CA	1:A:94:GLN:C	1:A:95:PHE:N	5	4.7
(1,83)	1:A:91:GLU:C	1:A:92:VAL:N	1:A:92:VAL:CA	1:A:92:VAL:C	9	4.7
(1,7)	1:A:9:ALA:C	1:A:10:LEU:N	1:A:10:LEU:CA	1:A:10:LEU:C	7	4.7
(1,67)	1:A:66:MET:C	1:A:67:LEU:N	1:A:67:LEU:CA	1:A:67:LEU:C	18	4.7
(1,64)	1:A:65:ARG:N	1:A:65:ARG:CA	1:A:65:ARG:C	1:A:66:MET:N	8	4.7
(1,53)	1:A:53:ASN:C	1:A:54:VAL:N	1:A:54:VAL:CA	1:A:54:VAL:C	4	4.7
(1,51)	1:A:51:LEU:C	1:A:52:ILE:N	1:A:52:ILE:CA	1:A:52:ILE:C	12	4.7
(1,4)	1:A:8:THR:N	1:A:8:THR:CA	1:A:8:THR:C	1:A:9:ALA:N	4	4.7
(1,34)	1:A:43:MET:N	1:A:43:MET:CA	1:A:43:MET:C	1:A:44:TYR:N	4	4.7
(1,28)	1:A:20:ILE:N	1:A:20:ILE:CA	1:A:20:ILE:C	1:A:21:THR:N	16	4.7
(1,119)	1:A:12:GLU:N	1:A:12:GLU:CA	1:A:12:GLU:CB	1:A:12:GLU:CG	12	4.7
(1,104)	1:A:102:HIS:N	1:A:102:HIS:CA	1:A:102:HIS:C	1:A:103:LEU:N	19	4.7

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,97)	1:A:98:ASP:C	1:A:99:LEU:N	1:A:99:LEU:CA	1:A:99:LEU:C	6	4.6
(1,83)	1:A:91:GLU:C	1:A:92:VAL:N	1:A:92:VAL:CA	1:A:92:VAL:C	13	4.6
(1,81)	1:A:90:ILE:C	1:A:91:GLU:N	1:A:91:GLU:CA	1:A:91:GLU:C	12	4.6
(1,8)	1:A:10:LEU:N	1:A:10:LEU:CA	1:A:10:LEU:C	1:A:11:ARG:N	4	4.6
(1,79)	1:A:89:LYS:C	1:A:90:ILE:N	1:A:90:ILE:CA	1:A:90:ILE:C	7	4.6
(1,64)	1:A:65:ARG:N	1:A:65:ARG:CA	1:A:65:ARG:C	1:A:66:MET:N	20	4.6
(1,6)	1:A:9:ALA:N	1:A:9:ALA:CA	1:A:9:ALA:C	1:A:10:LEU:N	20	4.6
(1,4)	1:A:8:THR:N	1:A:8:THR:CA	1:A:8:THR:C	1:A:9:ALA:N	14	4.6
(1,37)	1:A:44:TYR:C	1:A:45:CYS:N	1:A:45:CYS:CA	1:A:45:CYS:C	6	4.6
(1,34)	1:A:43:MET:N	1:A:43:MET:CA	1:A:43:MET:C	1:A:44:TYR:N	1	4.6
(1,22)	1:A:17:LEU:N	1:A:17:LEU:CA	1:A:17:LEU:C	1:A:18:VAL:N	5	4.6
(1,66)	1:A:66:MET:N	1:A:66:MET:CA	1:A:66:MET:C	1:A:67:LEU:N	11	4.5
(1,66)	1:A:66:MET:N	1:A:66:MET:CA	1:A:66:MET:C	1:A:67:LEU:N	20	4.5
(1,64)	1:A:65:ARG:N	1:A:65:ARG:CA	1:A:65:ARG:C	1:A:66:MET:N	7	4.5
(1,63)	1:A:64:GLN:C	1:A:65:ARG:N	1:A:65:ARG:CA	1:A:65:ARG:C	2	4.5
(1,47)	1:A:49:GLU:C	1:A:50:SER:N	1:A:50:SER:CA	1:A:50:SER:C	19	4.5
(1,38)	1:A:45:CYS:N	1:A:45:CYS:CA	1:A:45:CYS:C	1:A:46:ALA:N	11	4.5
(1,16)	1:A:14:ILE:N	1:A:14:ILE:CA	1:A:14:ILE:C	1:A:15:GLU:N	9	4.5
(1,108)	1:A:104:LYS:N	1:A:104:LYS:CA	1:A:104:LYS:C	1:A:105:LYS:N	12	4.5
(1,106)	1:A:103:LEU:N	1:A:103:LEU:CA	1:A:103:LEU:C	1:A:104:LYS:N	17	4.5
(1,99)	1:A:99:LEU:C	1:A:100:LEU:N	1:A:100:LEU:CA	1:A:100:LEU:C	3	4.4
(1,83)	1:A:91:GLU:C	1:A:92:VAL:N	1:A:92:VAL:CA	1:A:92:VAL:C	1	4.4
(1,79)	1:A:89:LYS:C	1:A:90:ILE:N	1:A:90:ILE:CA	1:A:90:ILE:C	10	4.4
(1,65)	1:A:65:ARG:C	1:A:66:MET:N	1:A:66:MET:CA	1:A:66:MET:C	4	4.4
(1,63)	1:A:64:GLN:C	1:A:65:ARG:N	1:A:65:ARG:CA	1:A:65:ARG:C	14	4.4
(1,56)	1:A:59:ALA:N	1:A:59:ALA:CA	1:A:59:ALA:C	1:A:60:ILE:N	1	4.4
(1,37)	1:A:44:TYR:C	1:A:45:CYS:N	1:A:45:CYS:CA	1:A:45:CYS:C	8	4.4
(1,28)	1:A:20:ILE:N	1:A:20:ILE:CA	1:A:20:ILE:C	1:A:21:THR:N	3	4.4
(1,25)	1:A:18:VAL:C	1:A:19:ASN:N	1:A:19:ASN:CA	1:A:19:ASN:C	16	4.4
(1,15)	1:A:13:LEU:C	1:A:14:ILE:N	1:A:14:ILE:CA	1:A:14:ILE:C	19	4.4
(1,14)	1:A:13:LEU:N	1:A:13:LEU:CA	1:A:13:LEU:C	1:A:14:ILE:N	17	4.4
(1,118)	1:A:109:GLU:N	1:A:109:GLU:CA	1:A:109:GLU:C	1:A:110:GLY:N	1	4.4
(1,118)	1:A:109:GLU:N	1:A:109:GLU:CA	1:A:109:GLU:C	1:A:110:GLY:N	17	4.4
(1,106)	1:A:103:LEU:N	1:A:103:LEU:CA	1:A:103:LEU:C	1:A:104:LYS:N	16	4.4
(1,96)	1:A:98:ASP:N	1:A:98:ASP:CA	1:A:98:ASP:C	1:A:99:LEU:N	11	4.3
(1,65)	1:A:65:ARG:C	1:A:66:MET:N	1:A:66:MET:CA	1:A:66:MET:C	8	4.3
(1,64)	1:A:65:ARG:N	1:A:65:ARG:CA	1:A:65:ARG:C	1:A:66:MET:N	11	4.3
(1,63)	1:A:64:GLN:C	1:A:65:ARG:N	1:A:65:ARG:CA	1:A:65:ARG:C	11	4.3
(1,6)	1:A:9:ALA:N	1:A:9:ALA:CA	1:A:9:ALA:C	1:A:10:LEU:N	10	4.3
(1,53)	1:A:53:ASN:C	1:A:54:VAL:N	1:A:54:VAL:CA	1:A:54:VAL:C	17	4.3
(1,4)	1:A:8:THR:N	1:A:8:THR:CA	1:A:8:THR:C	1:A:9:ALA:N	13	4.3
(1,24)	1:A:18:VAL:N	1:A:18:VAL:CA	1:A:18:VAL:C	1:A:19:ASN:N	16	4.3
(1,105)	1:A:102:HIS:C	1:A:103:LEU:N	1:A:103:LEU:CA	1:A:103:LEU:C	18	4.3
(1,99)	1:A:99:LEU:C	1:A:100:LEU:N	1:A:100:LEU:CA	1:A:100:LEU:C	5	4.2
(1,99)	1:A:99:LEU:C	1:A:100:LEU:N	1:A:100:LEU:CA	1:A:100:LEU:C	14	4.2
(1,57)	1:A:61:GLU:C	1:A:62:LYS:N	1:A:62:LYS:CA	1:A:62:LYS:C	3	4.2
(1,53)	1:A:53:ASN:C	1:A:54:VAL:N	1:A:54:VAL:CA	1:A:54:VAL:C	9	4.2
(1,42)	1:A:47:ALA:N	1:A:47:ALA:CA	1:A:47:ALA:C	1:A:48:LEU:N	2	4.2
(1,3)	1:A:7:SER:C	1:A:8:THR:N	1:A:8:THR:CA	1:A:8:THR:C	16	4.2
(1,24)	1:A:18:VAL:N	1:A:18:VAL:CA	1:A:18:VAL:C	1:A:19:ASN:N	1	4.2
(1,14)	1:A:13:LEU:N	1:A:13:LEU:CA	1:A:13:LEU:C	1:A:14:ILE:N	4	4.2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,118)	1:A:109:GLU:N	1:A:109:GLU:CA	1:A:109:GLU:C	1:A:110:GLY:N	4	4.2
(1,94)	1:A:97:LYS:N	1:A:97:LYS:CA	1:A:97:LYS:C	1:A:98:ASP:N	9	4.1
(1,75)	1:A:87:ASP:C	1:A:88:THR:N	1:A:88:THR:CA	1:A:88:THR:C	6	4.1
(1,75)	1:A:87:ASP:C	1:A:88:THR:N	1:A:88:THR:CA	1:A:88:THR:C	9	4.1
(1,75)	1:A:87:ASP:C	1:A:88:THR:N	1:A:88:THR:CA	1:A:88:THR:C	20	4.1
(1,7)	1:A:9:ALA:C	1:A:10:LEU:N	1:A:10:LEU:CA	1:A:10:LEU:C	4	4.1
(1,65)	1:A:65:ARG:C	1:A:66:MET:N	1:A:66:MET:CA	1:A:66:MET:C	7	4.1
(1,63)	1:A:64:GLN:C	1:A:65:ARG:N	1:A:65:ARG:CA	1:A:65:ARG:C	12	4.1
(1,62)	1:A:64:GLN:N	1:A:64:GLN:CA	1:A:64:GLN:C	1:A:65:ARG:N	8	4.1
(1,56)	1:A:59:ALA:N	1:A:59:ALA:CA	1:A:59:ALA:C	1:A:60:ILE:N	10	4.1
(1,55)	1:A:58:SER:C	1:A:59:ALA:N	1:A:59:ALA:CA	1:A:59:ALA:C	17	4.1
(1,54)	1:A:54:VAL:N	1:A:54:VAL:CA	1:A:54:VAL:C	1:A:55:SER:N	20	4.1
(1,50)	1:A:51:LEU:N	1:A:51:LEU:CA	1:A:51:LEU:C	1:A:52:ILE:N	15	4.1
(1,42)	1:A:47:ALA:N	1:A:47:ALA:CA	1:A:47:ALA:C	1:A:48:LEU:N	3	4.1
(1,4)	1:A:8:THR:N	1:A:8:THR:CA	1:A:8:THR:C	1:A:9:ALA:N	9	4.1
(1,36)	1:A:44:TYR:N	1:A:44:TYR:CA	1:A:44:TYR:C	1:A:45:CYS:N	10	4.1
(1,28)	1:A:20:ILE:N	1:A:20:ILE:CA	1:A:20:ILE:C	1:A:21:THR:N	7	4.1
(1,25)	1:A:18:VAL:C	1:A:19:ASN:N	1:A:19:ASN:CA	1:A:19:ASN:C	9	4.1
(1,13)	1:A:12:GLU:C	1:A:13:LEU:N	1:A:13:LEU:CA	1:A:13:LEU:C	19	4.1
(1,12)	1:A:12:GLU:N	1:A:12:GLU:CA	1:A:12:GLU:C	1:A:13:LEU:N	7	4.1
(1,12)	1:A:12:GLU:N	1:A:12:GLU:CA	1:A:12:GLU:C	1:A:13:LEU:N	11	4.1
(1,117)	1:A:108:ARG:C	1:A:109:GLU:N	1:A:109:GLU:CA	1:A:109:GLU:C	8	4.1
(1,100)	1:A:100:LEU:N	1:A:100:LEU:CA	1:A:100:LEU:C	1:A:101:LEU:N	10	4.1
(1,98)	1:A:99:LEU:N	1:A:99:LEU:CA	1:A:99:LEU:C	1:A:100:LEU:N	8	4.0
(1,9)	1:A:10:LEU:C	1:A:11:ARG:N	1:A:11:ARG:CA	1:A:11:ARG:C	6	4.0
(1,65)	1:A:65:ARG:C	1:A:66:MET:N	1:A:66:MET:CA	1:A:66:MET:C	11	4.0
(1,63)	1:A:64:GLN:C	1:A:65:ARG:N	1:A:65:ARG:CA	1:A:65:ARG:C	19	4.0
(1,58)	1:A:62:LYS:N	1:A:62:LYS:CA	1:A:62:LYS:C	1:A:63:THR:N	1	4.0
(1,47)	1:A:49:GLU:C	1:A:50:SER:N	1:A:50:SER:CA	1:A:50:SER:C	1	4.0
(1,47)	1:A:49:GLU:C	1:A:50:SER:N	1:A:50:SER:CA	1:A:50:SER:C	5	4.0
(1,47)	1:A:49:GLU:C	1:A:50:SER:N	1:A:50:SER:CA	1:A:50:SER:C	6	4.0
(1,38)	1:A:45:CYS:N	1:A:45:CYS:CA	1:A:45:CYS:C	1:A:46:ALA:N	14	4.0
(1,24)	1:A:18:VAL:N	1:A:18:VAL:CA	1:A:18:VAL:C	1:A:19:ASN:N	19	4.0
(1,12)	1:A:12:GLU:N	1:A:12:GLU:CA	1:A:12:GLU:C	1:A:13:LEU:N	9	4.0
(1,12)	1:A:12:GLU:N	1:A:12:GLU:CA	1:A:12:GLU:C	1:A:13:LEU:N	20	4.0
(1,117)	1:A:108:ARG:C	1:A:109:GLU:N	1:A:109:GLU:CA	1:A:109:GLU:C	10	4.0
(1,108)	1:A:104:LYS:N	1:A:104:LYS:CA	1:A:104:LYS:C	1:A:105:LYS:N	10	4.0
(1,101)	1:A:100:LEU:C	1:A:101:LEU:N	1:A:101:LEU:CA	1:A:101:LEU:C	6	4.0
(1,86)	1:A:93:ALA:N	1:A:93:ALA:CA	1:A:93:ALA:C	1:A:94:GLN:N	16	3.9
(1,7)	1:A:9:ALA:C	1:A:10:LEU:N	1:A:10:LEU:CA	1:A:10:LEU:C	1	3.9
(1,57)	1:A:61:GLU:C	1:A:62:LYS:N	1:A:62:LYS:CA	1:A:62:LYS:C	2	3.9
(1,38)	1:A:45:CYS:N	1:A:45:CYS:CA	1:A:45:CYS:C	1:A:46:ALA:N	1	3.9
(1,37)	1:A:44:TYR:C	1:A:45:CYS:N	1:A:45:CYS:CA	1:A:45:CYS:C	2	3.9
(1,29)	1:A:20:ILE:C	1:A:21:THR:N	1:A:21:THR:CA	1:A:21:THR:C	15	3.9
(1,20)	1:A:16:GLU:N	1:A:16:GLU:CA	1:A:16:GLU:C	1:A:17:LEU:N	11	3.9
(1,14)	1:A:13:LEU:N	1:A:13:LEU:CA	1:A:13:LEU:C	1:A:14:ILE:N	16	3.9
(1,119)	1:A:12:GLU:N	1:A:12:GLU:CA	1:A:12:GLU:CB	1:A:12:GLU:CG	16	3.9
(1,105)	1:A:102:HIS:C	1:A:103:LEU:N	1:A:103:LEU:CA	1:A:103:LEU:C	9	3.9
(1,101)	1:A:100:LEU:C	1:A:101:LEU:N	1:A:101:LEU:CA	1:A:101:LEU:C	14	3.9
(1,93)	1:A:96:VAL:C	1:A:97:LYS:N	1:A:97:LYS:CA	1:A:97:LYS:C	5	3.8
(1,93)	1:A:96:VAL:C	1:A:97:LYS:N	1:A:97:LYS:CA	1:A:97:LYS:C	11	3.8

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,91)	1:A:95:PHE:C	1:A:96:VAL:N	1:A:96:VAL:CA	1:A:96:VAL:C	8	3.8
(1,83)	1:A:91:GLU:C	1:A:92:VAL:N	1:A:92:VAL:CA	1:A:92:VAL:C	12	3.8
(1,64)	1:A:65:ARG:N	1:A:65:ARG:CA	1:A:65:ARG:C	1:A:66:MET:N	18	3.8
(1,63)	1:A:64:GLN:C	1:A:65:ARG:N	1:A:65:ARG:CA	1:A:65:ARG:C	18	3.8
(1,40)	1:A:46:ALA:N	1:A:46:ALA:CA	1:A:46:ALA:C	1:A:47:ALA:N	7	3.8
(1,37)	1:A:44:TYR:C	1:A:45:CYS:N	1:A:45:CYS:CA	1:A:45:CYS:C	13	3.8
(1,31)	1:A:33:MET:C	1:A:34:VAL:N	1:A:34:VAL:CA	1:A:34:VAL:C	4	3.8
(1,25)	1:A:18:VAL:C	1:A:19:ASN:N	1:A:19:ASN:CA	1:A:19:ASN:C	14	3.8
(1,16)	1:A:14:ILE:N	1:A:14:ILE:CA	1:A:14:ILE:C	1:A:15:GLU:N	7	3.8
(1,109)	1:A:104:LYS:C	1:A:105:LYS:N	1:A:105:LYS:CA	1:A:105:LYS:C	12	3.8
(1,109)	1:A:104:LYS:C	1:A:105:LYS:N	1:A:105:LYS:CA	1:A:105:LYS:C	13	3.8
(1,101)	1:A:100:LEU:C	1:A:101:LEU:N	1:A:101:LEU:CA	1:A:101:LEU:C	2	3.8
(1,101)	1:A:100:LEU:C	1:A:101:LEU:N	1:A:101:LEU:CA	1:A:101:LEU:C	9	3.8
(1,93)	1:A:96:VAL:C	1:A:97:LYS:N	1:A:97:LYS:CA	1:A:97:LYS:C	7	3.7
(1,93)	1:A:96:VAL:C	1:A:97:LYS:N	1:A:97:LYS:CA	1:A:97:LYS:C	18	3.7
(1,9)	1:A:10:LEU:C	1:A:11:ARG:N	1:A:11:ARG:CA	1:A:11:ARG:C	2	3.7
(1,8)	1:A:10:LEU:N	1:A:10:LEU:CA	1:A:10:LEU:C	1:A:11:ARG:N	3	3.7
(1,65)	1:A:65:ARG:C	1:A:66:MET:N	1:A:66:MET:CA	1:A:66:MET:C	2	3.7
(1,6)	1:A:9:ALA:N	1:A:9:ALA:CA	1:A:9:ALA:C	1:A:10:LEU:N	11	3.7
(1,58)	1:A:62:LYS:N	1:A:62:LYS:CA	1:A:62:LYS:C	1:A:63:THR:N	14	3.7
(1,49)	1:A:50:SER:C	1:A:51:LEU:N	1:A:51:LEU:CA	1:A:51:LEU:C	11	3.7
(1,4)	1:A:8:THR:N	1:A:8:THR:CA	1:A:8:THR:C	1:A:9:ALA:N	15	3.7
(1,37)	1:A:44:TYR:C	1:A:45:CYS:N	1:A:45:CYS:CA	1:A:45:CYS:C	4	3.7
(1,37)	1:A:44:TYR:C	1:A:45:CYS:N	1:A:45:CYS:CA	1:A:45:CYS:C	14	3.7
(1,36)	1:A:44:TYR:N	1:A:44:TYR:CA	1:A:44:TYR:C	1:A:45:CYS:N	12	3.7
(1,25)	1:A:18:VAL:C	1:A:19:ASN:N	1:A:19:ASN:CA	1:A:19:ASN:C	2	3.7
(1,13)	1:A:12:GLU:C	1:A:13:LEU:N	1:A:13:LEU:CA	1:A:13:LEU:C	18	3.7
(1,12)	1:A:12:GLU:N	1:A:12:GLU:CA	1:A:12:GLU:C	1:A:13:LEU:N	3	3.7
(1,106)	1:A:103:LEU:N	1:A:103:LEU:CA	1:A:103:LEU:C	1:A:104:LYS:N	3	3.7
(1,84)	1:A:92:VAL:N	1:A:92:VAL:CA	1:A:92:VAL:C	1:A:93:ALA:N	15	3.6
(1,63)	1:A:64:GLN:C	1:A:65:ARG:N	1:A:65:ARG:CA	1:A:65:ARG:C	15	3.6
(1,40)	1:A:46:ALA:N	1:A:46:ALA:CA	1:A:46:ALA:C	1:A:47:ALA:N	3	3.6
(1,40)	1:A:46:ALA:N	1:A:46:ALA:CA	1:A:46:ALA:C	1:A:47:ALA:N	15	3.6
(1,35)	1:A:43:MET:C	1:A:44:TYR:N	1:A:44:TYR:CA	1:A:44:TYR:C	5	3.6
(1,29)	1:A:20:ILE:C	1:A:21:THR:N	1:A:21:THR:CA	1:A:21:THR:C	16	3.6
(1,25)	1:A:18:VAL:C	1:A:19:ASN:N	1:A:19:ASN:CA	1:A:19:ASN:C	8	3.6
(1,18)	1:A:15:GLU:N	1:A:15:GLU:CA	1:A:15:GLU:C	1:A:16:GLU:N	5	3.6
(1,119)	1:A:12:GLU:N	1:A:12:GLU:CA	1:A:12:GLU:CB	1:A:12:GLU:CG	2	3.6
(1,99)	1:A:99:LEU:C	1:A:100:LEU:N	1:A:100:LEU:CA	1:A:100:LEU:C	13	3.5
(1,80)	1:A:90:ILE:N	1:A:90:ILE:CA	1:A:90:ILE:C	1:A:91:GLU:N	18	3.5
(1,6)	1:A:9:ALA:N	1:A:9:ALA:CA	1:A:9:ALA:C	1:A:10:LEU:N	12	3.5
(1,50)	1:A:51:LEU:N	1:A:51:LEU:CA	1:A:51:LEU:C	1:A:52:ILE:N	2	3.5
(1,5)	1:A:8:THR:C	1:A:9:ALA:N	1:A:9:ALA:CA	1:A:9:ALA:C	19	3.5
(1,49)	1:A:50:SER:C	1:A:51:LEU:N	1:A:51:LEU:CA	1:A:51:LEU:C	6	3.5
(1,42)	1:A:47:ALA:N	1:A:47:ALA:CA	1:A:47:ALA:C	1:A:48:LEU:N	18	3.5
(1,24)	1:A:18:VAL:N	1:A:18:VAL:CA	1:A:18:VAL:C	1:A:19:ASN:N	12	3.5
(1,19)	1:A:15:GLU:C	1:A:16:GLU:N	1:A:16:GLU:CA	1:A:16:GLU:C	5	3.5
(1,17)	1:A:14:ILE:C	1:A:15:GLU:N	1:A:15:GLU:CA	1:A:15:GLU:C	19	3.5
(1,142)	1:A:99:LEU:N	1:A:99:LEU:CA	1:A:99:LEU:CB	1:A:99:LEU:CG	13	3.5
(1,13)	1:A:12:GLU:C	1:A:13:LEU:N	1:A:13:LEU:CA	1:A:13:LEU:C	9	3.5
(1,13)	1:A:12:GLU:C	1:A:13:LEU:N	1:A:13:LEU:CA	1:A:13:LEU:C	11	3.5

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,84)	1:A:92:VAL:N	1:A:92:VAL:CA	1:A:92:VAL:C	1:A:93:ALA:N	4	3.4
(1,79)	1:A:89:LYS:C	1:A:90:ILE:N	1:A:90:ILE:CA	1:A:90:ILE:C	14	3.4
(1,78)	1:A:89:LYS:N	1:A:89:LYS:CA	1:A:89:LYS:C	1:A:90:ILE:N	5	3.4
(1,67)	1:A:66:MET:C	1:A:67:LEU:N	1:A:67:LEU:CA	1:A:67:LEU:C	7	3.4
(1,63)	1:A:64:GLN:C	1:A:65:ARG:N	1:A:65:ARG:CA	1:A:65:ARG:C	1	3.4
(1,42)	1:A:47:ALA:N	1:A:47:ALA:CA	1:A:47:ALA:C	1:A:48:LEU:N	13	3.4
(1,12)	1:A:12:GLU:N	1:A:12:GLU:CA	1:A:12:GLU:C	1:A:13:LEU:N	1	3.4
(1,118)	1:A:109:GLU:N	1:A:109:GLU:CA	1:A:109:GLU:C	1:A:110:GLY:N	18	3.4
(1,106)	1:A:103:LEU:N	1:A:103:LEU:CA	1:A:103:LEU:C	1:A:104:LYS:N	13	3.4
(1,105)	1:A:102:HIS:C	1:A:103:LEU:N	1:A:103:LEU:CA	1:A:103:LEU:C	7	3.4
(1,93)	1:A:96:VAL:C	1:A:97:LYS:N	1:A:97:LYS:CA	1:A:97:LYS:C	8	3.3
(1,67)	1:A:66:MET:C	1:A:67:LEU:N	1:A:67:LEU:CA	1:A:67:LEU:C	14	3.3
(1,63)	1:A:64:GLN:C	1:A:65:ARG:N	1:A:65:ARG:CA	1:A:65:ARG:C	20	3.3
(1,61)	1:A:63:THR:C	1:A:64:GLN:N	1:A:64:GLN:CA	1:A:64:GLN:C	8	3.3
(1,60)	1:A:63:THR:N	1:A:63:THR:CA	1:A:63:THR:C	1:A:64:GLN:N	20	3.3
(1,49)	1:A:50:SER:C	1:A:51:LEU:N	1:A:51:LEU:CA	1:A:51:LEU:C	13	3.3
(1,47)	1:A:49:GLU:C	1:A:50:SER:N	1:A:50:SER:CA	1:A:50:SER:C	8	3.3
(1,42)	1:A:47:ALA:N	1:A:47:ALA:CA	1:A:47:ALA:C	1:A:48:LEU:N	10	3.3
(1,23)	1:A:17:LEU:C	1:A:18:VAL:N	1:A:18:VAL:CA	1:A:18:VAL:C	13	3.3
(1,2)	1:A:7:SER:N	1:A:7:SER:CA	1:A:7:SER:C	1:A:8:THR:N	8	3.3
(1,15)	1:A:13:LEU:C	1:A:14:ILE:N	1:A:14:ILE:CA	1:A:14:ILE:C	8	3.3
(1,14)	1:A:13:LEU:N	1:A:13:LEU:CA	1:A:13:LEU:C	1:A:14:ILE:N	1	3.3
(1,7)	1:A:9:ALA:C	1:A:10:LEU:N	1:A:10:LEU:CA	1:A:10:LEU:C	18	3.2
(1,67)	1:A:66:MET:C	1:A:67:LEU:N	1:A:67:LEU:CA	1:A:67:LEU:C	10	3.2
(1,67)	1:A:66:MET:C	1:A:67:LEU:N	1:A:67:LEU:CA	1:A:67:LEU:C	13	3.2
(1,66)	1:A:66:MET:N	1:A:66:MET:CA	1:A:66:MET:C	1:A:67:LEU:N	14	3.2
(1,63)	1:A:64:GLN:C	1:A:65:ARG:N	1:A:65:ARG:CA	1:A:65:ARG:C	5	3.2
(1,38)	1:A:45:CYS:N	1:A:45:CYS:CA	1:A:45:CYS:C	1:A:46:ALA:N	2	3.2
(1,32)	1:A:34:VAL:N	1:A:34:VAL:CA	1:A:34:VAL:C	1:A:35:TRP:N	9	3.2
(1,26)	1:A:19:ASN:N	1:A:19:ASN:CA	1:A:19:ASN:C	1:A:20:ILE:N	14	3.2
(1,14)	1:A:13:LEU:N	1:A:13:LEU:CA	1:A:13:LEU:C	1:A:14:ILE:N	3	3.2
(1,118)	1:A:109:GLU:N	1:A:109:GLU:CA	1:A:109:GLU:C	1:A:110:GLY:N	6	3.2
(1,99)	1:A:99:LEU:C	1:A:100:LEU:N	1:A:100:LEU:CA	1:A:100:LEU:C	2	3.1
(1,9)	1:A:10:LEU:C	1:A:11:ARG:N	1:A:11:ARG:CA	1:A:11:ARG:C	4	3.1
(1,9)	1:A:10:LEU:C	1:A:11:ARG:N	1:A:11:ARG:CA	1:A:11:ARG:C	8	3.1
(1,81)	1:A:90:ILE:C	1:A:91:GLU:N	1:A:91:GLU:CA	1:A:91:GLU:C	8	3.1
(1,69)	1:A:67:LEU:C	1:A:68:SER:N	1:A:68:SER:CA	1:A:68:SER:C	9	3.1
(1,6)	1:A:9:ALA:N	1:A:9:ALA:CA	1:A:9:ALA:C	1:A:10:LEU:N	7	3.1
(1,33)	1:A:42:GLY:C	1:A:43:MET:N	1:A:43:MET:CA	1:A:43:MET:C	12	3.1
(1,26)	1:A:19:ASN:N	1:A:19:ASN:CA	1:A:19:ASN:C	1:A:20:ILE:N	2	3.1
(1,23)	1:A:17:LEU:C	1:A:18:VAL:N	1:A:18:VAL:CA	1:A:18:VAL:C	1	3.1
(1,23)	1:A:17:LEU:C	1:A:18:VAL:N	1:A:18:VAL:CA	1:A:18:VAL:C	7	3.1
(1,19)	1:A:15:GLU:C	1:A:16:GLU:N	1:A:16:GLU:CA	1:A:16:GLU:C	17	3.1
(1,18)	1:A:15:GLU:N	1:A:15:GLU:CA	1:A:15:GLU:C	1:A:16:GLU:N	10	3.1
(1,105)	1:A:102:HIS:C	1:A:103:LEU:N	1:A:103:LEU:CA	1:A:103:LEU:C	6	3.1
(1,105)	1:A:102:HIS:C	1:A:103:LEU:N	1:A:103:LEU:CA	1:A:103:LEU:C	17	3.1
(1,76)	1:A:88:THR:N	1:A:88:THR:CA	1:A:88:THR:C	1:A:89:LYS:N	5	3.0
(1,62)	1:A:64:GLN:N	1:A:64:GLN:CA	1:A:64:GLN:C	1:A:65:ARG:N	7	3.0
(1,6)	1:A:9:ALA:N	1:A:9:ALA:CA	1:A:9:ALA:C	1:A:10:LEU:N	3	3.0
(1,6)	1:A:9:ALA:N	1:A:9:ALA:CA	1:A:9:ALA:C	1:A:10:LEU:N	18	3.0
(1,47)	1:A:49:GLU:C	1:A:50:SER:N	1:A:50:SER:CA	1:A:50:SER:C	10	3.0

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,46)	1:A:49:GLU:N	1:A:49:GLU:CA	1:A:49:GLU:C	1:A:50:SER:N	10	3.0
(1,37)	1:A:44:TYR:C	1:A:45:CYS:N	1:A:45:CYS:CA	1:A:45:CYS:C	16	3.0
(1,28)	1:A:20:ILE:N	1:A:20:ILE:CA	1:A:20:ILE:C	1:A:21:THR:N	8	3.0
(1,26)	1:A:19:ASN:N	1:A:19:ASN:CA	1:A:19:ASN:C	1:A:20:ILE:N	9	3.0
(1,13)	1:A:12:GLU:C	1:A:13:LEU:N	1:A:13:LEU:CA	1:A:13:LEU:C	20	3.0
(1,116)	1:A:108:ARG:N	1:A:108:ARG:CA	1:A:108:ARG:C	1:A:109:GLU:N	1	3.0
(1,106)	1:A:103:LEU:N	1:A:103:LEU:CA	1:A:103:LEU:C	1:A:104:LYS:N	10	3.0
(1,96)	1:A:98:ASP:N	1:A:98:ASP:CA	1:A:98:ASP:C	1:A:99:LEU:N	17	2.9
(1,90)	1:A:95:PHE:N	1:A:95:PHE:CA	1:A:95:PHE:C	1:A:96:VAL:N	9	2.9
(1,9)	1:A:10:LEU:C	1:A:11:ARG:N	1:A:11:ARG:CA	1:A:11:ARG:C	16	2.9
(1,69)	1:A:67:LEU:C	1:A:68:SER:N	1:A:68:SER:CA	1:A:68:SER:C	19	2.9
(1,57)	1:A:61:GLU:C	1:A:62:LYS:N	1:A:62:LYS:CA	1:A:62:LYS:C	5	2.9
(1,54)	1:A:54:VAL:N	1:A:54:VAL:CA	1:A:54:VAL:C	1:A:55:SER:N	4	2.9
(1,37)	1:A:44:TYR:C	1:A:45:CYS:N	1:A:45:CYS:CA	1:A:45:CYS:C	10	2.9
(1,37)	1:A:44:TYR:C	1:A:45:CYS:N	1:A:45:CYS:CA	1:A:45:CYS:C	19	2.9
(1,29)	1:A:20:ILE:C	1:A:21:THR:N	1:A:21:THR:CA	1:A:21:THR:C	4	2.9
(1,26)	1:A:19:ASN:N	1:A:19:ASN:CA	1:A:19:ASN:C	1:A:20:ILE:N	18	2.9
(1,23)	1:A:17:LEU:C	1:A:18:VAL:N	1:A:18:VAL:CA	1:A:18:VAL:C	16	2.9
(1,136)	1:A:24:GLN:N	1:A:24:GLN:CA	1:A:24:GLN:CB	1:A:24:GLN:CG	1	2.9
(1,124)	1:A:64:GLN:N	1:A:64:GLN:CA	1:A:64:GLN:CB	1:A:64:GLN:CG	14	2.9
(1,118)	1:A:109:GLU:N	1:A:109:GLU:CA	1:A:109:GLU:C	1:A:110:GLY:N	15	2.9
(1,115)	1:A:107:PHE:C	1:A:108:ARG:N	1:A:108:ARG:CA	1:A:108:ARG:C	8	2.9
(1,9)	1:A:10:LEU:C	1:A:11:ARG:N	1:A:11:ARG:CA	1:A:11:ARG:C	3	2.8
(1,9)	1:A:10:LEU:C	1:A:11:ARG:N	1:A:11:ARG:CA	1:A:11:ARG:C	18	2.8
(1,84)	1:A:92:VAL:N	1:A:92:VAL:CA	1:A:92:VAL:C	1:A:93:ALA:N	8	2.8
(1,75)	1:A:87:ASP:C	1:A:88:THR:N	1:A:88:THR:CA	1:A:88:THR:C	2	2.8
(1,65)	1:A:65:ARG:C	1:A:66:MET:N	1:A:66:MET:CA	1:A:66:MET:C	1	2.8
(1,4)	1:A:8:THR:N	1:A:8:THR:CA	1:A:8:THR:C	1:A:9:ALA:N	1	2.8
(1,4)	1:A:8:THR:N	1:A:8:THR:CA	1:A:8:THR:C	1:A:9:ALA:N	11	2.8
(1,31)	1:A:33:MET:C	1:A:34:VAL:N	1:A:34:VAL:CA	1:A:34:VAL:C	10	2.8
(1,30)	1:A:21:THR:N	1:A:21:THR:CA	1:A:21:THR:C	1:A:22:GLN:N	17	2.8
(1,29)	1:A:20:ILE:C	1:A:21:THR:N	1:A:21:THR:CA	1:A:21:THR:C	12	2.8
(1,28)	1:A:20:ILE:N	1:A:20:ILE:CA	1:A:20:ILE:C	1:A:21:THR:N	19	2.8
(1,26)	1:A:19:ASN:N	1:A:19:ASN:CA	1:A:19:ASN:C	1:A:20:ILE:N	11	2.8
(1,25)	1:A:18:VAL:C	1:A:19:ASN:N	1:A:19:ASN:CA	1:A:19:ASN:C	12	2.8
(1,25)	1:A:18:VAL:C	1:A:19:ASN:N	1:A:19:ASN:CA	1:A:19:ASN:C	13	2.8
(1,23)	1:A:17:LEU:C	1:A:18:VAL:N	1:A:18:VAL:CA	1:A:18:VAL:C	8	2.8
(1,2)	1:A:7:SER:N	1:A:7:SER:CA	1:A:7:SER:C	1:A:8:THR:N	6	2.8
(1,142)	1:A:99:LEU:N	1:A:99:LEU:CA	1:A:99:LEU:CB	1:A:99:LEU:CG	5	2.8
(1,142)	1:A:99:LEU:N	1:A:99:LEU:CA	1:A:99:LEU:CB	1:A:99:LEU:CG	12	2.8
(1,136)	1:A:24:GLN:N	1:A:24:GLN:CA	1:A:24:GLN:CB	1:A:24:GLN:CG	10	2.8
(1,116)	1:A:108:ARG:N	1:A:108:ARG:CA	1:A:108:ARG:C	1:A:109:GLU:N	11	2.8
(1,109)	1:A:104:LYS:C	1:A:105:LYS:N	1:A:105:LYS:CA	1:A:105:LYS:C	9	2.8
(1,94)	1:A:97:LYS:N	1:A:97:LYS:CA	1:A:97:LYS:C	1:A:98:ASP:N	18	2.7
(1,91)	1:A:95:PHE:C	1:A:96:VAL:N	1:A:96:VAL:CA	1:A:96:VAL:C	12	2.7
(1,78)	1:A:89:LYS:N	1:A:89:LYS:CA	1:A:89:LYS:C	1:A:90:ILE:N	19	2.7
(1,7)	1:A:9:ALA:C	1:A:10:LEU:N	1:A:10:LEU:CA	1:A:10:LEU:C	9	2.7
(1,6)	1:A:9:ALA:N	1:A:9:ALA:CA	1:A:9:ALA:C	1:A:10:LEU:N	5	2.7
(1,57)	1:A:61:GLU:C	1:A:62:LYS:N	1:A:62:LYS:CA	1:A:62:LYS:C	15	2.7
(1,56)	1:A:59:ALA:N	1:A:59:ALA:CA	1:A:59:ALA:C	1:A:60:ILE:N	16	2.7
(1,5)	1:A:8:THR:C	1:A:9:ALA:N	1:A:9:ALA:CA	1:A:9:ALA:C	8	2.7

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,47)	1:A:49:GLU:C	1:A:50:SER:N	1:A:50:SER:CA	1:A:50:SER:C	4	2.7
(1,42)	1:A:47:ALA:N	1:A:47:ALA:CA	1:A:47:ALA:C	1:A:48:LEU:N	6	2.7
(1,38)	1:A:45:CYS:N	1:A:45:CYS:CA	1:A:45:CYS:C	1:A:46:ALA:N	10	2.7
(1,36)	1:A:44:TYR:N	1:A:44:TYR:CA	1:A:44:TYR:C	1:A:45:CYS:N	20	2.7
(1,34)	1:A:43:MET:N	1:A:43:MET:CA	1:A:43:MET:C	1:A:44:TYR:N	8	2.7
(1,26)	1:A:19:ASN:N	1:A:19:ASN:CA	1:A:19:ASN:C	1:A:20:ILE:N	20	2.7
(1,13)	1:A:12:GLU:C	1:A:13:LEU:N	1:A:13:LEU:CA	1:A:13:LEU:C	14	2.7
(1,106)	1:A:103:LEU:N	1:A:103:LEU:CA	1:A:103:LEU:C	1:A:104:LYS:N	4	2.7
(1,101)	1:A:100:LEU:C	1:A:101:LEU:N	1:A:101:LEU:CA	1:A:101:LEU:C	5	2.7
(1,101)	1:A:100:LEU:C	1:A:101:LEU:N	1:A:101:LEU:CA	1:A:101:LEU:C	13	2.7
(1,99)	1:A:99:LEU:C	1:A:100:LEU:N	1:A:100:LEU:CA	1:A:100:LEU:C	4	2.6
(1,9)	1:A:10:LEU:C	1:A:11:ARG:N	1:A:11:ARG:CA	1:A:11:ARG:C	19	2.6
(1,8)	1:A:10:LEU:N	1:A:10:LEU:CA	1:A:10:LEU:C	1:A:11:ARG:N	19	2.6
(1,79)	1:A:89:LYS:C	1:A:90:ILE:N	1:A:90:ILE:CA	1:A:90:ILE:C	18	2.6
(1,64)	1:A:65:ARG:N	1:A:65:ARG:CA	1:A:65:ARG:C	1:A:66:MET:N	1	2.6
(1,64)	1:A:65:ARG:N	1:A:65:ARG:CA	1:A:65:ARG:C	1:A:66:MET:N	14	2.6
(1,62)	1:A:64:GLN:N	1:A:64:GLN:CA	1:A:64:GLN:C	1:A:65:ARG:N	13	2.6
(1,51)	1:A:51:LEU:C	1:A:52:ILE:N	1:A:52:ILE:CA	1:A:52:ILE:C	10	2.6
(1,47)	1:A:49:GLU:C	1:A:50:SER:N	1:A:50:SER:CA	1:A:50:SER:C	15	2.6
(1,42)	1:A:47:ALA:N	1:A:47:ALA:CA	1:A:47:ALA:C	1:A:48:LEU:N	1	2.6
(1,40)	1:A:46:ALA:N	1:A:46:ALA:CA	1:A:46:ALA:C	1:A:47:ALA:N	6	2.6
(1,4)	1:A:8:THR:N	1:A:8:THR:CA	1:A:8:THR:C	1:A:9:ALA:N	18	2.6
(1,29)	1:A:20:ILE:C	1:A:21:THR:N	1:A:21:THR:CA	1:A:21:THR:C	2	2.6
(1,19)	1:A:15:GLU:C	1:A:16:GLU:N	1:A:16:GLU:CA	1:A:16:GLU:C	19	2.6
(1,16)	1:A:14:ILE:N	1:A:14:ILE:CA	1:A:14:ILE:C	1:A:15:GLU:N	1	2.6
(1,16)	1:A:14:ILE:N	1:A:14:ILE:CA	1:A:14:ILE:C	1:A:15:GLU:N	13	2.6
(1,13)	1:A:12:GLU:C	1:A:13:LEU:N	1:A:13:LEU:CA	1:A:13:LEU:C	15	2.6
(1,12)	1:A:12:GLU:N	1:A:12:GLU:CA	1:A:12:GLU:C	1:A:13:LEU:N	4	2.6
(1,119)	1:A:12:GLU:N	1:A:12:GLU:CA	1:A:12:GLU:CB	1:A:12:GLU:CG	11	2.6
(1,77)	1:A:88:THR:C	1:A:89:LYS:N	1:A:89:LYS:CA	1:A:89:LYS:C	5	2.5
(1,54)	1:A:54:VAL:N	1:A:54:VAL:CA	1:A:54:VAL:C	1:A:55:SER:N	15	2.5
(1,4)	1:A:8:THR:N	1:A:8:THR:CA	1:A:8:THR:C	1:A:9:ALA:N	7	2.5
(1,16)	1:A:14:ILE:N	1:A:14:ILE:CA	1:A:14:ILE:C	1:A:15:GLU:N	5	2.5
(1,116)	1:A:108:ARG:N	1:A:108:ARG:CA	1:A:108:ARG:C	1:A:109:GLU:N	18	2.5
(1,99)	1:A:99:LEU:C	1:A:100:LEU:N	1:A:100:LEU:CA	1:A:100:LEU:C	1	2.4
(1,99)	1:A:99:LEU:C	1:A:100:LEU:N	1:A:100:LEU:CA	1:A:100:LEU:C	10	2.4
(1,93)	1:A:96:VAL:C	1:A:97:LYS:N	1:A:97:LYS:CA	1:A:97:LYS:C	3	2.4
(1,7)	1:A:9:ALA:C	1:A:10:LEU:N	1:A:10:LEU:CA	1:A:10:LEU:C	13	2.4
(1,66)	1:A:66:MET:N	1:A:66:MET:CA	1:A:66:MET:C	1:A:67:LEU:N	4	2.4
(1,66)	1:A:66:MET:N	1:A:66:MET:CA	1:A:66:MET:C	1:A:67:LEU:N	13	2.4
(1,57)	1:A:61:GLU:C	1:A:62:LYS:N	1:A:62:LYS:CA	1:A:62:LYS:C	16	2.4
(1,50)	1:A:51:LEU:N	1:A:51:LEU:CA	1:A:51:LEU:C	1:A:52:ILE:N	16	2.4
(1,47)	1:A:49:GLU:C	1:A:50:SER:N	1:A:50:SER:CA	1:A:50:SER:C	18	2.4
(1,33)	1:A:42:GLY:C	1:A:43:MET:N	1:A:43:MET:CA	1:A:43:MET:C	20	2.4
(1,32)	1:A:34:VAL:N	1:A:34:VAL:CA	1:A:34:VAL:C	1:A:35:TRP:N	12	2.4
(1,28)	1:A:20:ILE:N	1:A:20:ILE:CA	1:A:20:ILE:C	1:A:21:THR:N	20	2.4
(1,19)	1:A:15:GLU:C	1:A:16:GLU:N	1:A:16:GLU:CA	1:A:16:GLU:C	7	2.4
(1,16)	1:A:14:ILE:N	1:A:14:ILE:CA	1:A:14:ILE:C	1:A:15:GLU:N	4	2.4
(1,12)	1:A:12:GLU:N	1:A:12:GLU:CA	1:A:12:GLU:C	1:A:13:LEU:N	15	2.4
(1,116)	1:A:108:ARG:N	1:A:108:ARG:CA	1:A:108:ARG:C	1:A:109:GLU:N	5	2.4
(1,106)	1:A:103:LEU:N	1:A:103:LEU:CA	1:A:103:LEU:C	1:A:104:LYS:N	1	2.4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,9)	1:A:10:LEU:C	1:A:11:ARG:N	1:A:11:ARG:CA	1:A:11:ARG:C	15	2.3
(1,66)	1:A:66:MET:N	1:A:66:MET:CA	1:A:66:MET:C	1:A:67:LEU:N	19	2.3
(1,64)	1:A:65:ARG:N	1:A:65:ARG:CA	1:A:65:ARG:C	1:A:66:MET:N	15	2.3
(1,63)	1:A:64:GLN:C	1:A:65:ARG:N	1:A:65:ARG:CA	1:A:65:ARG:C	8	2.3
(1,6)	1:A:9:ALA:N	1:A:9:ALA:CA	1:A:9:ALA:C	1:A:10:LEU:N	4	2.3
(1,57)	1:A:61:GLU:C	1:A:62:LYS:N	1:A:62:LYS:CA	1:A:62:LYS:C	7	2.3
(1,57)	1:A:61:GLU:C	1:A:62:LYS:N	1:A:62:LYS:CA	1:A:62:LYS:C	18	2.3
(1,53)	1:A:53:ASN:C	1:A:54:VAL:N	1:A:54:VAL:CA	1:A:54:VAL:C	20	2.3
(1,26)	1:A:19:ASN:N	1:A:19:ASN:CA	1:A:19:ASN:C	1:A:20:ILE:N	13	2.3
(1,20)	1:A:16:GLU:N	1:A:16:GLU:CA	1:A:16:GLU:C	1:A:17:LEU:N	15	2.3
(1,12)	1:A:12:GLU:N	1:A:12:GLU:CA	1:A:12:GLU:C	1:A:13:LEU:N	14	2.3
(1,107)	1:A:103:LEU:C	1:A:104:LYS:N	1:A:104:LYS:CA	1:A:104:LYS:C	2	2.3
(1,106)	1:A:103:LEU:N	1:A:103:LEU:CA	1:A:103:LEU:C	1:A:104:LYS:N	7	2.3
(1,99)	1:A:99:LEU:C	1:A:100:LEU:N	1:A:100:LEU:CA	1:A:100:LEU:C	17	2.2
(1,8)	1:A:10:LEU:N	1:A:10:LEU:CA	1:A:10:LEU:C	1:A:11:ARG:N	7	2.2
(1,69)	1:A:67:LEU:C	1:A:68:SER:N	1:A:68:SER:CA	1:A:68:SER:C	3	2.2
(1,66)	1:A:66:MET:N	1:A:66:MET:CA	1:A:66:MET:C	1:A:67:LEU:N	6	2.2
(1,55)	1:A:58:SER:C	1:A:59:ALA:N	1:A:59:ALA:CA	1:A:59:ALA:C	2	2.2
(1,50)	1:A:51:LEU:N	1:A:51:LEU:CA	1:A:51:LEU:C	1:A:52:ILE:N	7	2.2
(1,49)	1:A:50:SER:C	1:A:51:LEU:N	1:A:51:LEU:CA	1:A:51:LEU:C	10	2.2
(1,38)	1:A:45:CYS:N	1:A:45:CYS:CA	1:A:45:CYS:C	1:A:46:ALA:N	3	2.2
(1,35)	1:A:43:MET:C	1:A:44:TYR:N	1:A:44:TYR:CA	1:A:44:TYR:C	13	2.2
(1,3)	1:A:7:SER:C	1:A:8:THR:N	1:A:8:THR:CA	1:A:8:THR:C	8	2.2
(1,26)	1:A:19:ASN:N	1:A:19:ASN:CA	1:A:19:ASN:C	1:A:20:ILE:N	10	2.2
(1,25)	1:A:18:VAL:C	1:A:19:ASN:N	1:A:19:ASN:CA	1:A:19:ASN:C	1	2.2
(1,14)	1:A:13:LEU:N	1:A:13:LEU:CA	1:A:13:LEU:C	1:A:14:ILE:N	14	2.2
(1,111)	1:A:105:LYS:C	1:A:106:LEU:N	1:A:106:LEU:CA	1:A:106:LEU:C	19	2.2
(1,106)	1:A:103:LEU:N	1:A:103:LEU:CA	1:A:103:LEU:C	1:A:104:LYS:N	14	2.2
(1,101)	1:A:100:LEU:C	1:A:101:LEU:N	1:A:101:LEU:CA	1:A:101:LEU:C	16	2.2
(1,99)	1:A:99:LEU:C	1:A:100:LEU:N	1:A:100:LEU:CA	1:A:100:LEU:C	18	2.1
(1,93)	1:A:96:VAL:C	1:A:97:LYS:N	1:A:97:LYS:CA	1:A:97:LYS:C	1	2.1
(1,90)	1:A:95:PHE:N	1:A:95:PHE:CA	1:A:95:PHE:C	1:A:96:VAL:N	11	2.1
(1,86)	1:A:93:ALA:N	1:A:93:ALA:CA	1:A:93:ALA:C	1:A:94:GLN:N	5	2.1
(1,69)	1:A:67:LEU:C	1:A:68:SER:N	1:A:68:SER:CA	1:A:68:SER:C	8	2.1
(1,65)	1:A:65:ARG:C	1:A:66:MET:N	1:A:66:MET:CA	1:A:66:MET:C	15	2.1
(1,57)	1:A:61:GLU:C	1:A:62:LYS:N	1:A:62:LYS:CA	1:A:62:LYS:C	9	2.1
(1,54)	1:A:54:VAL:N	1:A:54:VAL:CA	1:A:54:VAL:C	1:A:55:SER:N	3	2.1
(1,37)	1:A:44:TYR:C	1:A:45:CYS:N	1:A:45:CYS:CA	1:A:45:CYS:C	20	2.1
(1,33)	1:A:42:GLY:C	1:A:43:MET:N	1:A:43:MET:CA	1:A:43:MET:C	11	2.1
(1,32)	1:A:34:VAL:N	1:A:34:VAL:CA	1:A:34:VAL:C	1:A:35:TRP:N	8	2.1
(1,25)	1:A:18:VAL:C	1:A:19:ASN:N	1:A:19:ASN:CA	1:A:19:ASN:C	19	2.1
(1,23)	1:A:17:LEU:C	1:A:18:VAL:N	1:A:18:VAL:CA	1:A:18:VAL:C	12	2.1
(1,18)	1:A:15:GLU:N	1:A:15:GLU:CA	1:A:15:GLU:C	1:A:16:GLU:N	12	2.1
(1,13)	1:A:12:GLU:C	1:A:13:LEU:N	1:A:13:LEU:CA	1:A:13:LEU:C	17	2.1
(1,12)	1:A:12:GLU:N	1:A:12:GLU:CA	1:A:12:GLU:C	1:A:13:LEU:N	18	2.1
(1,117)	1:A:108:ARG:C	1:A:109:GLU:N	1:A:109:GLU:CA	1:A:109:GLU:C	16	2.1
(1,101)	1:A:100:LEU:C	1:A:101:LEU:N	1:A:101:LEU:CA	1:A:101:LEU:C	4	2.1
(1,90)	1:A:95:PHE:N	1:A:95:PHE:CA	1:A:95:PHE:C	1:A:96:VAL:N	18	2.0
(1,9)	1:A:10:LEU:C	1:A:11:ARG:N	1:A:11:ARG:CA	1:A:11:ARG:C	7	2.0
(1,69)	1:A:67:LEU:C	1:A:68:SER:N	1:A:68:SER:CA	1:A:68:SER:C	4	2.0
(1,50)	1:A:51:LEU:N	1:A:51:LEU:CA	1:A:51:LEU:C	1:A:52:ILE:N	14	2.0

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,42)	1:A:47:ALA:N	1:A:47:ALA:CA	1:A:47:ALA:C	1:A:48:LEU:N	12	2.0
(1,40)	1:A:46:ALA:N	1:A:46:ALA:CA	1:A:46:ALA:C	1:A:47:ALA:N	14	2.0
(1,4)	1:A:8:THR:N	1:A:8:THR:CA	1:A:8:THR:C	1:A:9:ALA:N	3	2.0
(1,16)	1:A:14:ILE:N	1:A:14:ILE:CA	1:A:14:ILE:C	1:A:15:GLU:N	14	2.0
(1,16)	1:A:14:ILE:N	1:A:14:ILE:CA	1:A:14:ILE:C	1:A:15:GLU:N	17	2.0
(1,105)	1:A:102:HIS:C	1:A:103:LEU:N	1:A:103:LEU:CA	1:A:103:LEU:C	4	2.0
(1,103)	1:A:101:LEU:C	1:A:102:HIS:N	1:A:102:HIS:CA	1:A:102:HIS:C	19	2.0
(1,99)	1:A:99:LEU:C	1:A:100:LEU:N	1:A:100:LEU:CA	1:A:100:LEU:C	9	1.9
(1,93)	1:A:96:VAL:C	1:A:97:LYS:N	1:A:97:LYS:CA	1:A:97:LYS:C	13	1.9
(1,9)	1:A:10:LEU:C	1:A:11:ARG:N	1:A:11:ARG:CA	1:A:11:ARG:C	5	1.9
(1,9)	1:A:10:LEU:C	1:A:11:ARG:N	1:A:11:ARG:CA	1:A:11:ARG:C	11	1.9
(1,7)	1:A:9:ALA:C	1:A:10:LEU:N	1:A:10:LEU:CA	1:A:10:LEU:C	11	1.9
(1,66)	1:A:66:MET:N	1:A:66:MET:CA	1:A:66:MET:C	1:A:67:LEU:N	3	1.9
(1,66)	1:A:66:MET:N	1:A:66:MET:CA	1:A:66:MET:C	1:A:67:LEU:N	7	1.9
(1,65)	1:A:65:ARG:C	1:A:66:MET:N	1:A:66:MET:CA	1:A:66:MET:C	18	1.9
(1,57)	1:A:61:GLU:C	1:A:62:LYS:N	1:A:62:LYS:CA	1:A:62:LYS:C	19	1.9
(1,56)	1:A:59:ALA:N	1:A:59:ALA:CA	1:A:59:ALA:C	1:A:60:ILE:N	3	1.9
(1,53)	1:A:53:ASN:C	1:A:54:VAL:N	1:A:54:VAL:CA	1:A:54:VAL:C	2	1.9
(1,5)	1:A:8:THR:C	1:A:9:ALA:N	1:A:9:ALA:CA	1:A:9:ALA:C	4	1.9
(1,46)	1:A:49:GLU:N	1:A:49:GLU:CA	1:A:49:GLU:C	1:A:50:SER:N	15	1.9
(1,42)	1:A:47:ALA:N	1:A:47:ALA:CA	1:A:47:ALA:C	1:A:48:LEU:N	15	1.9
(1,26)	1:A:19:ASN:N	1:A:19:ASN:CA	1:A:19:ASN:C	1:A:20:ILE:N	15	1.9
(1,20)	1:A:16:GLU:N	1:A:16:GLU:CA	1:A:16:GLU:C	1:A:17:LEU:N	20	1.9
(1,18)	1:A:15:GLU:N	1:A:15:GLU:CA	1:A:15:GLU:C	1:A:16:GLU:N	17	1.9
(1,17)	1:A:14:ILE:C	1:A:15:GLU:N	1:A:15:GLU:CA	1:A:15:GLU:C	8	1.9
(1,14)	1:A:13:LEU:N	1:A:13:LEU:CA	1:A:13:LEU:C	1:A:14:ILE:N	2	1.9
(1,14)	1:A:13:LEU:N	1:A:13:LEU:CA	1:A:13:LEU:C	1:A:14:ILE:N	15	1.9
(1,13)	1:A:12:GLU:C	1:A:13:LEU:N	1:A:13:LEU:CA	1:A:13:LEU:C	1	1.9
(1,13)	1:A:12:GLU:C	1:A:13:LEU:N	1:A:13:LEU:CA	1:A:13:LEU:C	4	1.9
(1,127)	1:A:89:LYS:N	1:A:89:LYS:CA	1:A:89:LYS:CB	1:A:89:LYS:CG	12	1.9
(1,119)	1:A:12:GLU:N	1:A:12:GLU:CA	1:A:12:GLU:CB	1:A:12:GLU:CG	6	1.9
(1,119)	1:A:12:GLU:N	1:A:12:GLU:CA	1:A:12:GLU:CB	1:A:12:GLU:CG	9	1.9
(1,116)	1:A:108:ARG:N	1:A:108:ARG:CA	1:A:108:ARG:C	1:A:109:GLU:N	2	1.9
(1,116)	1:A:108:ARG:N	1:A:108:ARG:CA	1:A:108:ARG:C	1:A:109:GLU:N	17	1.9
(1,116)	1:A:108:ARG:N	1:A:108:ARG:CA	1:A:108:ARG:C	1:A:109:GLU:N	20	1.9
(1,113)	1:A:106:LEU:C	1:A:107:PHE:N	1:A:107:PHE:CA	1:A:107:PHE:C	15	1.9
(1,101)	1:A:100:LEU:C	1:A:101:LEU:N	1:A:101:LEU:CA	1:A:101:LEU:C	19	1.9
(1,10)	1:A:11:ARG:N	1:A:11:ARG:CA	1:A:11:ARG:C	1:A:12:GLU:N	12	1.9
(1,98)	1:A:99:LEU:N	1:A:99:LEU:CA	1:A:99:LEU:C	1:A:100:LEU:N	7	1.8
(1,95)	1:A:97:LYS:C	1:A:98:ASP:N	1:A:98:ASP:CA	1:A:98:ASP:C	1	1.8
(1,94)	1:A:97:LYS:N	1:A:97:LYS:CA	1:A:97:LYS:C	1:A:98:ASP:N	20	1.8
(1,9)	1:A:10:LEU:C	1:A:11:ARG:N	1:A:11:ARG:CA	1:A:11:ARG:C	20	1.8
(1,80)	1:A:90:ILE:N	1:A:90:ILE:CA	1:A:90:ILE:C	1:A:91:GLU:N	8	1.8
(1,75)	1:A:87:ASP:C	1:A:88:THR:N	1:A:88:THR:CA	1:A:88:THR:C	16	1.8
(1,61)	1:A:63:THR:C	1:A:64:GLN:N	1:A:64:GLN:CA	1:A:64:GLN:C	14	1.8
(1,6)	1:A:9:ALA:N	1:A:9:ALA:CA	1:A:9:ALA:C	1:A:10:LEU:N	1	1.8
(1,6)	1:A:9:ALA:N	1:A:9:ALA:CA	1:A:9:ALA:C	1:A:10:LEU:N	9	1.8
(1,56)	1:A:59:ALA:N	1:A:59:ALA:CA	1:A:59:ALA:C	1:A:60:ILE:N	4	1.8
(1,54)	1:A:54:VAL:N	1:A:54:VAL:CA	1:A:54:VAL:C	1:A:55:SER:N	2	1.8
(1,47)	1:A:49:GLU:C	1:A:50:SER:N	1:A:50:SER:CA	1:A:50:SER:C	14	1.8
(1,46)	1:A:49:GLU:N	1:A:49:GLU:CA	1:A:49:GLU:C	1:A:50:SER:N	8	1.8

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,40)	1:A:46:ALA:N	1:A:46:ALA:CA	1:A:46:ALA:C	1:A:47:ALA:N	12	1.8
(1,40)	1:A:46:ALA:N	1:A:46:ALA:CA	1:A:46:ALA:C	1:A:47:ALA:N	16	1.8
(1,37)	1:A:44:TYR:C	1:A:45:CYS:N	1:A:45:CYS:CA	1:A:45:CYS:C	7	1.8
(1,32)	1:A:34:VAL:N	1:A:34:VAL:CA	1:A:34:VAL:C	1:A:35:TRP:N	7	1.8
(1,26)	1:A:19:ASN:N	1:A:19:ASN:CA	1:A:19:ASN:C	1:A:20:ILE:N	3	1.8
(1,26)	1:A:19:ASN:N	1:A:19:ASN:CA	1:A:19:ASN:C	1:A:20:ILE:N	12	1.8
(1,23)	1:A:17:LEU:C	1:A:18:VAL:N	1:A:18:VAL:CA	1:A:18:VAL:C	6	1.8
(1,19)	1:A:15:GLU:C	1:A:16:GLU:N	1:A:16:GLU:CA	1:A:16:GLU:C	8	1.8
(1,19)	1:A:15:GLU:C	1:A:16:GLU:N	1:A:16:GLU:CA	1:A:16:GLU:C	12	1.8
(1,119)	1:A:12:GLU:N	1:A:12:GLU:CA	1:A:12:GLU:CB	1:A:12:GLU:CG	18	1.8
(1,116)	1:A:108:ARG:N	1:A:108:ARG:CA	1:A:108:ARG:C	1:A:109:GLU:N	10	1.8
(1,112)	1:A:106:LEU:N	1:A:106:LEU:CA	1:A:106:LEU:C	1:A:107:PHE:N	9	1.8
(1,106)	1:A:103:LEU:N	1:A:103:LEU:CA	1:A:103:LEU:C	1:A:104:LYS:N	5	1.8
(1,101)	1:A:100:LEU:C	1:A:101:LEU:N	1:A:101:LEU:CA	1:A:101:LEU:C	20	1.8
(1,97)	1:A:98:ASP:C	1:A:99:LEU:N	1:A:99:LEU:CA	1:A:99:LEU:C	2	1.7
(1,9)	1:A:10:LEU:C	1:A:11:ARG:N	1:A:11:ARG:CA	1:A:11:ARG:C	1	1.7
(1,9)	1:A:10:LEU:C	1:A:11:ARG:N	1:A:11:ARG:CA	1:A:11:ARG:C	9	1.7
(1,87)	1:A:93:ALA:C	1:A:94:GLN:N	1:A:94:GLN:CA	1:A:94:GLN:C	18	1.7
(1,8)	1:A:10:LEU:N	1:A:10:LEU:CA	1:A:10:LEU:C	1:A:11:ARG:N	15	1.7
(1,79)	1:A:89:LYS:C	1:A:90:ILE:N	1:A:90:ILE:CA	1:A:90:ILE:C	12	1.7
(1,46)	1:A:49:GLU:N	1:A:49:GLU:CA	1:A:49:GLU:C	1:A:50:SER:N	5	1.7
(1,42)	1:A:47:ALA:N	1:A:47:ALA:CA	1:A:47:ALA:C	1:A:48:LEU:N	14	1.7
(1,28)	1:A:20:ILE:N	1:A:20:ILE:CA	1:A:20:ILE:C	1:A:21:THR:N	2	1.7
(1,28)	1:A:20:ILE:N	1:A:20:ILE:CA	1:A:20:ILE:C	1:A:21:THR:N	4	1.7
(1,142)	1:A:99:LEU:N	1:A:99:LEU:CA	1:A:99:LEU:CB	1:A:99:LEU:CG	1	1.7
(1,106)	1:A:103:LEU:N	1:A:103:LEU:CA	1:A:103:LEU:C	1:A:104:LYS:N	15	1.7
(1,99)	1:A:99:LEU:C	1:A:100:LEU:N	1:A:100:LEU:CA	1:A:100:LEU:C	20	1.6
(1,93)	1:A:96:VAL:C	1:A:97:LYS:N	1:A:97:LYS:CA	1:A:97:LYS:C	20	1.6
(1,87)	1:A:93:ALA:C	1:A:94:GLN:N	1:A:94:GLN:CA	1:A:94:GLN:C	10	1.6
(1,8)	1:A:10:LEU:N	1:A:10:LEU:CA	1:A:10:LEU:C	1:A:11:ARG:N	8	1.6
(1,79)	1:A:89:LYS:C	1:A:90:ILE:N	1:A:90:ILE:CA	1:A:90:ILE:C	17	1.6
(1,69)	1:A:67:LEU:C	1:A:68:SER:N	1:A:68:SER:CA	1:A:68:SER:C	2	1.6
(1,66)	1:A:66:MET:N	1:A:66:MET:CA	1:A:66:MET:C	1:A:67:LEU:N	16	1.6
(1,57)	1:A:61:GLU:C	1:A:62:LYS:N	1:A:62:LYS:CA	1:A:62:LYS:C	1	1.6
(1,54)	1:A:54:VAL:N	1:A:54:VAL:CA	1:A:54:VAL:C	1:A:55:SER:N	1	1.6
(1,50)	1:A:51:LEU:N	1:A:51:LEU:CA	1:A:51:LEU:C	1:A:52:ILE:N	5	1.6
(1,49)	1:A:50:SER:C	1:A:51:LEU:N	1:A:51:LEU:CA	1:A:51:LEU:C	1	1.6
(1,49)	1:A:50:SER:C	1:A:51:LEU:N	1:A:51:LEU:CA	1:A:51:LEU:C	2	1.6
(1,46)	1:A:49:GLU:N	1:A:49:GLU:CA	1:A:49:GLU:C	1:A:50:SER:N	1	1.6
(1,38)	1:A:45:CYS:N	1:A:45:CYS:CA	1:A:45:CYS:C	1:A:46:ALA:N	9	1.6
(1,31)	1:A:33:MET:C	1:A:34:VAL:N	1:A:34:VAL:CA	1:A:34:VAL:C	2	1.6
(1,29)	1:A:20:ILE:C	1:A:21:THR:N	1:A:21:THR:CA	1:A:21:THR:C	7	1.6
(1,26)	1:A:19:ASN:N	1:A:19:ASN:CA	1:A:19:ASN:C	1:A:20:ILE:N	7	1.6
(1,142)	1:A:99:LEU:N	1:A:99:LEU:CA	1:A:99:LEU:CB	1:A:99:LEU:CG	11	1.6
(1,116)	1:A:108:ARG:N	1:A:108:ARG:CA	1:A:108:ARG:C	1:A:109:GLU:N	3	1.6
(1,116)	1:A:108:ARG:N	1:A:108:ARG:CA	1:A:108:ARG:C	1:A:109:GLU:N	16	1.6
(1,108)	1:A:104:LYS:N	1:A:104:LYS:CA	1:A:104:LYS:C	1:A:105:LYS:N	8	1.6
(1,106)	1:A:103:LEU:N	1:A:103:LEU:CA	1:A:103:LEU:C	1:A:104:LYS:N	9	1.6
(1,105)	1:A:102:HIS:C	1:A:103:LEU:N	1:A:103:LEU:CA	1:A:103:LEU:C	1	1.6
(1,101)	1:A:100:LEU:C	1:A:101:LEU:N	1:A:101:LEU:CA	1:A:101:LEU:C	1	1.6
(1,1)	1:A:6:PRO:C	1:A:7:SER:N	1:A:7:SER:CA	1:A:7:SER:C	6	1.6

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,87)	1:A:93:ALA:C	1:A:94:GLN:N	1:A:94:GLN:CA	1:A:94:GLN:C	14	1.5
(1,83)	1:A:91:GLU:C	1:A:92:VAL:N	1:A:92:VAL:CA	1:A:92:VAL:C	2	1.5
(1,69)	1:A:67:LEU:C	1:A:68:SER:N	1:A:68:SER:CA	1:A:68:SER:C	11	1.5
(1,61)	1:A:63:THR:C	1:A:64:GLN:N	1:A:64:GLN:CA	1:A:64:GLN:C	17	1.5
(1,57)	1:A:61:GLU:C	1:A:62:LYS:N	1:A:62:LYS:CA	1:A:62:LYS:C	11	1.5
(1,56)	1:A:59:ALA:N	1:A:59:ALA:CA	1:A:59:ALA:C	1:A:60:ILE:N	8	1.5
(1,42)	1:A:47:ALA:N	1:A:47:ALA:CA	1:A:47:ALA:C	1:A:48:LEU:N	8	1.5
(1,4)	1:A:8:THR:N	1:A:8:THR:CA	1:A:8:THR:C	1:A:9:ALA:N	17	1.5
(1,31)	1:A:33:MET:C	1:A:34:VAL:N	1:A:34:VAL:CA	1:A:34:VAL:C	15	1.5
(1,29)	1:A:20:ILE:C	1:A:21:THR:N	1:A:21:THR:CA	1:A:21:THR:C	20	1.5
(1,23)	1:A:17:LEU:C	1:A:18:VAL:N	1:A:18:VAL:CA	1:A:18:VAL:C	4	1.5
(1,139)	1:A:53:ASN:N	1:A:53:ASN:CA	1:A:53:ASN:CB	1:A:53:ASN:CG	11	1.5
(1,116)	1:A:108:ARG:N	1:A:108:ARG:CA	1:A:108:ARG:C	1:A:109:GLU:N	4	1.5
(1,113)	1:A:106:LEU:C	1:A:107:PHE:N	1:A:107:PHE:CA	1:A:107:PHE:C	14	1.5
(1,99)	1:A:99:LEU:C	1:A:100:LEU:N	1:A:100:LEU:CA	1:A:100:LEU:C	16	1.4
(1,92)	1:A:96:VAL:N	1:A:96:VAL:CA	1:A:96:VAL:C	1:A:97:LYS:N	6	1.4
(1,91)	1:A:95:PHE:C	1:A:96:VAL:N	1:A:96:VAL:CA	1:A:96:VAL:C	6	1.4
(1,91)	1:A:95:PHE:C	1:A:96:VAL:N	1:A:96:VAL:CA	1:A:96:VAL:C	13	1.4
(1,90)	1:A:95:PHE:N	1:A:95:PHE:CA	1:A:95:PHE:C	1:A:96:VAL:N	10	1.4
(1,9)	1:A:10:LEU:C	1:A:11:ARG:N	1:A:11:ARG:CA	1:A:11:ARG:C	14	1.4
(1,9)	1:A:10:LEU:C	1:A:11:ARG:N	1:A:11:ARG:CA	1:A:11:ARG:C	17	1.4
(1,80)	1:A:90:ILE:N	1:A:90:ILE:CA	1:A:90:ILE:C	1:A:91:GLU:N	13	1.4
(1,8)	1:A:10:LEU:N	1:A:10:LEU:CA	1:A:10:LEU:C	1:A:11:ARG:N	1	1.4
(1,79)	1:A:89:LYS:C	1:A:90:ILE:N	1:A:90:ILE:CA	1:A:90:ILE:C	2	1.4
(1,79)	1:A:89:LYS:C	1:A:90:ILE:N	1:A:90:ILE:CA	1:A:90:ILE:C	20	1.4
(1,69)	1:A:67:LEU:C	1:A:68:SER:N	1:A:68:SER:CA	1:A:68:SER:C	10	1.4
(1,63)	1:A:64:GLN:C	1:A:65:ARG:N	1:A:65:ARG:CA	1:A:65:ARG:C	7	1.4
(1,6)	1:A:9:ALA:N	1:A:9:ALA:CA	1:A:9:ALA:C	1:A:10:LEU:N	13	1.4
(1,57)	1:A:61:GLU:C	1:A:62:LYS:N	1:A:62:LYS:CA	1:A:62:LYS:C	12	1.4
(1,47)	1:A:49:GLU:C	1:A:50:SER:N	1:A:50:SER:CA	1:A:50:SER:C	12	1.4
(1,46)	1:A:49:GLU:N	1:A:49:GLU:CA	1:A:49:GLU:C	1:A:50:SER:N	2	1.4
(1,46)	1:A:49:GLU:N	1:A:49:GLU:CA	1:A:49:GLU:C	1:A:50:SER:N	4	1.4
(1,35)	1:A:43:MET:C	1:A:44:TYR:N	1:A:44:TYR:CA	1:A:44:TYR:C	4	1.4
(1,26)	1:A:19:ASN:N	1:A:19:ASN:CA	1:A:19:ASN:C	1:A:20:ILE:N	1	1.4
(1,109)	1:A:104:LYS:C	1:A:105:LYS:N	1:A:105:LYS:CA	1:A:105:LYS:C	2	1.4
(1,108)	1:A:104:LYS:N	1:A:104:LYS:CA	1:A:104:LYS:C	1:A:105:LYS:N	3	1.4
(1,1)	1:A:6:PRO:C	1:A:7:SER:N	1:A:7:SER:CA	1:A:7:SER:C	8	1.4
(1,98)	1:A:99:LEU:N	1:A:99:LEU:CA	1:A:99:LEU:C	1:A:100:LEU:N	5	1.3
(1,9)	1:A:10:LEU:C	1:A:11:ARG:N	1:A:11:ARG:CA	1:A:11:ARG:C	10	1.3
(1,89)	1:A:94:GLN:C	1:A:95:PHE:N	1:A:95:PHE:CA	1:A:95:PHE:C	19	1.3
(1,87)	1:A:93:ALA:C	1:A:94:GLN:N	1:A:94:GLN:CA	1:A:94:GLN:C	12	1.3
(1,79)	1:A:89:LYS:C	1:A:90:ILE:N	1:A:90:ILE:CA	1:A:90:ILE:C	1	1.3
(1,57)	1:A:61:GLU:C	1:A:62:LYS:N	1:A:62:LYS:CA	1:A:62:LYS:C	4	1.3
(1,57)	1:A:61:GLU:C	1:A:62:LYS:N	1:A:62:LYS:CA	1:A:62:LYS:C	17	1.3
(1,37)	1:A:44:TYR:C	1:A:45:CYS:N	1:A:45:CYS:CA	1:A:45:CYS:C	11	1.3
(1,3)	1:A:7:SER:C	1:A:8:THR:N	1:A:8:THR:CA	1:A:8:THR:C	17	1.3
(1,20)	1:A:16:GLU:N	1:A:16:GLU:CA	1:A:16:GLU:C	1:A:17:LEU:N	18	1.3
(1,17)	1:A:14:ILE:C	1:A:15:GLU:N	1:A:15:GLU:CA	1:A:15:GLU:C	1	1.3
(1,14)	1:A:13:LEU:N	1:A:13:LEU:CA	1:A:13:LEU:C	1:A:14:ILE:N	9	1.3
(1,13)	1:A:12:GLU:C	1:A:13:LEU:N	1:A:13:LEU:CA	1:A:13:LEU:C	7	1.3
(1,115)	1:A:107:PHE:C	1:A:108:ARG:N	1:A:108:ARG:CA	1:A:108:ARG:C	19	1.3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,1)	1:A:6:PRO:C	1:A:7:SER:N	1:A:7:SER:CA	1:A:7:SER:C	19	1.3
(1,95)	1:A:97:LYS:C	1:A:98:ASP:N	1:A:98:ASP:CA	1:A:98:ASP:C	5	1.2
(1,89)	1:A:94:GLN:C	1:A:95:PHE:N	1:A:95:PHE:CA	1:A:95:PHE:C	6	1.2
(1,84)	1:A:92:VAL:N	1:A:92:VAL:CA	1:A:92:VAL:C	1:A:93:ALA:N	17	1.2
(1,78)	1:A:89:LYS:N	1:A:89:LYS:CA	1:A:89:LYS:C	1:A:90:ILE:N	4	1.2
(1,69)	1:A:67:LEU:C	1:A:68:SER:N	1:A:68:SER:CA	1:A:68:SER:C	20	1.2
(1,66)	1:A:66:MET:N	1:A:66:MET:CA	1:A:66:MET:C	1:A:67:LEU:N	9	1.2
(1,5)	1:A:8:THR:C	1:A:9:ALA:N	1:A:9:ALA:CA	1:A:9:ALA:C	20	1.2
(1,42)	1:A:47:ALA:N	1:A:47:ALA:CA	1:A:47:ALA:C	1:A:48:LEU:N	7	1.2
(1,32)	1:A:34:VAL:N	1:A:34:VAL:CA	1:A:34:VAL:C	1:A:35:TRP:N	15	1.2
(1,19)	1:A:15:GLU:C	1:A:16:GLU:N	1:A:16:GLU:CA	1:A:16:GLU:C	13	1.2
(1,17)	1:A:14:ILE:C	1:A:15:GLU:N	1:A:15:GLU:CA	1:A:15:GLU:C	18	1.2
(1,15)	1:A:13:LEU:C	1:A:14:ILE:N	1:A:14:ILE:CA	1:A:14:ILE:C	5	1.2
(1,14)	1:A:13:LEU:N	1:A:13:LEU:CA	1:A:13:LEU:C	1:A:14:ILE:N	20	1.2
(1,136)	1:A:24:GLN:N	1:A:24:GLN:CA	1:A:24:GLN:CB	1:A:24:GLN:CG	15	1.2
(1,94)	1:A:97:LYS:N	1:A:97:LYS:CA	1:A:97:LYS:C	1:A:98:ASP:N	2	1.1
(1,92)	1:A:96:VAL:N	1:A:96:VAL:CA	1:A:96:VAL:C	1:A:97:LYS:N	8	1.1
(1,56)	1:A:59:ALA:N	1:A:59:ALA:CA	1:A:59:ALA:C	1:A:60:ILE:N	9	1.1
(1,56)	1:A:59:ALA:N	1:A:59:ALA:CA	1:A:59:ALA:C	1:A:60:ILE:N	20	1.1
(1,51)	1:A:51:LEU:C	1:A:52:ILE:N	1:A:52:ILE:CA	1:A:52:ILE:C	18	1.1
(1,46)	1:A:49:GLU:N	1:A:49:GLU:CA	1:A:49:GLU:C	1:A:50:SER:N	12	1.1
(1,42)	1:A:47:ALA:N	1:A:47:ALA:CA	1:A:47:ALA:C	1:A:48:LEU:N	16	1.1
(1,4)	1:A:8:THR:N	1:A:8:THR:CA	1:A:8:THR:C	1:A:9:ALA:N	10	1.1
(1,26)	1:A:19:ASN:N	1:A:19:ASN:CA	1:A:19:ASN:C	1:A:20:ILE:N	16	1.1
(1,26)	1:A:19:ASN:N	1:A:19:ASN:CA	1:A:19:ASN:C	1:A:20:ILE:N	19	1.1
(1,17)	1:A:14:ILE:C	1:A:15:GLU:N	1:A:15:GLU:CA	1:A:15:GLU:C	14	1.1
(1,15)	1:A:13:LEU:C	1:A:14:ILE:N	1:A:14:ILE:CA	1:A:14:ILE:C	1	1.1
(1,105)	1:A:102:HIS:C	1:A:103:LEU:N	1:A:103:LEU:CA	1:A:103:LEU:C	5	1.1
(1,1)	1:A:6:PRO:C	1:A:7:SER:N	1:A:7:SER:CA	1:A:7:SER:C	17	1.1