Full wwPDB NMR Structure Validation Report (i)

Jun 5, 2023 – 01:36 PM EDT

PDB ID	:	2M6B
BMRB ID	:	19126
Title	:	Structure of full-length transmembrane domains of human glycine receptor alpha1 monomer subunit
Authors	:	Mowrey, D.; Cui, T.; Jia, Y.; Ma, D.; Makhov, A.M.; Zhang, P.; Tang, P.; Xu, Y.
Deposited on	:	2013-03-28

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:

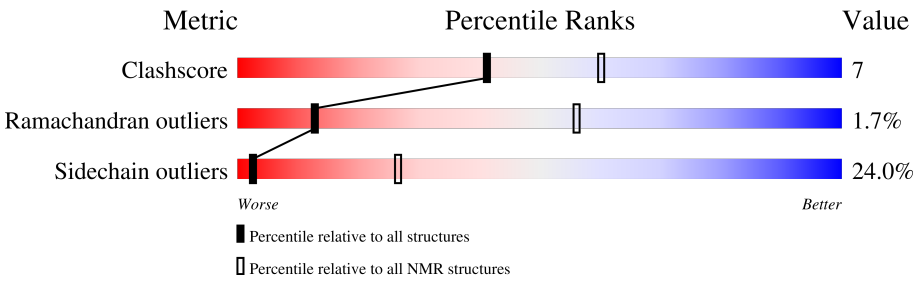
MolProbity	:	4.02b-467
Percentile statistics	:	20191225.v01 (using entries in the PDB archive December 25th 2019)
wwPDB-RCI	:	v_1n_11_5_13_A (Berjanski et al., 2005)
PANAV	:	Wang et al. (2010)
wwPDB-ShiftChecker	:	v1.2
BMRB Restraints Analysis	:	v1.2
Ideal geometry (proteins)	:	Engh & Huber (2001)
Ideal 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 53%.

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	150	57% 27% • 15%

2 Ensemble composition and analysis (i)

This entry contains 15 models. Model 1 is the overall representative, medoid model (most similar to other models).

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

Well-defined (core) protein residues			
Well-defined core	**Residue range (total)**	**Backbone RMSD (Å)**	**Medoid model**
1	A:216-A:308, A:390-A:424 (128)	1.26	1

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

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

The models can be grouped into 3 clusters. No single-model clusters were found.

Cluster number	Models
1	1, 3, 4, 5, 6, 9, 11, 13
2	7, 10, 12, 14
3	2, 8, 15

3 Entry composition (i)

There is only 1 type of molecule in this entry. The entry contains 2489 atoms, of which 1260 are hydrogens and 0 are deuteriums.

- Molecule 1 is a protein called Full-Length Transmembrane Domains of Human Glycine Receptor alpha1 Subunit.

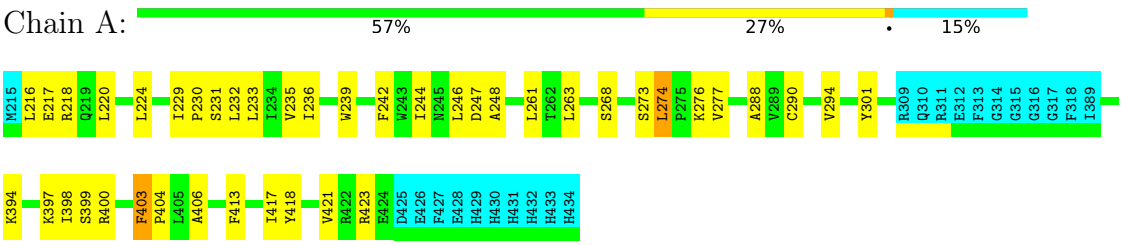
Mol	Chain	Residues	Atoms						Trace
			Total	C	H	N	O	S	
1	A	150	2489	819	1260	207	201	2	0

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: Full-Length Transmembrane Domains of Human Glycine Receptor alpha1 Subunit

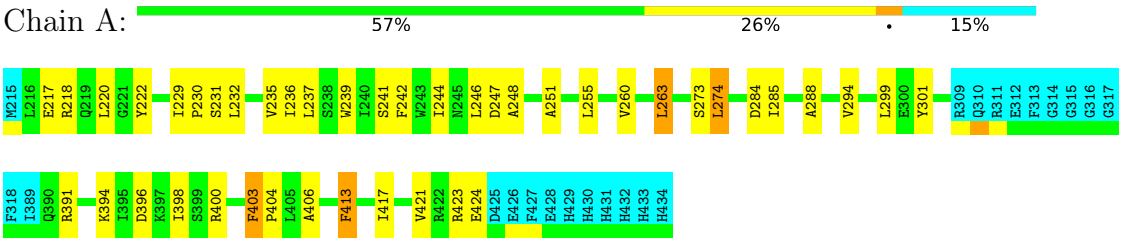


4.2 Scores per residue for each member of the ensemble

Colouring as in section 4.1 above.

4.2.1 Score per residue for model 1 (medoid)

• Molecule 1: Full-Length Transmembrane Domains of Human Glycine Receptor alpha1 Subunit



4.2.2 Score per residue for model 2

• Molecule 1: Full-Length Transmembrane Domains of Human Glycine Receptor alpha1 Subunit

Chain A: 54% 29% • 15%

M215 L220 G221 Y222 I229 P230 S231 L232 L233 I234 V235 I236 L237 S238 W239 I240 S241 F242 W243 I244 N245 L246 D247 A248 V253 G254 L255 G256 I257 L261 Q266 S267 S268 L274 P275 K276 V277 D284 I285 W286 F293 Y301 F306 R309 Q310 R311 E312 F313 G314

G315 G316 G317 F318 I389 Q390 R391 K397 I398 S399 F403 P404 L405 A406 F407 L408 I409 F410 F413 I417 Y418 V421 R422 R423 E424 D425 E426 F427 E428 H429 H430 H431 H432 H433 H434

4.2.3 Score per residue for model 3

• Molecule 1: Full-Length Transmembrane Domains of Human Glycine Receptor alpha1 Subunit

Chain A: 55% 28% • 15%

M215 L216 L220 Q226 L227 Y228 I229 P230 S231 V235 W239 F242 W243 I244 N245 L246 D247 A248 R252 L261 T262 L263 S268 R271 L274 P275 K276 V277 V280 K281 A282 I283 D284 I285 W286 V289 F293 V294 L298 L299 E300 Y301 F306 R309

Q310 R311 E312 F313 G314 G315 G316 G317 F318 I389 Q390 R391 K394 K397 F403 P404 F407 N411 L412 F413 I417 V421 D425 E426 F427 E428 H429 H430 H431 H432 H433 H434

4.2.4 Score per residue for model 4

• Molecule 1: Full-Length Transmembrane Domains of Human Glycine Receptor alpha1 Subunit

Chain A: 57% 25% • 15%

M215 L216 E217 R218 Q219 L220 G221 Y222 Y223 L224 I229 P230 S231 L232 L233 I234 V235 I236 L237 S238 F242 W243 I244 N245 L246 D247 A248 R252 L261 S273 L274 P275 K276 Y279 V280 K281 A282 I283 D284 I285 A288 V289 V294 E300 S308 R309 Q310 R311 E312 F313

G314 G315 G316 G317 F318 I389 I398 S399 R400 F403 P404 L405 A406 I417 Y418 V421 D425 E426 F427 E428 H429 H430 H431 H432 H433 H434

4.2.5 Score per residue for model 5

• Molecule 1: Full-Length Transmembrane Domains of Human Glycine Receptor alpha1 Subunit

Chain A: 51% 31% • 15%

M215 L216 E217 Y223 L224 L227 Y228 I229 P230 S231 L232 V235 I236 L237 W243 I244 N245 L246 D247 A248 V253 I257 L263 Q266 S267 S268 S273 L274 P275 K276 Y279 I283 D284 A288 V289 C290 L291 L292 E300 Y301 R309 Q310 R311 E312 F313 G314

G315 G316 G317 F318 I389 Q390 R391 K394 K397 I398 S399 R400 I401 G402 F403 P404 L405 A406 F407 L408 F413 Y414 W415 I416 I417 Y418 K419 I420 V421 R422 R423 E424 D425 E426 F427 E428 H429 H430 H431 H432 H433 H434

4.2.6 Score per residue for model 6

• Molecule 1: Full-Length Transmembrane Domains of Human Glycine Receptor alpha1 Subunit

Chain A: 53% 29% • 15%

M215 L216 E217 R218 Q219 L220 I229 P230 S231 L232 L233 I234 V235 I236 L237 S238 S241 F242 W243 I244 N245 L246 D247 A248 R252 V253 I257 L261 S267 S268 R271 A272 S273 L274 D284 A288 V289 C290 F293 V294 L298 R309 Q310 R311 E312 F313 G314 G315

G316 G317 F318 I389 K394 I395 I398 S399 R400 F403 P404 L405 A406 N411 L412 F413 I417 Y418 V421 D425 E426 F427 E428 H429 H430 H431 H432 H433 H434

4.2.7 Score per residue for model 7

• Molecule 1: Full-Length Transmembrane Domains of Human Glycine Receptor alpha1 Subunit

Chain A: 56% 27% • 15%

M215 L216 E217 R218 Q219 L220 Y223 L224 I225 Q226 L227 Y228 I229 P230 S231 L232 V235 I236 F242 L246 D247 R252 S267 S273 L274 P275 K276 V277 I285 A288 V289 C290 L291 L292 F293 V294 F295 S296 E300 Y301 R309 Q310 R311 E312 F313 G314 G315 G316 G317

F318 I389 K397 I398 S399 F403 P404 L405 A406 F410 N411 L412 F413 I417 Y418 K419 I420 V421 R422 R423 E424 D425 E426 F427 E428 H429 H430 H431 H432 H433 H434

4.2.8 Score per residue for model 8

• Molecule 1: Full-Length Transmembrane Domains of Human Glycine Receptor alpha1 Subunit

Chain A: 51% 30% • 15%

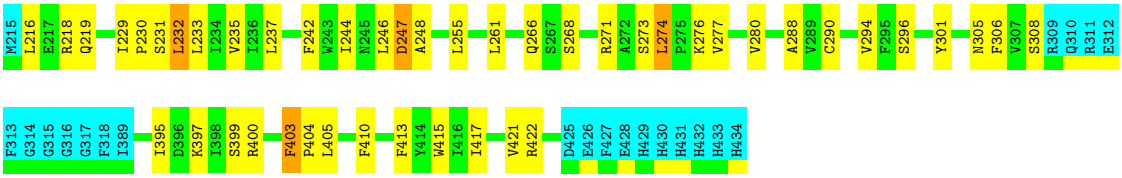
M215 L216 E217 R218 Q219 L220 I225 I229 P230 S231 V235 I236 L237 S238 W239 W243 I244 N245 L246 D247 A248 L261 S267 S268 R271 A272 S273 L274 V277 S278 D284 I285 W286 L287 L291 L292 F293 V294 F295 S296 L299 V304 R309 Q310 R311 E312 F313

G314 G315 G316 G317 F318 I389 Q390 R391 A392 K393 K394 I395 D396 K397 I398 S399 R400 F403 P404 F407 L408 F413 I417 Y418 R423 E424 D425 E426 F427 E428 H429 H430 H431 H432 H433 H434

4.2.9 Score per residue for model 9

• Molecule 1: Full-Length Transmembrane Domains of Human Glycine Receptor alpha1 Subunit

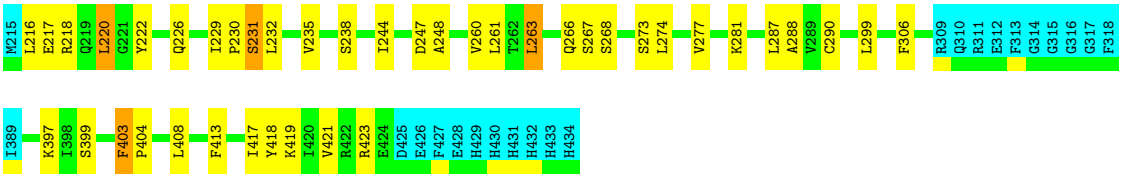
Chain A: 55% 28% • 15%



4.2.10 Score per residue for model 10

• Molecule 1: Full-Length Transmembrane Domains of Human Glycine Receptor alpha1 Subunit

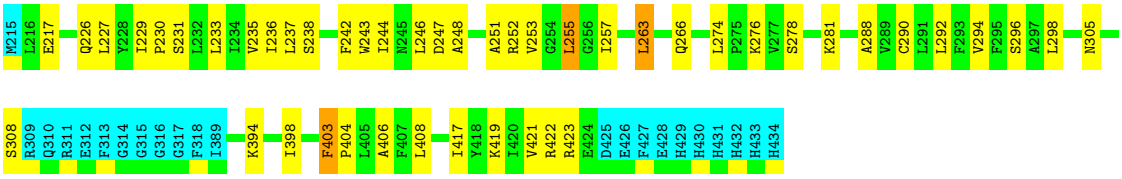
Chain A: 58% 25% • 15%



4.2.11 Score per residue for model 11

• Molecule 1: Full-Length Transmembrane Domains of Human Glycine Receptor alpha1 Subunit

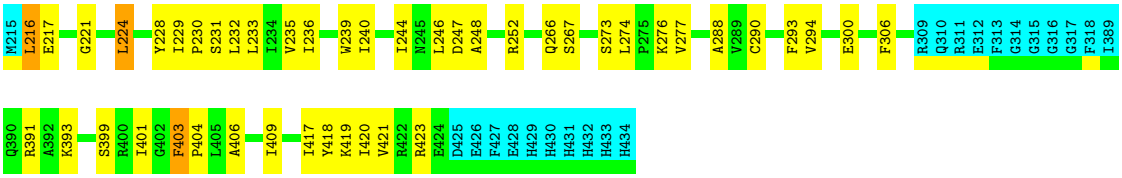
Chain A: 54% 29% • 15%



4.2.12 Score per residue for model 12

• Molecule 1: Full-Length Transmembrane Domains of Human Glycine Receptor alpha1 Subunit

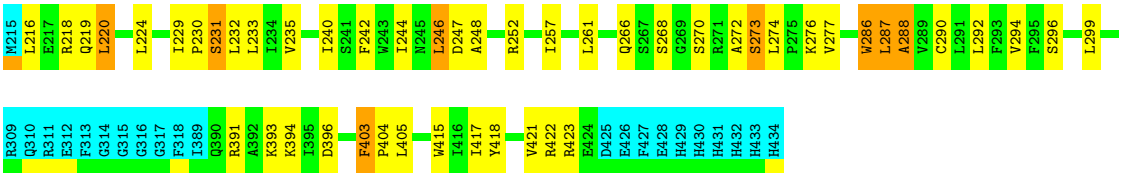
Chain A: 55% 28% • 15%



4.2.13 Score per residue for model 13

• Molecule 1: Full-Length Transmembrane Domains of Human Glycine Receptor alpha1 Subunit

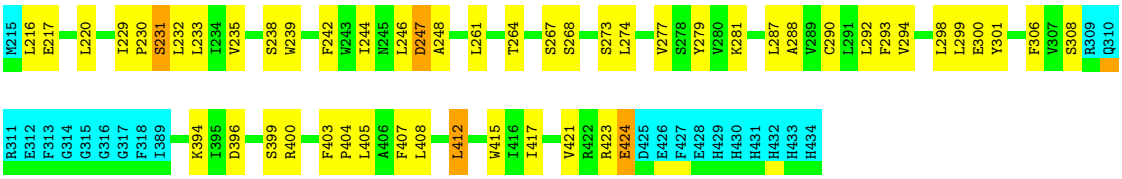
Chain A: 53% 27% 5% 15%



4.2.14 Score per residue for model 14

• Molecule 1: Full-Length Transmembrane Domains of Human Glycine Receptor alpha1 Subunit

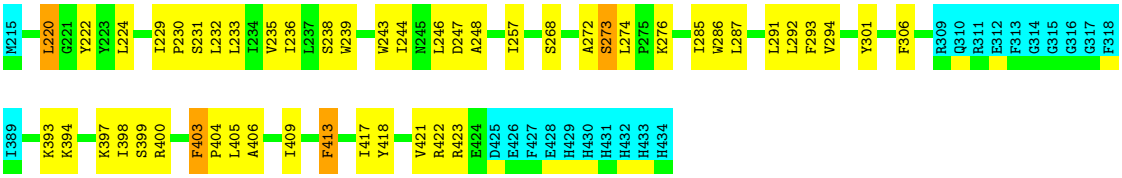
Chain A: 51% 32% • 15%



4.2.15 Score per residue for model 15

• Molecule 1: Full-Length Transmembrane Domains of Human Glycine Receptor alpha1 Subunit

Chain A: 53% 30% • 15%



5 Refinement protocol and experimental data overview (i)

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

Of the 100 calculated structures, 15 were deposited, based on the following criterion: *target function*.

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

Software name	Classification	Version
CYANA	refinement	3.0

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	1145
Number of shifts mapped to atoms	1145
Number of unparsed shifts	0
Number of shifts with mapping errors	0
Number of shifts with mapping warnings	0
Assignment completeness (well-defined parts)	53%

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	1038	1103	1103	16±3
All	All	15570	16545	16545	237

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 7.

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

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:220:LEU:HD22	1:A:274:LEU:HD11	0.93	1.39	8	1
1:A:236:ILE:HD11	1:A:406:ALA:HB1	0.80	1.52	6	2
1:A:220:LEU:HD13	1:A:274:LEU:HD11	0.80	1.54	2	1
1:A:220:LEU:HD22	1:A:274:LEU:HD13	0.78	1.54	3	1
1:A:227:LEU:HD21	1:A:263:LEU:HD22	0.77	1.55	3	1
1:A:227:LEU:HD11	1:A:263:LEU:HD12	0.73	1.61	5	1
1:A:220:LEU:HD11	1:A:272:ALA:HB3	0.70	1.64	13	2
1:A:279:TYR:CZ	1:A:283:ILE:HD11	0.68	2.23	5	2
1:A:236:ILE:HG23	1:A:406:ALA:HB1	0.67	1.65	2	4
1:A:220:LEU:HD23	1:A:271:ARG:HD3	0.64	1.69	8	1
1:A:242:PHE:CE2	1:A:246:LEU:HD12	0.62	2.29	9	3
1:A:236:ILE:HD12	1:A:406:ALA:HB1	0.62	1.72	15	2
1:A:242:PHE:CZ	1:A:246:LEU:HD12	0.61	2.30	13	7
1:A:221:GLY:HA2	1:A:224:LEU:HD23	0.61	1.71	12	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:280:VAL:HA	1:A:283:ILE:HD12	0.61	1.72	3	1
1:A:218:ARG:CD	1:A:277:VAL:HG11	0.60	2.25	7	1
1:A:227:LEU:HD11	1:A:263:LEU:CD1	0.60	2.26	5	1
1:A:242:PHE:CE1	1:A:246:LEU:HD12	0.59	2.32	11	2
1:A:231:SER:O	1:A:235:VAL:HG23	0.59	1.98	14	14
1:A:216:LEU:HD13	1:A:219:GLN:NE2	0.58	2.13	9	1
1:A:220:LEU:HD13	1:A:274:LEU:HD21	0.57	1.76	2	1
1:A:232:LEU:HD13	1:A:413:PHE:CD2	0.57	2.35	10	3
1:A:220:LEU:HD13	1:A:274:LEU:CD1	0.57	2.29	2	1
1:A:253:VAL:O	1:A:257:ILE:HG23	0.56	1.99	5	3
1:A:239:TRP:CZ3	1:A:398:ILE:HG22	0.56	2.34	8	1
1:A:417:ILE:O	1:A:421:VAL:HG23	0.55	2.02	10	14
1:A:243:TRP:HA	1:A:398:ILE:HG21	0.55	1.78	2	1
1:A:220:LEU:HD22	1:A:273:SER:OG	0.55	2.02	15	1
1:A:274:LEU:HD12	1:A:277:VAL:CG1	0.54	2.32	8	1
1:A:273:SER:O	1:A:277:VAL:HG22	0.54	2.03	13	1
1:A:243:TRP:HB3	1:A:398:ILE:HD11	0.54	1.79	8	2
1:A:232:LEU:HD13	1:A:413:PHE:CG	0.53	2.38	15	3
1:A:244:ILE:O	1:A:248:ALA:HB3	0.53	2.03	9	14
1:A:225:ILE:HG12	1:A:417:ILE:HD11	0.53	1.80	8	1
1:A:243:TRP:HB2	1:A:398:ILE:HG21	0.53	1.79	5	1
1:A:224:LEU:O	1:A:224:LEU:HD12	0.53	2.03	4	2
1:A:236:ILE:CD1	1:A:406:ALA:HB1	0.53	2.33	5	1
1:A:236:ILE:HG23	1:A:406:ALA:CB	0.52	2.35	2	3
1:A:220:LEU:HD13	1:A:273:SER:N	0.52	2.19	13	2
1:A:217:GLU:CG	1:A:274:LEU:HD22	0.52	2.35	7	1
1:A:285:ILE:O	1:A:289:VAL:HG13	0.51	2.05	4	2
1:A:220:LEU:HD22	1:A:273:SER:HB2	0.51	1.81	13	1
1:A:243:TRP:HA	1:A:398:ILE:HD13	0.51	1.80	5	1
1:A:246:LEU:HD23	1:A:247:ASP:HB2	0.51	1.83	8	2
1:A:236:ILE:CG2	1:A:406:ALA:HB1	0.51	2.36	7	3
1:A:288:ALA:O	1:A:292:LEU:HD12	0.51	2.06	13	1
1:A:279:TYR:CE1	1:A:283:ILE:HD11	0.50	2.42	4	2
1:A:232:LEU:HD11	1:A:409:ILE:CG2	0.49	2.36	12	1
1:A:232:LEU:HD11	1:A:410:PHE:HA	0.49	1.83	9	1
1:A:217:GLU:HG3	1:A:220:LEU:HD12	0.49	1.83	6	1
1:A:229:ILE:N	1:A:230:PRO:HD2	0.49	2.23	1	15
1:A:217:GLU:HG3	1:A:277:VAL:HG11	0.48	1.83	14	1
1:A:291:LEU:O	1:A:291:LEU:HD12	0.48	2.08	8	2
1:A:273:SER:CB	1:A:274:LEU:HD23	0.48	2.39	9	2
1:A:246:LEU:O	1:A:246:LEU:HD23	0.47	2.09	7	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:275:PRO:HB2	1:A:277:VAL:HG23	0.47	1.85	3	1
1:A:232:LEU:O	1:A:232:LEU:HD13	0.47	2.09	5	1
1:A:260:VAL:HA	1:A:263:LEU:HD23	0.47	1.85	10	2
1:A:273:SER:C	1:A:274:LEU:HD23	0.47	2.31	8	5
1:A:218:ARG:NE	1:A:277:VAL:HG11	0.47	2.25	9	3
1:A:236:ILE:HD13	1:A:406:ALA:HB1	0.47	1.86	4	1
1:A:220:LEU:HD21	1:A:273:SER:CB	0.47	2.40	7	1
1:A:220:LEU:HD23	1:A:273:SER:HB3	0.46	1.87	10	1
1:A:403:PHE:CB	1:A:404:PRO:CD	0.46	2.94	13	15
1:A:279:TYR:CE2	1:A:283:ILE:HD11	0.46	2.45	5	1
1:A:227:LEU:HD21	1:A:263:LEU:CD1	0.46	2.40	11	1
1:A:232:LEU:HD21	1:A:413:PHE:CE1	0.46	2.46	6	1
1:A:220:LEU:HD22	1:A:274:LEU:CD1	0.46	2.25	8	2
1:A:412:LEU:O	1:A:412:LEU:HD12	0.46	2.10	6	1
1:A:220:LEU:HD13	1:A:271:ARG:HH11	0.46	1.70	6	1
1:A:220:LEU:HD23	1:A:271:ARG:CD	0.46	2.39	8	1
1:A:232:LEU:HD23	1:A:413:PHE:CD2	0.46	2.46	5	1
1:A:274:LEU:HD12	1:A:277:VAL:HG12	0.45	1.88	2	2
1:A:253:VAL:O	1:A:257:ILE:HG22	0.45	2.11	11	1
1:A:220:LEU:CD2	1:A:274:LEU:HD13	0.45	2.36	3	1
1:A:216:LEU:HD12	1:A:273:SER:OG	0.45	2.12	12	1
1:A:251:ALA:O	1:A:255:LEU:HD12	0.45	2.11	11	2
1:A:273:SER:HB2	1:A:274:LEU:HD23	0.44	1.89	9	1
1:A:232:LEU:HD11	1:A:413:PHE:CD2	0.44	2.46	1	1
1:A:403:PHE:N	1:A:404:PRO:HD2	0.44	2.28	15	15
1:A:232:LEU:HD11	1:A:409:ILE:HG23	0.43	1.90	15	1
1:A:220:LEU:HD13	1:A:220:LEU:O	0.43	2.14	10	1
1:A:217:GLU:HG3	1:A:277:VAL:HG21	0.43	1.90	10	2
1:A:220:LEU:CD1	1:A:274:LEU:HD11	0.43	2.36	2	1
1:A:220:LEU:CD1	1:A:274:LEU:HD21	0.42	2.43	2	1
1:A:420:ILE:HD13	1:A:423:ARG:HD3	0.42	1.92	12	1
1:A:286:TRP:HB3	1:A:287:LEU:HD23	0.42	1.90	13	1
1:A:220:LEU:HD13	1:A:274:LEU:CD2	0.42	2.45	2	1
1:A:243:TRP:HB3	1:A:398:ILE:HG21	0.42	1.92	15	1
1:A:242:PHE:CD2	1:A:398:ILE:HD13	0.42	2.49	4	1
1:A:232:LEU:HD23	1:A:413:PHE:CE2	0.41	2.50	5	1
1:A:220:LEU:CD1	1:A:272:ALA:HB3	0.41	2.42	13	1
1:A:276:LYS:O	1:A:280:VAL:HG23	0.41	2.15	9	1
1:A:239:TRP:CZ3	1:A:398:ILE:HD11	0.41	2.51	2	1
1:A:229:ILE:HG22	1:A:230:PRO:N	0.41	2.31	13	7
1:A:216:LEU:HD22	1:A:219:GLN:NE2	0.41	2.31	13	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:220:LEU:HD13	1:A:273:SER:HB3	0.41	1.91	14	1
1:A:239:TRP:HZ3	1:A:398:ILE:HD11	0.41	1.74	2	1
1:A:408:LEU:O	1:A:412:LEU:HD23	0.41	2.15	14	1
1:A:220:LEU:CD2	1:A:274:LEU:HD11	0.41	2.29	8	1
1:A:239:TRP:CH2	1:A:401:ILE:HG23	0.41	2.51	12	1
1:A:395:ILE:HG22	1:A:398:ILE:CD1	0.40	2.46	6	1
1:A:229:ILE:CB	1:A:230:PRO:CD	0.40	3.00	10	2

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	128/150 (85%)	120±2 (94±1%)	6±1 (4±1%)	2±1 (2±1%)	13	56
All	All	1920/2250 (85%)	1803 (94%)	85 (4%)	32 (2%)	13	56

All 6 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	247	ASP	15
1	A	288	ALA	11
1	A	424	GLU	2
1	A	276	LYS	2
1	A	395	ILE	1
1	A	396	ASP	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	112/130 (86%)	85±4 (76±4%)	27±4 (24±4%)	2 26
All	All	1680/1950 (86%)	1277 (76%)	403 (24%)	2 26

All 78 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	274	LEU	15
1	A	403	PHE	14
1	A	294	VAL	12
1	A	423	ARG	10
1	A	268	SER	10
1	A	394	LYS	9
1	A	233	LEU	9
1	A	261	LEU	9
1	A	290	CYS	9
1	A	220	LEU	8
1	A	301	TYR	8
1	A	400	ARG	8
1	A	397	LYS	8
1	A	399	SER	8
1	A	418	TYR	8
1	A	284	ASP	7
1	A	391	ARG	7
1	A	266	GLN	7
1	A	276	LYS	7
1	A	293	PHE	7
1	A	306	PHE	7
1	A	216	LEU	7
1	A	252	ARG	7
1	A	267	SER	7
1	A	405	LEU	7
1	A	237	LEU	6
1	A	246	LEU	6
1	A	300	GLU	6
1	A	224	LEU	6
1	A	238	SER	6
1	A	292	LEU	6
1	A	217	GLU	5
1	A	218	ARG	5
1	A	222	TYR	5
1	A	239	TRP	5
1	A	285	ILE	5

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	299	LEU	5
1	A	413	PHE	5
1	A	286	TRP	5
1	A	408	LEU	5
1	A	281	LYS	5
1	A	419	LYS	5
1	A	422	ARG	5
1	A	296	SER	5
1	A	287	LEU	5
1	A	263	LEU	4
1	A	226	GLN	4
1	A	231	SER	4
1	A	271	ARG	4
1	A	298	LEU	4
1	A	308	SER	4
1	A	232	LEU	4
1	A	415	TRP	4
1	A	393	LYS	4
1	A	241	SER	3
1	A	396	ASP	3
1	A	240	ILE	3
1	A	255	LEU	3
1	A	407	PHE	3
1	A	411	ASN	3
1	A	398	ILE	2
1	A	234	ILE	2
1	A	410	PHE	2
1	A	223	TYR	2
1	A	247	ASP	2
1	A	424	GLU	2
1	A	278	SER	2
1	A	305	ASN	2
1	A	257	ILE	2
1	A	273	SER	2
1	A	401	ILE	1
1	A	227	LEU	1
1	A	395	ILE	1
1	A	228	TYR	1
1	A	270	SER	1
1	A	264	THR	1
1	A	279	TYR	1
1	A	412	LEU	1

6.3.3 RNA (i)

There are no RNA molecules in this entry.

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

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

6.5 Carbohydrates (i)

There are no 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 53% for the well-defined parts and 52% for the entire structure.

7.1 Chemical shift list 1

File name: working_cs.cif

Chemical shift list name: *assigned_chem_shift_list_1*

7.1.1 Bookkeeping (i)

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

Total number of shifts	1145
Number of shifts mapped to atoms	1145
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
$^{13}C_{\alpha}$	133	-0.26 ± 0.22	None needed (< 0.5 ppm)
$^{13}C_{\beta}$	112	0.29 ± 0.10	None needed (< 0.5 ppm)
$^{13}C'$	18	—	None (insufficient data)
^{15}N	146	0.92 ± 0.20	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 53%, i.e. 1014 atoms were assigned a chemical shift out of a possible 1897. 0 out of 30 assigned methyl groups (LEU and VAL) were assigned stereospecifically.

	Total	^{1}H	^{13}C	^{15}N
Backbone	480/637 (75%)	229/257 (89%)	127/256 (50%)	124/124 (100%)
Sidechain	519/1069 (49%)	397/712 (56%)	114/323 (35%)	8/34 (24%)

Continued on next page...

Continued from previous page...

	Total	^{1}H	^{13}C	^{15}N
Aromatic	15/191 (8%)	15/92 (16%)	0/95 (0%)	0/4 (0%)
Overall	1014/1897 (53%)	641/1061 (60%)	241/674 (36%)	132/162 (81%)

The following table shows the completeness of the chemical shift assignments for the full structure. The overall completeness is 52%, i.e. 1144 atoms were assigned a chemical shift out of a possible 2204. 0 out of 30 assigned methyl groups (LEU and VAL) were assigned stereospecifically.

	Total	^{1}H	^{13}C	^{15}N
Backbone	566/751 (75%)	269/305 (88%)	151/300 (50%)	146/146 (100%)
Sidechain	561/1190 (47%)	420/788 (53%)	132/361 (37%)	9/41 (22%)
Aromatic	17/263 (6%)	17/131 (13%)	0/122 (0%)	0/10 (0%)
Overall	1144/2204 (52%)	706/1224 (58%)	283/783 (36%)	155/197 (79%)

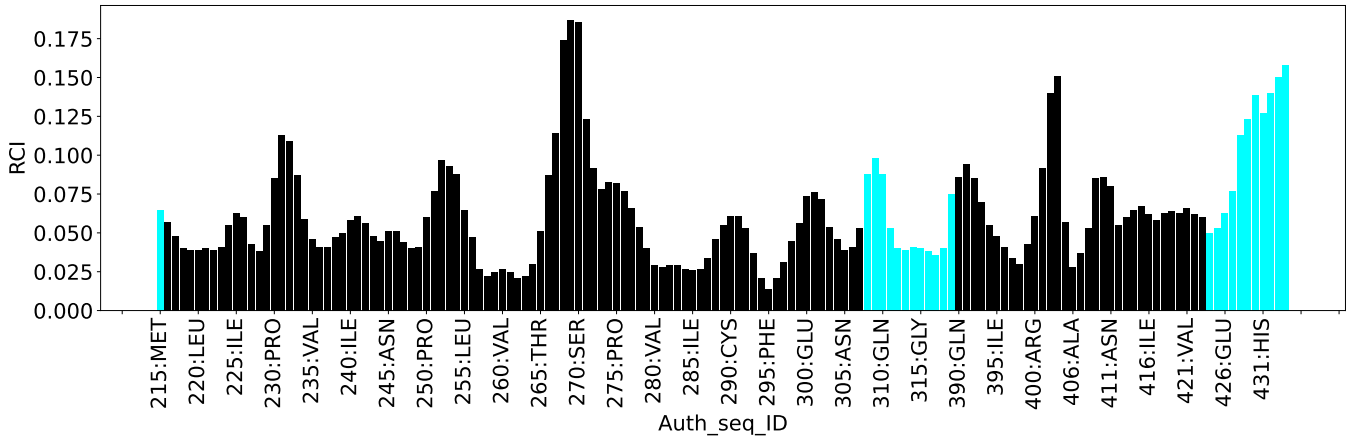
7.1.4 Statistically unusual chemical shifts (i)

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	1437
Intra-residue (|i-j|=0)	320
Sequential (|i-j|=1)	341
Medium range (|i-j|>1 and |i-j|<5)	320
Long range (|i-j|≥5)	244
Inter-chain	0
Hydrogen bond restraints	212
Disulfide bond restraints	0
Total dihedral-angle restraints	0
Number of unmapped restraints	5
Number of restraints per residue	9.6
Number of long range restraints per residue[1]	1.6

[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)	7.7	0.2
0.2-0.5 (Medium)	25.3	0.5
>0.5 (Large)	113.3	23.39

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

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

9 Distance violation analysis (i)

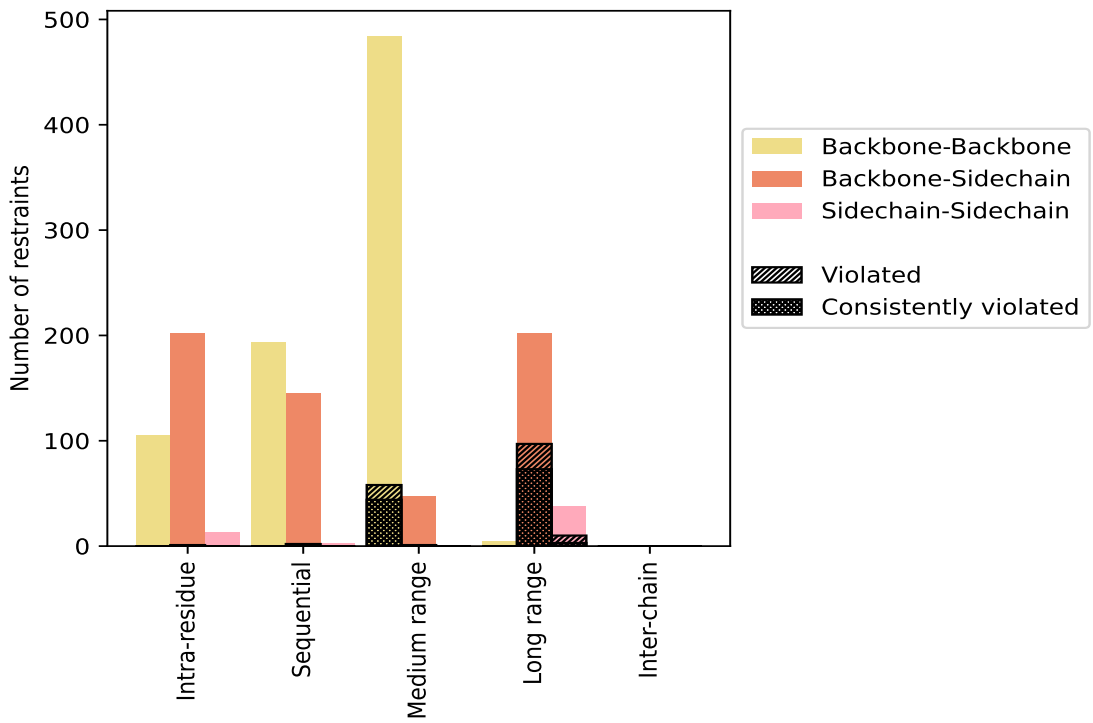
9.1 Summary of distance violations (i)

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

Restraints type	Count	%[1]	Violated[3]			Consistently Violated[4]		
			Count	%[2]	%[1]	Count	%[2]	%[1]
Intra-residue (|i-j|=0)	320	22.3	1	0.3	0.1	0	0.0	0.0
Backbone-Backbone	105	7.3	0	0.0	0.0	0	0.0	0.0
Backbone-Sidechain	202	14.1	1	0.5	0.1	0	0.0	0.0
Sidechain-Sidechain	13	0.9	0	0.0	0.0	0	0.0	0.0
Sequential (|i-j|=1)	341	23.7	2	0.6	0.1	0	0.0	0.0
Backbone-Backbone	193	13.4	0	0.0	0.0	0	0.0	0.0
Backbone-Sidechain	145	10.1	2	1.4	0.1	0	0.0	0.0
Sidechain-Sidechain	3	0.2	0	0.0	0.0	0	0.0	0.0
Medium range (|i-j|>1 & |i-j|<5)	320	22.3	6	1.9	0.4	1	0.3	0.1
Backbone-Backbone	272	18.9	5	1.8	0.3	1	0.4	0.1
Backbone-Sidechain	47	3.3	1	2.1	0.1	0	0.0	0.0
Sidechain-Sidechain	1	0.1	0	0.0	0.0	0	0.0	0.0
Long range (|i-j|≥5)	244	17.0	107	43.9	7.4	76	31.1	5.3
Backbone-Backbone	4	0.3	0	0.0	0.0	0	0.0	0.0
Backbone-Sidechain	202	14.1	97	48.0	6.8	73	36.1	5.1
Sidechain-Sidechain	38	2.6	10	26.3	0.7	3	7.9	0.2
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	212	14.8	53	25.0	3.7	43	20.3	3.0
Disulfide bond	0	0.0	0	0.0	0.0	0	0.0	0.0
Total	1437	100.0	169	11.8	11.8	120	8.4	8.4
Backbone-Backbone	786	54.7	58	7.4	4.0	44	5.6	3.1
Backbone-Sidechain	596	41.5	101	16.9	7.0	73	12.2	5.1
Sidechain-Sidechain	55	3.8	10	18.2	0.7	3	5.5	0.2

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

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



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

9.2 Distance violation statistics for each model (i)

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

Model ID	Number of violations						Mean (Å)	Max (Å)	SD[6] (Å)	Median (Å)
	IR[1]	SQ[2]	MR[3]	LR[4]	IC[5]	Total				
1	0	0	48	98	0	146	2.71	20.41	3.47	1.44
2	0	1	51	93	0	145	2.44	21.85	3.43	0.9
3	0	1	50	95	0	146	2.46	18.22	3.32	1.22
4	0	0	49	98	0	147	2.65	18.18	3.39	1.25
5	0	0	51	98	0	149	2.76	22.18	3.53	1.14
6	0	1	50	99	0	150	2.77	20.23	3.52	1.4
7	0	0	52	92	0	144	2.56	23.39	3.43	1.16
8	0	0	49	96	0	145	2.54	21.72	3.46	1.27
9	1	0	49	92	0	142	2.43	23.17	3.48	0.84
10	0	1	51	94	0	146	2.58	18.43	3.31	1.18
11	0	1	54	92	0	147	2.36	20.67	3.3	0.78

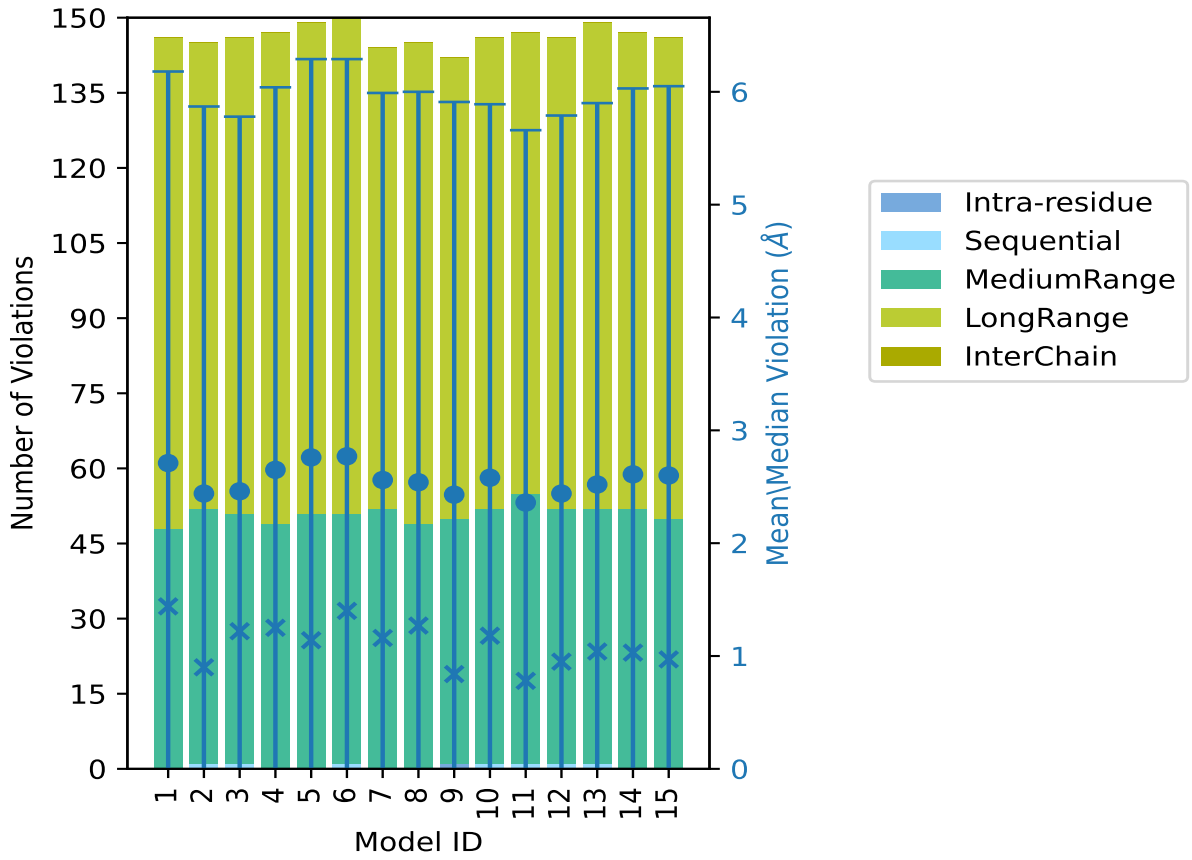
Continued on next page...

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	0	1	51	94	0	146	2.44	22.69	3.35	0.95
13	0	1	51	97	0	149	2.52	19.65	3.38	1.04
14	0	0	52	95	0	147	2.61	18.97	3.42	1.03
15	0	0	50	96	0	146	2.6	19.79	3.45	0.97

[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)

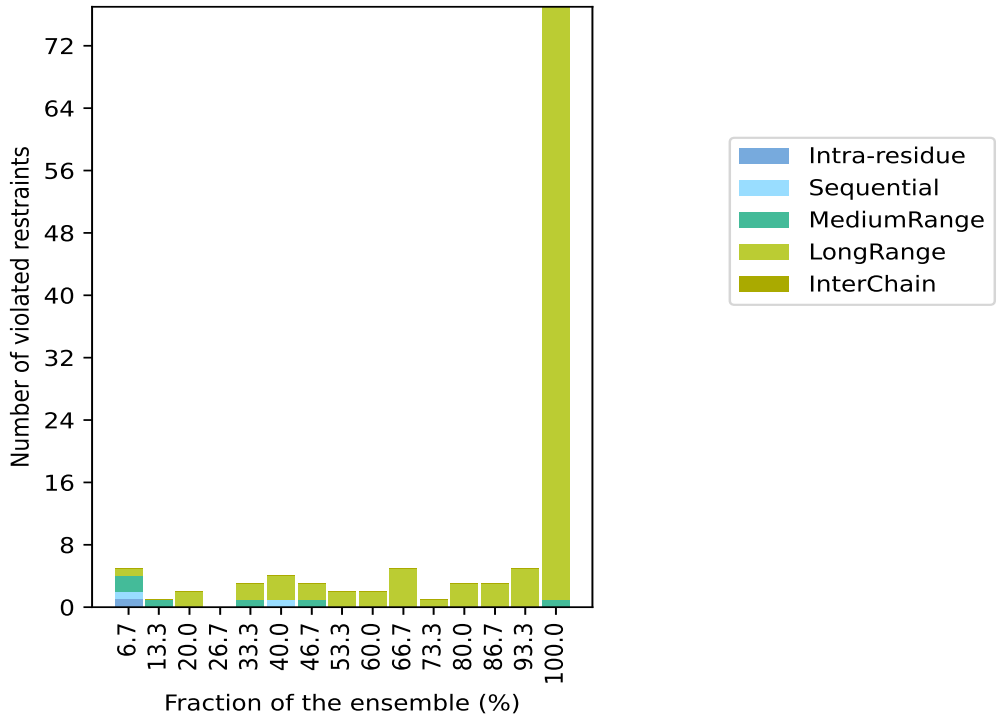
Violation analysis may find that some restraints are violated in few models and some are violated in most of models. The following table provides this information as number of violated restraints for

a given fraction of the ensemble. In total, 1109(IR:319, SQ:339, MR:314, LR:137, 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]	%
1	1	2	1	0	5	1	6.7
0	0	1	0	0	1	2	13.3
0	0	0	2	0	2	3	20.0
0	0	0	0	0	0	4	26.7
0	0	1	2	0	3	5	33.3
0	1	0	3	0	4	6	40.0
0	0	1	2	0	3	7	46.7
0	0	0	2	0	2	8	53.3
0	0	0	2	0	2	9	60.0
0	0	0	5	0	5	10	66.7
0	0	0	1	0	1	11	73.3
0	0	0	3	0	3	12	80.0
0	0	0	3	0	3	13	86.7
0	0	0	5	0	5	14	93.3
0	0	1	76	0	77	15	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

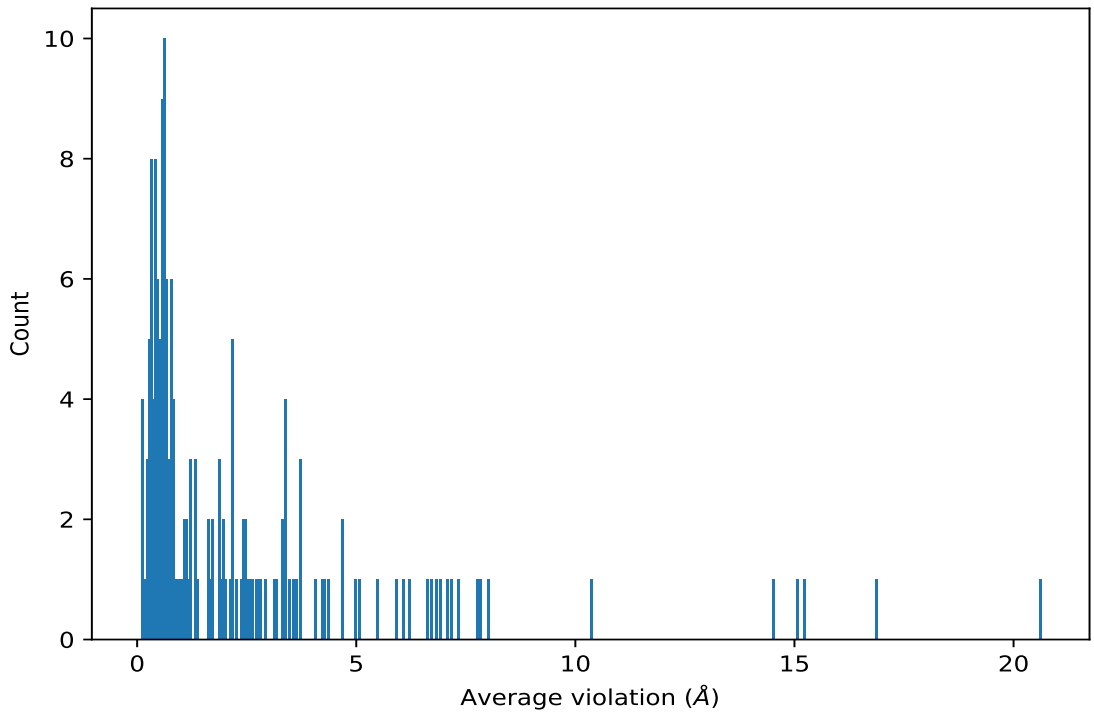
9.3.1 Bar graph : Distance violation statistics for the ensemble (i)



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)
(4,194)	1:A:308:SER:HG	1:A:430:HIS:H	15	20.63	1.74	20.41
(4,186)	1:A:308:SER:HG	1:A:216:LEU:H	15	16.88	1.01	16.99
(4,187)	1:A:308:SER:HG	1:A:217:GLU:H	15	15.24	0.55	15.41
(4,193)	1:A:308:SER:HG	1:A:426:GLU:H	15	15.07	0.8	14.77
(4,188)	1:A:308:SER:HG	1:A:218:ARG:H	15	14.53	0.56	14.48
(4,189)	1:A:308:SER:HG	1:A:221:GLY:H	15	10.37	0.48	10.43
(4,141)	1:A:296:SER:HG	1:A:219:GLN:H	15	8.02	0.02	8.02
(4,131)	1:A:290:CYS:HG	1:A:397:LYS:H	15	7.83	0.43	8.0
(4,170)	1:A:308:SER:HG	1:A:288:ALA:H	15	7.75	0.39	7.97
(4,190)	1:A:308:SER:HG	1:A:224:LEU:H	15	7.31	0.49	7.38
(4,140)	1:A:290:CYS:HG	1:A:434:HIS:H	15	7.15	0.82	7.47
(4,192)	1:A:308:SER:HG	1:A:279:TYR:H	15	7.07	0.85	6.9
(4,159)	1:A:296:SER:HG	1:A:427:PHE:H	15	6.91	0.9	6.87
(4,191)	1:A:308:SER:HG	1:A:225:ILE:H	15	6.83	0.44	6.87
(4,123)	1:A:290:CYS:HG	1:A:314:GLY:H	15	6.71	0.8	6.76
(4,164)	1:A:308:SER:HG	1:A:236:ILE:H	15	6.61	0.52	6.56

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models[1]	Mean (Å)	SD[1] (Å)	Median (Å)
(4,133)	1:A:290:CYS:HG	1:A:400:ARG:H	15	6.24	0.68	5.92
(4,185)	1:A:308:SER:HG	1:A:418:TYR:H	15	6.09	0.26	6.13
(4,213)	1:A:308:SER:HG	1:A:252:ARG:H	15	5.9	1.21	5.91
(4,161)	1:A:308:SER:HG	1:A:229:ILE:H	15	5.46	0.44	5.38
(4,165)	1:A:308:SER:HG	1:A:238:SER:H	15	5.07	0.54	5.01
(4,179)	1:A:308:SER:HG	1:A:401:ILE:H	15	4.95	0.24	5.03
(4,201)	1:A:290:CYS:HG	1:A:310:GLN:HE21	15	4.67	0.7	4.83
(4,201)	1:A:290:CYS:HG	1:A:310:GLN:HE22	15	4.67	0.7	4.83
(4,215)	1:A:308:SER:HG	1:A:256:GLY:H	15	4.39	0.86	4.41
(4,124)	1:A:290:CYS:HG	1:A:315:GLY:H	15	4.29	0.57	4.17
(4,178)	1:A:308:SER:HG	1:A:400:ARG:H	15	4.22	0.48	4.14
(4,180)	1:A:308:SER:HG	1:A:403:PHE:H	15	4.06	0.27	3.97
(4,184)	1:A:308:SER:HG	1:A:417:ILE:H	15	3.74	0.17	3.73
(4,146)	1:A:296:SER:HG	1:A:278:SER:H	15	3.74	0.28	3.83
(4,130)	1:A:290:CYS:HG	1:A:396:ASP:H	15	3.71	0.38	3.77
(4,113)	1:A:290:CYS:HG	1:A:243:TRP:H	15	3.62	0.21	3.59
(4,214)	1:A:308:SER:HG	1:A:253:VAL:H	15	3.55	1.05	3.45
(4,167)	1:A:308:SER:HG	1:A:241:SER:H	15	3.48	0.63	3.2
(4,204)	1:A:296:SER:HG	1:A:390:GLN:HE21	15	3.37	0.83	3.29
(4,204)	1:A:296:SER:HG	1:A:390:GLN:HE22	15	3.37	0.83	3.29
(4,132)	1:A:290:CYS:HG	1:A:398:ILE:H	15	3.36	0.63	3.23
(4,119)	1:A:290:CYS:HG	1:A:306:PHE:H	15	3.33	0.07	3.32
(4,143)	1:A:296:SER:HG	1:A:226:GLN:H	15	3.32	0.36	3.35
(4,173)	1:A:308:SER:HG	1:A:297:ALA:H	15	3.15	0.14	3.15
(4,144)	1:A:296:SER:HG	1:A:227:LEU:H	15	2.91	0.36	2.9
(4,134)	1:A:290:CYS:HG	1:A:403:PHE:H	15	2.83	0.76	2.41
(4,127)	1:A:290:CYS:HG	1:A:318:PHE:H	15	2.75	0.92	2.5
(4,142)	1:A:296:SER:HG	1:A:223:TYR:H	15	2.7	0.2	2.67
(4,111)	1:A:290:CYS:HG	1:A:221:GLY:H	15	2.62	0.31	2.6
(4,183)	1:A:308:SER:HG	1:A:416:ILE:H	15	2.57	0.24	2.43
(4,139)	1:A:290:CYS:HG	1:A:428:GLU:H	15	2.54	0.8	2.6
(4,156)	1:A:296:SER:HG	1:A:317:GLY:H	15	2.47	1.82	1.91
(4,148)	1:A:296:SER:HG	1:A:280:VAL:H	15	2.45	0.26	2.45
(4,209)	1:A:296:SER:HG	1:A:263:LEU:H	15	2.4	0.19	2.37
(4,160)	1:A:296:SER:HG	1:A:428:GLU:H	15	2.36	0.61	2.44
(4,162)	1:A:308:SER:HG	1:A:231:SER:H	15	2.27	0.48	2.21
(4,182)	1:A:308:SER:HG	1:A:415:TRP:H	15	2.18	0.31	2.12
(4,163)	1:A:308:SER:HG	1:A:233:LEU:H	15	2.17	0.48	2.15
(4,110)	1:A:290:CYS:HG	1:A:220:LEU:H	15	2.15	0.36	2.07
(4,109)	1:A:290:CYS:HG	1:A:219:GLN:H	15	2.01	0.3	2.01
(4,168)	1:A:308:SER:HG	1:A:242:PHE:H	15	1.98	0.64	1.68
(4,212)	1:A:296:SER:HG	1:A:271:ARG:H	15	1.96	0.89	1.59

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models[1]	Mean (Å)	SD[1] (Å)	Median (Å)
(4,181)	1:A:308:SER:HG	1:A:411:ASN:H	15	1.86	0.09	1.85
(4,155)	1:A:296:SER:HG	1:A:316:GLY:H	15	1.86	1.2	1.39
(4,152)	1:A:296:SER:HG	1:A:284:ASP:H	15	1.74	0.47	1.51
(4,128)	1:A:290:CYS:HG	1:A:390:GLN:H	15	1.72	0.53	1.67
(4,217)	1:A:308:SER:HG	1:A:260:VAL:H	15	1.65	0.58	1.69
(4,122)	1:A:290:CYS:HG	1:A:312:GLU:H	15	1.63	0.76	1.5
(4,147)	1:A:296:SER:HG	1:A:279:TYR:H	15	1.39	0.44	1.4
(4,216)	1:A:308:SER:HG	1:A:257:ILE:H	15	1.33	0.74	1.4
(4,171)	1:A:308:SER:HG	1:A:291:LEU:H	15	1.24	0.3	1.27
(4,150)	1:A:296:SER:HG	1:A:282:ALA:H	15	1.22	0.22	1.22
(4,151)	1:A:296:SER:HG	1:A:283:ILE:H	15	1.21	0.36	1.17
(4,145)	1:A:296:SER:HG	1:A:277:VAL:H	15	1.17	0.29	1.23
(4,149)	1:A:296:SER:HG	1:A:281:LYS:H	15	1.14	0.48	1.01
(4,136)	1:A:290:CYS:HG	1:A:419:LYS:H	15	1.07	0.42	1.11
(4,166)	1:A:308:SER:HG	1:A:239:TRP:H	15	0.91	0.55	0.81
(4,211)	1:A:296:SER:HG	1:A:267:SER:H	15	0.81	0.17	0.87
(4,196)	1:A:290:CYS:HG	1:A:219:GLN:HE21	15	0.79	0.28	0.78
(4,196)	1:A:290:CYS:HG	1:A:219:GLN:HE22	15	0.79	0.28	0.78
(2,14)	1:A:236:ILE:O	1:A:240:ILE:N	15	0.78	0.01	0.78
(2,33)	1:A:292:LEU:O	1:A:296:SER:N	15	0.77	0.01	0.78
(2,3)	1:A:222:TYR:O	1:A:226:GLN:N	15	0.77	0.01	0.77
(2,39)	1:A:300:GLU:O	1:A:304:VAL:N	15	0.76	0.03	0.77
(2,53)	1:A:414:TYR:O	1:A:418:TYR:N	15	0.71	0.05	0.72
(2,25)	1:A:261:LEU:O	1:A:265:THR:N	15	0.69	0.03	0.71
(2,11)	1:A:232:LEU:O	1:A:236:ILE:N	15	0.69	0.12	0.73
(2,48)	1:A:405:LEU:O	1:A:409:ILE:N	15	0.68	0.03	0.67
(2,7)	1:A:227:LEU:O	1:A:231:SER:N	15	0.65	0.04	0.66
(2,6)	1:A:225:ILE:O	1:A:229:ILE:N	15	0.65	0.01	0.66
(2,32)	1:A:290:CYS:O	1:A:294:VAL:N	15	0.64	0.06	0.61
(2,27)	1:A:276:LYS:O	1:A:280:VAL:N	15	0.64	0.19	0.74
(2,12)	1:A:233:LEU:O	1:A:237:LEU:N	15	0.62	0.05	0.6
(2,16)	1:A:239:TRP:O	1:A:243:TRP:N	15	0.61	0.04	0.61
(4,172)	1:A:308:SER:HG	1:A:295:PHE:H	15	0.6	0.21	0.66
(2,21)	1:A:256:GLY:O	1:A:260:VAL:N	15	0.6	0.04	0.59
(2,24)	1:A:260:VAL:O	1:A:264:THR:N	15	0.59	0.04	0.6
(2,42)	1:A:398:ILE:O	1:A:402:GLY:N	15	0.59	0.14	0.63
(2,18)	1:A:251:ALA:O	1:A:255:LEU:N	15	0.58	0.03	0.59
(2,47)	1:A:404:PRO:O	1:A:408:LEU:N	15	0.58	0.06	0.59
(2,36)	1:A:297:ALA:O	1:A:301:TYR:N	15	0.57	0.02	0.57
(2,1)	1:A:220:LEU:O	1:A:224:LEU:N	15	0.56	0.08	0.53
(2,26)	1:A:262:THR:O	1:A:266:GLN:N	15	0.55	0.04	0.55
(2,4)	1:A:223:TYR:O	1:A:227:LEU:N	15	0.53	0.03	0.52

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models[1]	Mean (Å)	SD[1] (Å)	Median (Å)
(2,52)	1:A:410:PHE:O	1:A:414:TYR:N	15	0.53	0.06	0.54
(2,44)	1:A:401:ILE:O	1:A:405:LEU:N	15	0.51	0.06	0.52
(4,157)	1:A:296:SER:HG	1:A:418:TYR:H	15	0.5	0.31	0.44
(2,23)	1:A:259:THR:O	1:A:263:LEU:N	15	0.47	0.07	0.47
(2,50)	1:A:407:PHE:O	1:A:411:ASN:N	15	0.46	0.07	0.44
(2,20)	1:A:255:LEU:O	1:A:259:THR:N	15	0.45	0.05	0.48
(2,38)	1:A:299:LEU:O	1:A:303:ALA:N	15	0.45	0.06	0.47
(2,46)	1:A:403:PHE:O	1:A:407:PHE:N	15	0.44	0.05	0.44
(2,22)	1:A:258:THR:O	1:A:262:THR:N	15	0.44	0.08	0.5
(2,40)	1:A:302:ALA:O	1:A:306:PHE:N	15	0.44	0.03	0.43
(2,9)	1:A:229:ILE:O	1:A:233:LEU:N	15	0.43	0.06	0.44
(2,13)	1:A:234:ILE:O	1:A:238:SER:N	15	0.4	0.1	0.43
(2,34)	1:A:294:VAL:O	1:A:298:LEU:N	15	0.4	0.09	0.42
(2,41)	1:A:303:ALA:O	1:A:307:VAL:N	15	0.37	0.07	0.39
(2,37)	1:A:298:LEU:O	1:A:302:ALA:N	15	0.35	0.05	0.37
(2,19)	1:A:253:VAL:O	1:A:257:ILE:N	15	0.34	0.1	0.32
(2,49)	1:A:406:ALA:O	1:A:410:PHE:N	15	0.31	0.11	0.29
(2,51)	1:A:409:ILE:O	1:A:413:PHE:N	15	0.29	0.14	0.24
(2,10)	1:A:230:PRO:O	1:A:234:ILE:N	15	0.29	0.06	0.3
(4,114)	1:A:290:CYS:HG	1:A:245:ASN:H	15	0.27	0.09	0.26
(2,5)	1:A:224:LEU:O	1:A:228:TYR:N	15	0.26	0.03	0.26
(2,2)	1:A:221:GLY:O	1:A:225:ILE:N	15	0.2	0.03	0.19
(3,644)	1:A:420:ILE:HA	1:A:422:ARG:H	15	0.12	0.01	0.12
(4,195)	1:A:296:SER:HG	1:A:218:ARG:HE	14	2.11	0.96	2.04
(4,129)	1:A:290:CYS:HG	1:A:394:LYS:H	14	1.61	0.44	1.6
(4,198)	1:A:296:SER:HG	1:A:226:GLN:HE21	14	0.83	0.39	0.82
(4,198)	1:A:296:SER:HG	1:A:226:GLN:HE22	14	0.83	0.39	0.82
(2,28)	1:A:277:VAL:O	1:A:281:LYS:N	14	0.73	0.07	0.76
(4,121)	1:A:290:CYS:HG	1:A:309:ARG:H	14	0.64	0.22	0.62
(2,35)	1:A:295:PHE:O	1:A:299:LEU:N	14	0.49	0.14	0.52
(4,118)	1:A:290:CYS:HG	1:A:305:ASN:H	14	0.39	0.14	0.38
(4,208)	1:A:290:CYS:HG	1:A:271:ARG:H	13	1.88	1.68	1.15
(4,218)	1:A:308:SER:HG	1:A:263:LEU:H	13	1.07	0.46	1.19
(2,43)	1:A:399:SER:O	1:A:403:PHE:N	13	0.51	0.12	0.57
(4,174)	1:A:308:SER:HG	1:A:298:LEU:H	13	0.4	0.14	0.44
(4,153)	1:A:296:SER:HG	1:A:314:GLY:H	12	3.39	2.63	4.8
(4,137)	1:A:290:CYS:HG	1:A:426:GLU:H	12	1.9	0.93	1.72
(4,138)	1:A:290:CYS:HG	1:A:427:PHE:H	12	1.11	0.6	1.0
(2,30)	1:A:279:TYR:O	1:A:283:ILE:N	12	0.46	0.16	0.47
(4,200)	1:A:308:SER:HG	1:A:245:ASN:HD21	11	1.33	0.76	1.27
(4,200)	1:A:308:SER:HG	1:A:245:ASN:HD22	11	1.33	0.76	1.27
(4,125)	1:A:290:CYS:HG	1:A:316:GLY:H	10	1.01	0.3	0.88

Continued on next page...

Continued from previous page...

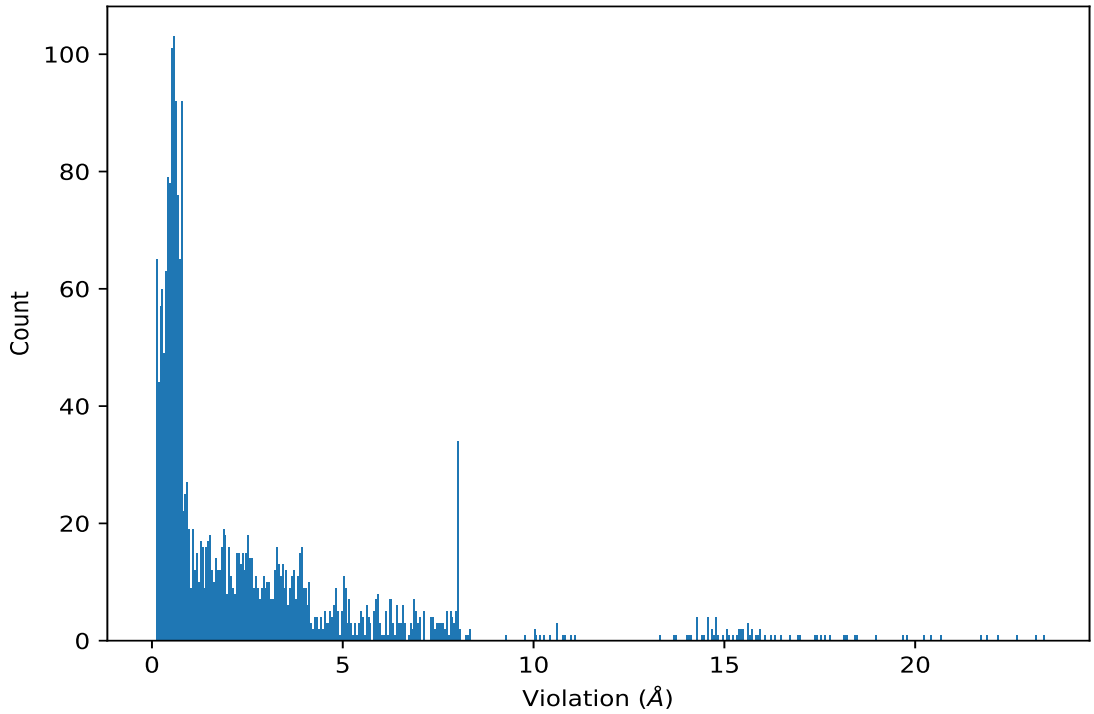
Key	Atom-1	Atom-2	Models[1]	Mean (Å)	SD[1] (Å)	Median (Å)
(4,126)	1:A:290:CYS:HG	1:A:317:GLY:H	10	0.89	0.57	0.98
(4,169)	1:A:308:SER:HG	1:A:243:TRP:H	10	0.8	0.71	0.56
(4,175)	1:A:308:SER:HG	1:A:395:ILE:H	10	0.62	0.79	0.22
(4,158)	1:A:296:SER:HG	1:A:419:LYS:H	10	0.39	0.25	0.3
(4,154)	1:A:296:SER:HG	1:A:315:GLY:H	9	3.12	1.44	3.29
(4,202)	1:A:296:SER:HG	1:A:310:GLN:HE21	9	2.17	1.09	2.5
(4,202)	1:A:296:SER:HG	1:A:310:GLN:HE22	9	2.17	1.09	2.5
(4,207)	1:A:290:CYS:HG	1:A:270:SER:H	8	2.42	1.69	2.88
(4,108)	1:A:290:CYS:HG	1:A:217:GLU:H	8	0.65	0.37	0.57
(2,29)	1:A:278:SER:O	1:A:282:ALA:N	8	0.33	0.14	0.32
(2,15)	1:A:237:LEU:O	1:A:241:SER:N	8	0.23	0.1	0.22
(4,135)	1:A:290:CYS:HG	1:A:418:TYR:H	7	0.73	0.27	0.83
(2,31)	1:A:288:ALA:O	1:A:292:LEU:N	7	0.33	0.17	0.26
(4,112)	1:A:290:CYS:HG	1:A:242:PHE:H	7	0.33	0.15	0.34
(3,965)	1:A:243:TRP:HA	1:A:245:ASN:H	7	0.11	0.0	0.11
(4,177)	1:A:308:SER:HG	1:A:398:ILE:H	6	0.96	0.72	0.94
(4,205)	1:A:290:CYS:HG	1:A:400:ARG:HH21	6	0.6	0.47	0.36
(4,205)	1:A:290:CYS:HG	1:A:400:ARG:HH22	6	0.6	0.47	0.36
(4,115)	1:A:290:CYS:HG	1:A:248:ALA:H	6	0.55	0.19	0.52
(3,485)	1:A:244:ILE:HB	1:A:245:ASN:H	6	0.11	0.0	0.11
(4,116)	1:A:290:CYS:HG	1:A:277:VAL:H	5	0.43	0.17	0.48
(4,117)	1:A:290:CYS:HG	1:A:304:VAL:H	5	0.31	0.1	0.35
(3,694)	1:A:270:SER:HA	1:A:272:ALA:H	5	0.12	0.01	0.11
(4,176)	1:A:308:SER:HG	1:A:396:ASP:H	3	0.58	0.58	0.19
(4,199)	1:A:290:CYS:HG	1:A:226:GLN:HE21	3	0.31	0.26	0.13
(4,199)	1:A:290:CYS:HG	1:A:226:GLN:HE22	3	0.31	0.26	0.13
(2,45)	1:A:402:GLY:O	1:A:406:ALA:N	3	0.29	0.02	0.29
(3,657)	1:A:276:LYS:H	1:A:274:LEU:H	2	0.22	0.0	0.22
(2,8)	1:A:228:TYR:O	1:A:232:LEU:N	2	0.16	0.03	0.16

[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)
(4,194)	1:A:308:SER:HG	1:A:430:HIS:H	7	23.39
(4,194)	1:A:308:SER:HG	1:A:430:HIS:H	9	23.17
(4,194)	1:A:308:SER:HG	1:A:430:HIS:H	12	22.69
(4,194)	1:A:308:SER:HG	1:A:430:HIS:H	5	22.18
(4,194)	1:A:308:SER:HG	1:A:430:HIS:H	2	21.85
(4,194)	1:A:308:SER:HG	1:A:430:HIS:H	8	21.72
(4,194)	1:A:308:SER:HG	1:A:430:HIS:H	11	20.67
(4,194)	1:A:308:SER:HG	1:A:430:HIS:H	1	20.41
(4,194)	1:A:308:SER:HG	1:A:430:HIS:H	6	20.23
(4,194)	1:A:308:SER:HG	1:A:430:HIS:H	15	19.79
(4,194)	1:A:308:SER:HG	1:A:430:HIS:H	13	19.65
(4,194)	1:A:308:SER:HG	1:A:430:HIS:H	14	18.97
(4,186)	1:A:308:SER:HG	1:A:216:LEU:H	8	18.49
(4,194)	1:A:308:SER:HG	1:A:430:HIS:H	10	18.43
(4,186)	1:A:308:SER:HG	1:A:216:LEU:H	3	18.22
(4,194)	1:A:308:SER:HG	1:A:430:HIS:H	4	18.18

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(4,194)	1:A:308:SER:HG	1:A:430:HIS:H	3	18.1
(4,186)	1:A:308:SER:HG	1:A:216:LEU:H	14	17.78
(4,186)	1:A:308:SER:HG	1:A:216:LEU:H	2	17.61
(4,186)	1:A:308:SER:HG	1:A:216:LEU:H	13	17.52
(4,186)	1:A:308:SER:HG	1:A:216:LEU:H	9	17.4
(4,186)	1:A:308:SER:HG	1:A:216:LEU:H	6	17.37
(4,186)	1:A:308:SER:HG	1:A:216:LEU:H	1	16.99
(4,186)	1:A:308:SER:HG	1:A:216:LEU:H	4	16.9
(4,186)	1:A:308:SER:HG	1:A:216:LEU:H	15	16.7
(4,186)	1:A:308:SER:HG	1:A:216:LEU:H	5	16.47
(4,193)	1:A:308:SER:HG	1:A:426:GLU:H	7	16.32
(4,193)	1:A:308:SER:HG	1:A:426:GLU:H	10	16.21
(4,193)	1:A:308:SER:HG	1:A:426:GLU:H	4	16.07
(4,193)	1:A:308:SER:HG	1:A:426:GLU:H	3	15.94
(4,187)	1:A:308:SER:HG	1:A:217:GLU:H	6	15.9
(4,187)	1:A:308:SER:HG	1:A:217:GLU:H	8	15.87
(4,187)	1:A:308:SER:HG	1:A:217:GLU:H	14	15.8
(4,187)	1:A:308:SER:HG	1:A:217:GLU:H	13	15.74
(4,193)	1:A:308:SER:HG	1:A:426:GLU:H	13	15.7
(4,187)	1:A:308:SER:HG	1:A:217:GLU:H	4	15.65
(4,187)	1:A:308:SER:HG	1:A:217:GLU:H	1	15.64
(4,186)	1:A:308:SER:HG	1:A:216:LEU:H	10	15.63
(4,186)	1:A:308:SER:HG	1:A:216:LEU:H	12	15.61
(4,193)	1:A:308:SER:HG	1:A:426:GLU:H	15	15.49
(4,187)	1:A:308:SER:HG	1:A:217:GLU:H	5	15.47
(4,188)	1:A:308:SER:HG	1:A:218:ARG:H	6	15.41
(4,187)	1:A:308:SER:HG	1:A:217:GLU:H	3	15.41
(4,188)	1:A:308:SER:HG	1:A:218:ARG:H	4	15.36
(4,186)	1:A:308:SER:HG	1:A:216:LEU:H	7	15.36
(4,187)	1:A:308:SER:HG	1:A:217:GLU:H	15	15.32
(4,186)	1:A:308:SER:HG	1:A:216:LEU:H	11	15.2
(4,188)	1:A:308:SER:HG	1:A:218:ARG:H	1	15.12
(4,188)	1:A:308:SER:HG	1:A:218:ARG:H	5	15.09
(4,187)	1:A:308:SER:HG	1:A:217:GLU:H	2	15.09
(4,193)	1:A:308:SER:HG	1:A:426:GLU:H	6	14.95
(4,187)	1:A:308:SER:HG	1:A:217:GLU:H	9	14.83
(4,188)	1:A:308:SER:HG	1:A:218:ARG:H	14	14.78
(4,193)	1:A:308:SER:HG	1:A:426:GLU:H	11	14.77
(4,193)	1:A:308:SER:HG	1:A:426:GLU:H	1	14.75
(4,187)	1:A:308:SER:HG	1:A:217:GLU:H	10	14.75
(4,193)	1:A:308:SER:HG	1:A:426:GLU:H	14	14.74
(4,188)	1:A:308:SER:HG	1:A:218:ARG:H	15	14.69

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(4,193)	1:A:308:SER:HG	1:A:426:GLU:H	2	14.68
(4,188)	1:A:308:SER:HG	1:A:218:ARG:H	8	14.58
(4,187)	1:A:308:SER:HG	1:A:217:GLU:H	11	14.58
(4,193)	1:A:308:SER:HG	1:A:426:GLU:H	5	14.55
(4,187)	1:A:308:SER:HG	1:A:217:GLU:H	12	14.55
(4,188)	1:A:308:SER:HG	1:A:218:ARG:H	10	14.48
(4,188)	1:A:308:SER:HG	1:A:218:ARG:H	13	14.42
(4,188)	1:A:308:SER:HG	1:A:218:ARG:H	11	14.29
(4,188)	1:A:308:SER:HG	1:A:218:ARG:H	2	14.27
(4,188)	1:A:308:SER:HG	1:A:218:ARG:H	9	14.27
(4,188)	1:A:308:SER:HG	1:A:218:ARG:H	12	14.27
(4,193)	1:A:308:SER:HG	1:A:426:GLU:H	12	14.11
(4,193)	1:A:308:SER:HG	1:A:426:GLU:H	8	14.09
(4,187)	1:A:308:SER:HG	1:A:217:GLU:H	7	14.04
(4,193)	1:A:308:SER:HG	1:A:426:GLU:H	9	13.72
(4,188)	1:A:308:SER:HG	1:A:218:ARG:H	3	13.65
(4,188)	1:A:308:SER:HG	1:A:218:ARG:H	7	13.33
(4,189)	1:A:308:SER:HG	1:A:221:GLY:H	6	11.08
(4,189)	1:A:308:SER:HG	1:A:221:GLY:H	4	10.96
(4,189)	1:A:308:SER:HG	1:A:221:GLY:H	5	10.84
(4,189)	1:A:308:SER:HG	1:A:221:GLY:H	1	10.76
(4,189)	1:A:308:SER:HG	1:A:221:GLY:H	14	10.64
(4,189)	1:A:308:SER:HG	1:A:221:GLY:H	15	10.62
(4,189)	1:A:308:SER:HG	1:A:221:GLY:H	8	10.61
(4,189)	1:A:308:SER:HG	1:A:221:GLY:H	13	10.43
(4,189)	1:A:308:SER:HG	1:A:221:GLY:H	10	10.27
(4,189)	1:A:308:SER:HG	1:A:221:GLY:H	12	10.18
(4,189)	1:A:308:SER:HG	1:A:221:GLY:H	9	10.07
(4,189)	1:A:308:SER:HG	1:A:221:GLY:H	2	10.03
(4,189)	1:A:308:SER:HG	1:A:221:GLY:H	11	10.01
(4,189)	1:A:308:SER:HG	1:A:221:GLY:H	3	9.76
(4,189)	1:A:308:SER:HG	1:A:221:GLY:H	7	9.25
(4,192)	1:A:308:SER:HG	1:A:279:TYR:H	6	8.31
(4,190)	1:A:308:SER:HG	1:A:224:LEU:H	6	8.3
(4,192)	1:A:308:SER:HG	1:A:279:TYR:H	1	8.26
(4,192)	1:A:308:SER:HG	1:A:279:TYR:H	4	8.21
(4,141)	1:A:296:SER:HG	1:A:219:GLN:H	14	8.06
(4,141)	1:A:296:SER:HG	1:A:219:GLN:H	7	8.05
(4,141)	1:A:296:SER:HG	1:A:219:GLN:H	12	8.04
(4,141)	1:A:296:SER:HG	1:A:219:GLN:H	6	8.03
(4,141)	1:A:296:SER:HG	1:A:219:GLN:H	11	8.03
(4,141)	1:A:296:SER:HG	1:A:219:GLN:H	3	8.02

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(4,141)	1:A:296:SER:HG	1:A:219:GLN:H	5	8.02
(4,141)	1:A:296:SER:HG	1:A:219:GLN:H	10	8.02
(4,141)	1:A:296:SER:HG	1:A:219:GLN:H	13	8.02
(4,159)	1:A:296:SER:HG	1:A:427:PHE:H	6	8.01
(4,141)	1:A:296:SER:HG	1:A:219:GLN:H	1	8.01
(4,141)	1:A:296:SER:HG	1:A:219:GLN:H	2	8.01
(4,141)	1:A:296:SER:HG	1:A:219:GLN:H	4	8.01
(4,141)	1:A:296:SER:HG	1:A:219:GLN:H	8	8.01
(4,141)	1:A:296:SER:HG	1:A:219:GLN:H	9	8.01
(4,141)	1:A:296:SER:HG	1:A:219:GLN:H	15	8.01
(4,213)	1:A:308:SER:HG	1:A:252:ARG:H	6	8.0
(4,170)	1:A:308:SER:HG	1:A:288:ALA:H	1	8.0
(4,170)	1:A:308:SER:HG	1:A:288:ALA:H	2	8.0
(4,170)	1:A:308:SER:HG	1:A:288:ALA:H	3	8.0
(4,170)	1:A:308:SER:HG	1:A:288:ALA:H	4	8.0
(4,170)	1:A:308:SER:HG	1:A:288:ALA:H	5	8.0
(4,170)	1:A:308:SER:HG	1:A:288:ALA:H	8	8.0
(4,170)	1:A:308:SER:HG	1:A:288:ALA:H	10	8.0
(4,159)	1:A:296:SER:HG	1:A:427:PHE:H	1	8.0
(4,159)	1:A:296:SER:HG	1:A:427:PHE:H	14	8.0
(4,131)	1:A:290:CYS:HG	1:A:397:LYS:H	2	8.0
(4,131)	1:A:290:CYS:HG	1:A:397:LYS:H	3	8.0
(4,131)	1:A:290:CYS:HG	1:A:397:LYS:H	4	8.0
(4,131)	1:A:290:CYS:HG	1:A:397:LYS:H	6	8.0
(4,131)	1:A:290:CYS:HG	1:A:397:LYS:H	7	8.0
(4,131)	1:A:290:CYS:HG	1:A:397:LYS:H	10	8.0
(4,131)	1:A:290:CYS:HG	1:A:397:LYS:H	11	8.0
(4,131)	1:A:290:CYS:HG	1:A:397:LYS:H	14	8.0
(4,131)	1:A:290:CYS:HG	1:A:397:LYS:H	15	8.0
(4,123)	1:A:290:CYS:HG	1:A:314:GLY:H	14	8.0
(4,159)	1:A:296:SER:HG	1:A:427:PHE:H	7	7.99
(4,131)	1:A:290:CYS:HG	1:A:397:LYS:H	1	7.99
(4,131)	1:A:290:CYS:HG	1:A:397:LYS:H	5	7.99
(4,170)	1:A:308:SER:HG	1:A:288:ALA:H	14	7.97
(4,190)	1:A:308:SER:HG	1:A:224:LEU:H	5	7.96
(4,192)	1:A:308:SER:HG	1:A:279:TYR:H	8	7.94
(4,140)	1:A:290:CYS:HG	1:A:434:HIS:H	2	7.94
(4,140)	1:A:290:CYS:HG	1:A:434:HIS:H	6	7.9
(4,123)	1:A:290:CYS:HG	1:A:314:GLY:H	1	7.88
(4,213)	1:A:308:SER:HG	1:A:252:ARG:H	5	7.87
(4,170)	1:A:308:SER:HG	1:A:288:ALA:H	15	7.87
(4,170)	1:A:308:SER:HG	1:A:288:ALA:H	6	7.85

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(4,131)	1:A:290:CYS:HG	1:A:397:LYS:H	13	7.84
(4,164)	1:A:308:SER:HG	1:A:236:ILE:H	5	7.82
(4,123)	1:A:290:CYS:HG	1:A:314:GLY:H	10	7.82
(4,159)	1:A:296:SER:HG	1:A:427:PHE:H	3	7.8
(4,140)	1:A:290:CYS:HG	1:A:434:HIS:H	1	7.8
(4,131)	1:A:290:CYS:HG	1:A:397:LYS:H	12	7.75
(4,164)	1:A:308:SER:HG	1:A:236:ILE:H	6	7.74
(4,140)	1:A:290:CYS:HG	1:A:434:HIS:H	9	7.73
(4,170)	1:A:308:SER:HG	1:A:288:ALA:H	7	7.72
(4,191)	1:A:308:SER:HG	1:A:225:ILE:H	6	7.71
(4,190)	1:A:308:SER:HG	1:A:224:LEU:H	1	7.7
(4,192)	1:A:308:SER:HG	1:A:279:TYR:H	5	7.68
(4,190)	1:A:308:SER:HG	1:A:224:LEU:H	14	7.65
(4,133)	1:A:290:CYS:HG	1:A:400:ARG:H	15	7.62
(4,131)	1:A:290:CYS:HG	1:A:397:LYS:H	9	7.61
(4,191)	1:A:308:SER:HG	1:A:225:ILE:H	5	7.6
(4,140)	1:A:290:CYS:HG	1:A:434:HIS:H	11	7.58
(4,213)	1:A:308:SER:HG	1:A:252:ARG:H	15	7.57
(4,190)	1:A:308:SER:HG	1:A:224:LEU:H	4	7.56
(4,140)	1:A:290:CYS:HG	1:A:434:HIS:H	10	7.53
(4,140)	1:A:290:CYS:HG	1:A:434:HIS:H	15	7.53
(4,190)	1:A:308:SER:HG	1:A:224:LEU:H	13	7.5
(4,170)	1:A:308:SER:HG	1:A:288:ALA:H	11	7.49
(4,190)	1:A:308:SER:HG	1:A:224:LEU:H	15	7.47
(4,140)	1:A:290:CYS:HG	1:A:434:HIS:H	13	7.47
(4,140)	1:A:290:CYS:HG	1:A:434:HIS:H	12	7.43
(4,159)	1:A:296:SER:HG	1:A:427:PHE:H	13	7.4
(4,170)	1:A:308:SER:HG	1:A:288:ALA:H	12	7.39
(4,190)	1:A:308:SER:HG	1:A:224:LEU:H	8	7.38
(4,159)	1:A:296:SER:HG	1:A:427:PHE:H	10	7.38
(4,170)	1:A:308:SER:HG	1:A:288:ALA:H	9	7.37
(4,192)	1:A:308:SER:HG	1:A:279:TYR:H	15	7.33
(4,190)	1:A:308:SER:HG	1:A:224:LEU:H	10	7.33
(4,140)	1:A:290:CYS:HG	1:A:434:HIS:H	14	7.32
(4,133)	1:A:290:CYS:HG	1:A:400:ARG:H	1	7.3
(4,191)	1:A:308:SER:HG	1:A:225:ILE:H	1	7.14
(4,133)	1:A:290:CYS:HG	1:A:400:ARG:H	6	7.14
(4,192)	1:A:308:SER:HG	1:A:279:TYR:H	9	7.13
(4,140)	1:A:290:CYS:HG	1:A:434:HIS:H	3	7.13
(4,191)	1:A:308:SER:HG	1:A:225:ILE:H	14	7.1
(4,133)	1:A:290:CYS:HG	1:A:400:ARG:H	4	7.03
(4,123)	1:A:290:CYS:HG	1:A:314:GLY:H	15	7.02

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(4,191)	1:A:308:SER:HG	1:A:225:ILE:H	4	7.01
(4,123)	1:A:290:CYS:HG	1:A:314:GLY:H	8	7.0
(4,140)	1:A:290:CYS:HG	1:A:434:HIS:H	5	6.99
(4,190)	1:A:308:SER:HG	1:A:224:LEU:H	11	6.97
(4,190)	1:A:308:SER:HG	1:A:224:LEU:H	12	6.97
(4,123)	1:A:290:CYS:HG	1:A:314:GLY:H	7	6.92
(4,190)	1:A:308:SER:HG	1:A:224:LEU:H	2	6.91
(4,192)	1:A:308:SER:HG	1:A:279:TYR:H	13	6.9
(4,191)	1:A:308:SER:HG	1:A:225:ILE:H	13	6.9
(4,191)	1:A:308:SER:HG	1:A:225:ILE:H	15	6.9
(4,192)	1:A:308:SER:HG	1:A:279:TYR:H	2	6.89
(4,192)	1:A:308:SER:HG	1:A:279:TYR:H	11	6.88
(4,191)	1:A:308:SER:HG	1:A:225:ILE:H	8	6.87
(4,159)	1:A:296:SER:HG	1:A:427:PHE:H	15	6.87
(4,191)	1:A:308:SER:HG	1:A:225:ILE:H	10	6.86
(4,190)	1:A:308:SER:HG	1:A:224:LEU:H	9	6.85
(4,159)	1:A:296:SER:HG	1:A:427:PHE:H	4	6.85
(4,190)	1:A:308:SER:HG	1:A:224:LEU:H	3	6.82
(4,123)	1:A:290:CYS:HG	1:A:314:GLY:H	11	6.8
(4,164)	1:A:308:SER:HG	1:A:236:ILE:H	1	6.78
(4,164)	1:A:308:SER:HG	1:A:236:ILE:H	7	6.77
(4,123)	1:A:290:CYS:HG	1:A:314:GLY:H	9	6.76
(4,123)	1:A:290:CYS:HG	1:A:314:GLY:H	4	6.74
(4,164)	1:A:308:SER:HG	1:A:236:ILE:H	10	6.63
(4,164)	1:A:308:SER:HG	1:A:236:ILE:H	13	6.62
(4,185)	1:A:308:SER:HG	1:A:418:TYR:H	5	6.6
(4,164)	1:A:308:SER:HG	1:A:236:ILE:H	2	6.59
(4,170)	1:A:308:SER:HG	1:A:288:ALA:H	13	6.57
(4,164)	1:A:308:SER:HG	1:A:236:ILE:H	4	6.56
(4,213)	1:A:308:SER:HG	1:A:252:ARG:H	3	6.55
(4,191)	1:A:308:SER:HG	1:A:225:ILE:H	11	6.55
(4,123)	1:A:290:CYS:HG	1:A:314:GLY:H	5	6.55
(4,191)	1:A:308:SER:HG	1:A:225:ILE:H	2	6.54
(4,191)	1:A:308:SER:HG	1:A:225:ILE:H	12	6.54
(4,192)	1:A:308:SER:HG	1:A:279:TYR:H	10	6.53
(4,133)	1:A:290:CYS:HG	1:A:400:ARG:H	5	6.49
(4,164)	1:A:308:SER:HG	1:A:236:ILE:H	14	6.48
(4,191)	1:A:308:SER:HG	1:A:225:ILE:H	9	6.46
(4,185)	1:A:308:SER:HG	1:A:418:TYR:H	7	6.44
(4,161)	1:A:308:SER:HG	1:A:229:ILE:H	6	6.44
(4,123)	1:A:290:CYS:HG	1:A:314:GLY:H	13	6.44
(4,192)	1:A:308:SER:HG	1:A:279:TYR:H	3	6.4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(4,164)	1:A:308:SER:HG	1:A:236:ILE:H	11	6.4
(4,161)	1:A:308:SER:HG	1:A:229:ILE:H	5	6.4
(4,153)	1:A:296:SER:HG	1:A:314:GLY:H	14	6.36
(4,165)	1:A:308:SER:HG	1:A:238:SER:H	6	6.34
(4,165)	1:A:308:SER:HG	1:A:238:SER:H	5	6.32
(4,190)	1:A:308:SER:HG	1:A:224:LEU:H	7	6.31
(4,185)	1:A:308:SER:HG	1:A:418:TYR:H	13	6.29
(4,131)	1:A:290:CYS:HG	1:A:397:LYS:H	8	6.29
(4,185)	1:A:308:SER:HG	1:A:418:TYR:H	10	6.27
(4,185)	1:A:308:SER:HG	1:A:418:TYR:H	14	6.27
(4,164)	1:A:308:SER:HG	1:A:236:ILE:H	12	6.27
(4,213)	1:A:308:SER:HG	1:A:252:ARG:H	8	6.25
(4,164)	1:A:308:SER:HG	1:A:236:ILE:H	9	6.25
(4,213)	1:A:308:SER:HG	1:A:252:ARG:H	13	6.24
(4,185)	1:A:308:SER:HG	1:A:418:TYR:H	12	6.24
(4,164)	1:A:308:SER:HG	1:A:236:ILE:H	15	6.24
(4,192)	1:A:308:SER:HG	1:A:279:TYR:H	14	6.23
(4,213)	1:A:308:SER:HG	1:A:252:ARG:H	4	6.22
(4,133)	1:A:290:CYS:HG	1:A:400:ARG:H	13	6.22
(4,153)	1:A:296:SER:HG	1:A:314:GLY:H	1	6.21
(4,191)	1:A:308:SER:HG	1:A:225:ILE:H	3	6.17
(4,185)	1:A:308:SER:HG	1:A:418:TYR:H	6	6.14
(4,164)	1:A:308:SER:HG	1:A:236:ILE:H	8	6.14
(4,191)	1:A:308:SER:HG	1:A:225:ILE:H	7	6.13
(4,185)	1:A:308:SER:HG	1:A:418:TYR:H	15	6.13
(4,123)	1:A:290:CYS:HG	1:A:314:GLY:H	6	6.1
(4,133)	1:A:290:CYS:HG	1:A:400:ARG:H	14	6.08
(4,185)	1:A:308:SER:HG	1:A:418:TYR:H	8	6.01
(4,192)	1:A:308:SER:HG	1:A:279:TYR:H	12	5.98
(4,159)	1:A:296:SER:HG	1:A:427:PHE:H	9	5.96
(4,123)	1:A:290:CYS:HG	1:A:314:GLY:H	2	5.95
(4,159)	1:A:296:SER:HG	1:A:427:PHE:H	11	5.94
(4,185)	1:A:308:SER:HG	1:A:418:TYR:H	9	5.92
(4,159)	1:A:296:SER:HG	1:A:427:PHE:H	8	5.92
(4,133)	1:A:290:CYS:HG	1:A:400:ARG:H	8	5.92
(4,213)	1:A:308:SER:HG	1:A:252:ARG:H	7	5.91
(4,185)	1:A:308:SER:HG	1:A:418:TYR:H	4	5.91
(4,215)	1:A:308:SER:HG	1:A:256:GLY:H	5	5.9
(4,159)	1:A:296:SER:HG	1:A:427:PHE:H	12	5.9
(4,213)	1:A:308:SER:HG	1:A:252:ARG:H	1	5.88
(4,185)	1:A:308:SER:HG	1:A:418:TYR:H	11	5.88
(4,140)	1:A:290:CYS:HG	1:A:434:HIS:H	4	5.88

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(4,140)	1:A:290:CYS:HG	1:A:434:HIS:H	8	5.87
(4,185)	1:A:308:SER:HG	1:A:418:TYR:H	1	5.85
(4,185)	1:A:308:SER:HG	1:A:418:TYR:H	2	5.85
(4,159)	1:A:296:SER:HG	1:A:427:PHE:H	2	5.85
(4,164)	1:A:308:SER:HG	1:A:236:ILE:H	3	5.84
(4,133)	1:A:290:CYS:HG	1:A:400:ARG:H	11	5.84
(4,215)	1:A:308:SER:HG	1:A:256:GLY:H	6	5.83
(4,159)	1:A:296:SER:HG	1:A:427:PHE:H	5	5.81
(4,133)	1:A:290:CYS:HG	1:A:400:ARG:H	7	5.8
(4,153)	1:A:296:SER:HG	1:A:314:GLY:H	5	5.72
(4,133)	1:A:290:CYS:HG	1:A:400:ARG:H	3	5.71
(4,153)	1:A:296:SER:HG	1:A:314:GLY:H	10	5.7
(4,133)	1:A:290:CYS:HG	1:A:400:ARG:H	2	5.67
(4,133)	1:A:290:CYS:HG	1:A:400:ARG:H	10	5.67
(4,201)	1:A:290:CYS:HG	1:A:310:GLN:HE21	7	5.66
(4,201)	1:A:290:CYS:HG	1:A:310:GLN:HE22	7	5.66
(4,161)	1:A:308:SER:HG	1:A:229:ILE:H	1	5.63
(4,133)	1:A:290:CYS:HG	1:A:400:ARG:H	9	5.62
(4,201)	1:A:290:CYS:HG	1:A:310:GLN:HE21	15	5.61
(4,201)	1:A:290:CYS:HG	1:A:310:GLN:HE22	15	5.61
(4,161)	1:A:308:SER:HG	1:A:229:ILE:H	14	5.61
(4,215)	1:A:308:SER:HG	1:A:256:GLY:H	15	5.6
(4,161)	1:A:308:SER:HG	1:A:229:ILE:H	10	5.58
(4,185)	1:A:308:SER:HG	1:A:418:TYR:H	3	5.54
(4,179)	1:A:308:SER:HG	1:A:401:ILE:H	15	5.54
(4,161)	1:A:308:SER:HG	1:A:229:ILE:H	4	5.52
(4,133)	1:A:290:CYS:HG	1:A:400:ARG:H	12	5.52
(4,178)	1:A:308:SER:HG	1:A:400:ARG:H	15	5.49
(4,161)	1:A:308:SER:HG	1:A:229:ILE:H	13	5.48
(4,153)	1:A:296:SER:HG	1:A:314:GLY:H	4	5.47
(4,123)	1:A:290:CYS:HG	1:A:314:GLY:H	3	5.46
(4,192)	1:A:308:SER:HG	1:A:279:TYR:H	7	5.45
(4,214)	1:A:308:SER:HG	1:A:253:VAL:H	5	5.41
(4,201)	1:A:290:CYS:HG	1:A:310:GLN:HE21	3	5.41
(4,201)	1:A:290:CYS:HG	1:A:310:GLN:HE22	3	5.41
(4,161)	1:A:308:SER:HG	1:A:229:ILE:H	15	5.38
(4,214)	1:A:308:SER:HG	1:A:253:VAL:H	6	5.32
(4,161)	1:A:308:SER:HG	1:A:229:ILE:H	8	5.31
(4,124)	1:A:290:CYS:HG	1:A:315:GLY:H	5	5.31
(4,179)	1:A:308:SER:HG	1:A:401:ILE:H	14	5.25
(4,156)	1:A:296:SER:HG	1:A:317:GLY:H	6	5.24
(4,161)	1:A:308:SER:HG	1:A:229:ILE:H	12	5.22

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(4,156)	1:A:296:SER:HG	1:A:317:GLY:H	4	5.21
(4,165)	1:A:308:SER:HG	1:A:238:SER:H	7	5.19
(4,161)	1:A:308:SER:HG	1:A:229:ILE:H	7	5.19
(4,161)	1:A:308:SER:HG	1:A:229:ILE:H	11	5.19
(4,161)	1:A:308:SER:HG	1:A:229:ILE:H	2	5.17
(4,123)	1:A:290:CYS:HG	1:A:314:GLY:H	12	5.17
(4,201)	1:A:290:CYS:HG	1:A:310:GLN:HE21	9	5.16
(4,201)	1:A:290:CYS:HG	1:A:310:GLN:HE22	9	5.16
(4,165)	1:A:308:SER:HG	1:A:238:SER:H	1	5.12
(4,165)	1:A:308:SER:HG	1:A:238:SER:H	10	5.11
(4,140)	1:A:290:CYS:HG	1:A:434:HIS:H	7	5.1
(4,124)	1:A:290:CYS:HG	1:A:315:GLY:H	14	5.09
(4,179)	1:A:308:SER:HG	1:A:401:ILE:H	9	5.07
(4,165)	1:A:308:SER:HG	1:A:238:SER:H	15	5.07
(4,201)	1:A:290:CYS:HG	1:A:310:GLN:HE21	10	5.06
(4,201)	1:A:290:CYS:HG	1:A:310:GLN:HE22	10	5.06
(4,179)	1:A:308:SER:HG	1:A:401:ILE:H	11	5.06
(4,161)	1:A:308:SER:HG	1:A:229:ILE:H	9	5.06
(4,179)	1:A:308:SER:HG	1:A:401:ILE:H	6	5.05
(4,154)	1:A:296:SER:HG	1:A:315:GLY:H	5	5.05
(4,214)	1:A:308:SER:HG	1:A:253:VAL:H	15	5.04
(4,213)	1:A:308:SER:HG	1:A:252:ARG:H	12	5.04
(4,179)	1:A:308:SER:HG	1:A:401:ILE:H	5	5.04
(4,201)	1:A:290:CYS:HG	1:A:310:GLN:HE21	11	5.03
(4,201)	1:A:290:CYS:HG	1:A:310:GLN:HE22	11	5.03
(4,179)	1:A:308:SER:HG	1:A:401:ILE:H	7	5.03
(4,179)	1:A:308:SER:HG	1:A:401:ILE:H	12	5.03
(4,167)	1:A:308:SER:HG	1:A:241:SER:H	6	5.01
(4,165)	1:A:308:SER:HG	1:A:238:SER:H	4	5.01
(4,165)	1:A:308:SER:HG	1:A:238:SER:H	13	5.01
(4,167)	1:A:308:SER:HG	1:A:241:SER:H	5	5.0
(4,201)	1:A:290:CYS:HG	1:A:310:GLN:HE21	13	4.99
(4,201)	1:A:290:CYS:HG	1:A:310:GLN:HE22	13	4.99
(4,124)	1:A:290:CYS:HG	1:A:315:GLY:H	15	4.99
(4,213)	1:A:308:SER:HG	1:A:252:ARG:H	14	4.98
(4,165)	1:A:308:SER:HG	1:A:238:SER:H	14	4.98
(4,156)	1:A:296:SER:HG	1:A:317:GLY:H	5	4.92
(4,204)	1:A:296:SER:HG	1:A:390:GLN:HE21	5	4.89
(4,204)	1:A:296:SER:HG	1:A:390:GLN:HE22	5	4.89
(4,179)	1:A:308:SER:HG	1:A:401:ILE:H	13	4.87
(4,124)	1:A:290:CYS:HG	1:A:315:GLY:H	10	4.87
(4,165)	1:A:308:SER:HG	1:A:238:SER:H	12	4.85

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(4,179)	1:A:308:SER:HG	1:A:401:ILE:H	10	4.84
(4,201)	1:A:290:CYS:HG	1:A:310:GLN:HE21	14	4.83
(4,201)	1:A:290:CYS:HG	1:A:310:GLN:HE22	14	4.83
(4,215)	1:A:308:SER:HG	1:A:256:GLY:H	4	4.81
(4,201)	1:A:290:CYS:HG	1:A:310:GLN:HE21	2	4.81
(4,201)	1:A:290:CYS:HG	1:A:310:GLN:HE22	2	4.81
(4,153)	1:A:296:SER:HG	1:A:314:GLY:H	8	4.81
(4,213)	1:A:308:SER:HG	1:A:252:ARG:H	2	4.8
(4,165)	1:A:308:SER:HG	1:A:238:SER:H	2	4.8
(4,178)	1:A:308:SER:HG	1:A:400:ARG:H	6	4.79
(4,161)	1:A:308:SER:HG	1:A:229:ILE:H	3	4.79
(4,153)	1:A:296:SER:HG	1:A:314:GLY:H	6	4.79
(4,204)	1:A:296:SER:HG	1:A:390:GLN:HE21	6	4.75
(4,204)	1:A:296:SER:HG	1:A:390:GLN:HE22	6	4.75
(4,179)	1:A:308:SER:HG	1:A:401:ILE:H	3	4.75
(4,215)	1:A:308:SER:HG	1:A:256:GLY:H	3	4.72
(4,179)	1:A:308:SER:HG	1:A:401:ILE:H	2	4.72
(4,180)	1:A:308:SER:HG	1:A:403:PHE:H	15	4.71
(4,165)	1:A:308:SER:HG	1:A:238:SER:H	11	4.71
(4,215)	1:A:308:SER:HG	1:A:256:GLY:H	8	4.69
(4,213)	1:A:308:SER:HG	1:A:252:ARG:H	10	4.69
(4,179)	1:A:308:SER:HG	1:A:401:ILE:H	4	4.69
(4,124)	1:A:290:CYS:HG	1:A:315:GLY:H	7	4.69
(4,179)	1:A:308:SER:HG	1:A:401:ILE:H	1	4.68
(4,213)	1:A:308:SER:HG	1:A:252:ARG:H	9	4.62
(4,178)	1:A:308:SER:HG	1:A:400:ARG:H	5	4.62
(4,215)	1:A:308:SER:HG	1:A:256:GLY:H	13	4.61
(4,179)	1:A:308:SER:HG	1:A:401:ILE:H	8	4.57
(4,165)	1:A:308:SER:HG	1:A:238:SER:H	8	4.56
(4,208)	1:A:290:CYS:HG	1:A:271:ARG:H	12	4.55
(4,201)	1:A:290:CYS:HG	1:A:310:GLN:HE21	1	4.54
(4,201)	1:A:290:CYS:HG	1:A:310:GLN:HE22	1	4.54
(4,132)	1:A:290:CYS:HG	1:A:398:ILE:H	6	4.54
(4,165)	1:A:308:SER:HG	1:A:238:SER:H	9	4.53
(4,132)	1:A:290:CYS:HG	1:A:398:ILE:H	15	4.5
(4,208)	1:A:290:CYS:HG	1:A:271:ARG:H	14	4.47
(4,165)	1:A:308:SER:HG	1:A:238:SER:H	3	4.46
(4,180)	1:A:308:SER:HG	1:A:403:PHE:H	6	4.44
(4,132)	1:A:290:CYS:HG	1:A:398:ILE:H	5	4.44
(4,215)	1:A:308:SER:HG	1:A:256:GLY:H	1	4.41
(4,178)	1:A:308:SER:HG	1:A:400:ARG:H	4	4.4
(4,124)	1:A:290:CYS:HG	1:A:315:GLY:H	11	4.36

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(4,180)	1:A:308:SER:HG	1:A:403:PHE:H	5	4.35
(4,207)	1:A:290:CYS:HG	1:A:270:SER:H	14	4.34
(4,155)	1:A:296:SER:HG	1:A:316:GLY:H	1	4.34
(4,208)	1:A:290:CYS:HG	1:A:271:ARG:H	7	4.33
(4,178)	1:A:308:SER:HG	1:A:400:ARG:H	1	4.32
(4,154)	1:A:296:SER:HG	1:A:315:GLY:H	14	4.28
(4,124)	1:A:290:CYS:HG	1:A:315:GLY:H	8	4.27
(4,180)	1:A:308:SER:HG	1:A:403:PHE:H	13	4.26
(4,139)	1:A:290:CYS:HG	1:A:428:GLU:H	2	4.26
(4,178)	1:A:308:SER:HG	1:A:400:ARG:H	14	4.22
(4,178)	1:A:308:SER:HG	1:A:400:ARG:H	7	4.2
(4,124)	1:A:290:CYS:HG	1:A:315:GLY:H	9	4.17
(4,146)	1:A:296:SER:HG	1:A:278:SER:H	1	4.15
(4,124)	1:A:290:CYS:HG	1:A:315:GLY:H	4	4.15
(4,180)	1:A:308:SER:HG	1:A:403:PHE:H	4	4.14
(4,178)	1:A:308:SER:HG	1:A:400:ARG:H	13	4.14
(4,130)	1:A:290:CYS:HG	1:A:396:ASP:H	7	4.14
(4,204)	1:A:296:SER:HG	1:A:390:GLN:HE21	4	4.13
(4,204)	1:A:296:SER:HG	1:A:390:GLN:HE22	4	4.13
(4,178)	1:A:308:SER:HG	1:A:400:ARG:H	3	4.13
(4,207)	1:A:290:CYS:HG	1:A:270:SER:H	12	4.12
(4,201)	1:A:290:CYS:HG	1:A:310:GLN:HE21	12	4.12
(4,201)	1:A:290:CYS:HG	1:A:310:GLN:HE22	12	4.12
(4,113)	1:A:290:CYS:HG	1:A:243:TRP:H	4	4.1
(4,146)	1:A:296:SER:HG	1:A:278:SER:H	7	4.08
(4,214)	1:A:308:SER:HG	1:A:253:VAL:H	3	4.07
(4,134)	1:A:290:CYS:HG	1:A:403:PHE:H	1	4.07
(4,156)	1:A:296:SER:HG	1:A:317:GLY:H	14	4.06
(4,184)	1:A:308:SER:HG	1:A:417:ILE:H	5	4.05
(4,134)	1:A:290:CYS:HG	1:A:403:PHE:H	15	4.05
(4,180)	1:A:308:SER:HG	1:A:403:PHE:H	7	4.04
(4,130)	1:A:290:CYS:HG	1:A:396:ASP:H	11	4.04
(4,178)	1:A:308:SER:HG	1:A:400:ARG:H	11	4.03
(4,143)	1:A:296:SER:HG	1:A:226:GLN:H	6	4.03
(4,130)	1:A:290:CYS:HG	1:A:396:ASP:H	2	4.03
(4,156)	1:A:296:SER:HG	1:A:317:GLY:H	1	4.01
(4,207)	1:A:290:CYS:HG	1:A:270:SER:H	7	4.0
(4,180)	1:A:308:SER:HG	1:A:403:PHE:H	1	4.0
(4,146)	1:A:296:SER:HG	1:A:278:SER:H	3	4.0
(4,143)	1:A:296:SER:HG	1:A:226:GLN:H	5	3.99
(4,201)	1:A:290:CYS:HG	1:A:310:GLN:HE21	8	3.98
(4,201)	1:A:290:CYS:HG	1:A:310:GLN:HE22	8	3.98

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(4,180)	1:A:308:SER:HG	1:A:403:PHE:H	12	3.97
(4,134)	1:A:290:CYS:HG	1:A:403:PHE:H	6	3.97
(4,180)	1:A:308:SER:HG	1:A:403:PHE:H	14	3.96
(4,178)	1:A:308:SER:HG	1:A:400:ARG:H	9	3.96
(4,178)	1:A:308:SER:HG	1:A:400:ARG:H	10	3.96
(4,180)	1:A:308:SER:HG	1:A:403:PHE:H	9	3.95
(4,215)	1:A:308:SER:HG	1:A:256:GLY:H	12	3.93
(4,124)	1:A:290:CYS:HG	1:A:315:GLY:H	3	3.93
(4,178)	1:A:308:SER:HG	1:A:400:ARG:H	12	3.92
(4,130)	1:A:290:CYS:HG	1:A:396:ASP:H	1	3.92
(4,124)	1:A:290:CYS:HG	1:A:315:GLY:H	12	3.92
(4,184)	1:A:308:SER:HG	1:A:417:ILE:H	10	3.91
(4,184)	1:A:308:SER:HG	1:A:417:ILE:H	14	3.91
(4,180)	1:A:308:SER:HG	1:A:403:PHE:H	11	3.91
(4,178)	1:A:308:SER:HG	1:A:400:ARG:H	2	3.91
(4,154)	1:A:296:SER:HG	1:A:315:GLY:H	4	3.91
(4,113)	1:A:290:CYS:HG	1:A:243:TRP:H	11	3.91
(4,215)	1:A:308:SER:HG	1:A:256:GLY:H	7	3.9
(4,214)	1:A:308:SER:HG	1:A:253:VAL:H	4	3.9
(4,146)	1:A:296:SER:HG	1:A:278:SER:H	11	3.9
(4,130)	1:A:290:CYS:HG	1:A:396:ASP:H	5	3.9
(4,124)	1:A:290:CYS:HG	1:A:315:GLY:H	13	3.9
(4,184)	1:A:308:SER:HG	1:A:417:ILE:H	7	3.89
(4,154)	1:A:296:SER:HG	1:A:315:GLY:H	1	3.89
(4,127)	1:A:290:CYS:HG	1:A:318:PHE:H	7	3.89
(4,208)	1:A:290:CYS:HG	1:A:271:ARG:H	10	3.88
(4,180)	1:A:308:SER:HG	1:A:403:PHE:H	3	3.88
(4,213)	1:A:308:SER:HG	1:A:252:ARG:H	11	3.87
(4,180)	1:A:308:SER:HG	1:A:403:PHE:H	10	3.87
(4,146)	1:A:296:SER:HG	1:A:278:SER:H	6	3.87
(4,215)	1:A:308:SER:HG	1:A:256:GLY:H	14	3.86
(4,214)	1:A:308:SER:HG	1:A:253:VAL:H	8	3.86
(4,155)	1:A:296:SER:HG	1:A:316:GLY:H	5	3.86
(4,180)	1:A:308:SER:HG	1:A:403:PHE:H	2	3.85
(4,130)	1:A:290:CYS:HG	1:A:396:ASP:H	6	3.85
(4,130)	1:A:290:CYS:HG	1:A:396:ASP:H	14	3.85
(4,127)	1:A:290:CYS:HG	1:A:318:PHE:H	9	3.85
(4,184)	1:A:308:SER:HG	1:A:417:ILE:H	8	3.84
(4,146)	1:A:296:SER:HG	1:A:278:SER:H	9	3.84
(4,146)	1:A:296:SER:HG	1:A:278:SER:H	10	3.84
(4,204)	1:A:296:SER:HG	1:A:390:GLN:HE21	1	3.83
(4,204)	1:A:296:SER:HG	1:A:390:GLN:HE22	1	3.83

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(4,201)	1:A:290:CYS:HG	1:A:310:GLN:HE21	4	3.83
(4,201)	1:A:290:CYS:HG	1:A:310:GLN:HE22	4	3.83
(4,184)	1:A:308:SER:HG	1:A:417:ILE:H	12	3.83
(4,146)	1:A:296:SER:HG	1:A:278:SER:H	4	3.83
(4,113)	1:A:290:CYS:HG	1:A:243:TRP:H	1	3.82
(4,156)	1:A:296:SER:HG	1:A:317:GLY:H	8	3.8
(4,113)	1:A:290:CYS:HG	1:A:243:TRP:H	13	3.79
(4,139)	1:A:290:CYS:HG	1:A:428:GLU:H	5	3.77
(4,130)	1:A:290:CYS:HG	1:A:396:ASP:H	10	3.77
(4,127)	1:A:290:CYS:HG	1:A:318:PHE:H	2	3.77
(4,124)	1:A:290:CYS:HG	1:A:315:GLY:H	1	3.77
(4,184)	1:A:308:SER:HG	1:A:417:ILE:H	6	3.75
(4,146)	1:A:296:SER:HG	1:A:278:SER:H	13	3.75
(4,214)	1:A:308:SER:HG	1:A:253:VAL:H	13	3.74
(4,204)	1:A:296:SER:HG	1:A:390:GLN:HE21	2	3.74
(4,204)	1:A:296:SER:HG	1:A:390:GLN:HE22	2	3.74
(4,204)	1:A:296:SER:HG	1:A:390:GLN:HE21	14	3.73
(4,204)	1:A:296:SER:HG	1:A:390:GLN:HE22	14	3.73
(4,184)	1:A:308:SER:HG	1:A:417:ILE:H	13	3.73
(4,144)	1:A:296:SER:HG	1:A:227:LEU:H	6	3.73
(4,113)	1:A:290:CYS:HG	1:A:243:TRP:H	7	3.73
(4,146)	1:A:296:SER:HG	1:A:278:SER:H	5	3.72
(4,127)	1:A:290:CYS:HG	1:A:318:PHE:H	11	3.72
(4,184)	1:A:308:SER:HG	1:A:417:ILE:H	4	3.7
(4,113)	1:A:290:CYS:HG	1:A:243:TRP:H	9	3.7
(4,215)	1:A:308:SER:HG	1:A:256:GLY:H	10	3.69
(4,184)	1:A:308:SER:HG	1:A:417:ILE:H	11	3.69
(4,160)	1:A:296:SER:HG	1:A:428:GLU:H	7	3.69
(4,134)	1:A:290:CYS:HG	1:A:403:PHE:H	4	3.68
(4,130)	1:A:290:CYS:HG	1:A:396:ASP:H	13	3.68
(4,127)	1:A:290:CYS:HG	1:A:318:PHE:H	13	3.68
(4,167)	1:A:308:SER:HG	1:A:241:SER:H	15	3.67
(4,130)	1:A:290:CYS:HG	1:A:396:ASP:H	4	3.67
(4,124)	1:A:290:CYS:HG	1:A:315:GLY:H	6	3.67
(4,195)	1:A:296:SER:HG	1:A:218:ARG:HE	4	3.65
(4,184)	1:A:308:SER:HG	1:A:417:ILE:H	2	3.65
(4,184)	1:A:308:SER:HG	1:A:417:ILE:H	9	3.64
(4,146)	1:A:296:SER:HG	1:A:278:SER:H	8	3.64
(4,130)	1:A:290:CYS:HG	1:A:396:ASP:H	9	3.63
(4,130)	1:A:290:CYS:HG	1:A:396:ASP:H	15	3.63
(4,127)	1:A:290:CYS:HG	1:A:318:PHE:H	12	3.63
(4,204)	1:A:296:SER:HG	1:A:390:GLN:HE21	9	3.61

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(4,204)	1:A:296:SER:HG	1:A:390:GLN:HE22	9	3.61
(4,184)	1:A:308:SER:HG	1:A:417:ILE:H	1	3.61
(4,180)	1:A:308:SER:HG	1:A:403:PHE:H	8	3.61
(4,146)	1:A:296:SER:HG	1:A:278:SER:H	15	3.59
(4,113)	1:A:290:CYS:HG	1:A:243:TRP:H	6	3.59
(4,113)	1:A:290:CYS:HG	1:A:243:TRP:H	8	3.59
(4,195)	1:A:296:SER:HG	1:A:218:ARG:HE	1	3.56
(4,167)	1:A:308:SER:HG	1:A:241:SER:H	4	3.56
(4,113)	1:A:290:CYS:HG	1:A:243:TRP:H	5	3.55
(4,215)	1:A:308:SER:HG	1:A:256:GLY:H	2	3.54
(4,201)	1:A:290:CYS:HG	1:A:310:GLN:HE21	5	3.54
(4,201)	1:A:290:CYS:HG	1:A:310:GLN:HE22	5	3.54
(4,167)	1:A:308:SER:HG	1:A:241:SER:H	1	3.54
(4,212)	1:A:296:SER:HG	1:A:271:ARG:H	12	3.53
(4,184)	1:A:308:SER:HG	1:A:417:ILE:H	15	3.53
(4,144)	1:A:296:SER:HG	1:A:227:LEU:H	5	3.53
(4,168)	1:A:308:SER:HG	1:A:242:PHE:H	5	3.52
(4,130)	1:A:290:CYS:HG	1:A:396:ASP:H	12	3.52
(4,113)	1:A:290:CYS:HG	1:A:243:TRP:H	15	3.52
(4,207)	1:A:290:CYS:HG	1:A:270:SER:H	10	3.51
(4,130)	1:A:290:CYS:HG	1:A:396:ASP:H	3	3.51
(4,212)	1:A:296:SER:HG	1:A:271:ARG:H	14	3.49
(4,143)	1:A:296:SER:HG	1:A:226:GLN:H	1	3.49
(4,143)	1:A:296:SER:HG	1:A:226:GLN:H	8	3.49
(4,215)	1:A:308:SER:HG	1:A:256:GLY:H	9	3.48
(4,168)	1:A:308:SER:HG	1:A:242:PHE:H	6	3.48
(4,167)	1:A:308:SER:HG	1:A:241:SER:H	13	3.48
(4,143)	1:A:296:SER:HG	1:A:226:GLN:H	2	3.48
(4,113)	1:A:290:CYS:HG	1:A:243:TRP:H	2	3.46
(4,214)	1:A:308:SER:HG	1:A:253:VAL:H	1	3.45
(4,195)	1:A:296:SER:HG	1:A:218:ARG:HE	6	3.44
(4,113)	1:A:290:CYS:HG	1:A:243:TRP:H	3	3.44
(4,132)	1:A:290:CYS:HG	1:A:398:ILE:H	7	3.43
(4,113)	1:A:290:CYS:HG	1:A:243:TRP:H	14	3.43
(4,162)	1:A:308:SER:HG	1:A:231:SER:H	6	3.42
(4,146)	1:A:296:SER:HG	1:A:278:SER:H	2	3.42
(4,119)	1:A:290:CYS:HG	1:A:306:PHE:H	10	3.42
(4,201)	1:A:290:CYS:HG	1:A:310:GLN:HE21	6	3.41
(4,201)	1:A:290:CYS:HG	1:A:310:GLN:HE22	6	3.41
(4,119)	1:A:290:CYS:HG	1:A:306:PHE:H	4	3.41
(4,119)	1:A:290:CYS:HG	1:A:306:PHE:H	7	3.41
(4,119)	1:A:290:CYS:HG	1:A:306:PHE:H	6	3.4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(4,113)	1:A:290:CYS:HG	1:A:243:TRP:H	10	3.4
(4,214)	1:A:308:SER:HG	1:A:253:VAL:H	7	3.38
(4,167)	1:A:308:SER:HG	1:A:241:SER:H	7	3.38
(4,143)	1:A:296:SER:HG	1:A:226:GLN:H	9	3.38
(4,143)	1:A:296:SER:HG	1:A:226:GLN:H	10	3.38
(4,132)	1:A:290:CYS:HG	1:A:398:ILE:H	2	3.38
(4,119)	1:A:290:CYS:HG	1:A:306:PHE:H	1	3.38
(4,173)	1:A:308:SER:HG	1:A:297:ALA:H	14	3.37
(4,137)	1:A:290:CYS:HG	1:A:426:GLU:H	4	3.37
(4,132)	1:A:290:CYS:HG	1:A:398:ILE:H	14	3.36
(4,143)	1:A:296:SER:HG	1:A:226:GLN:H	7	3.35
(4,119)	1:A:290:CYS:HG	1:A:306:PHE:H	12	3.35
(4,184)	1:A:308:SER:HG	1:A:417:ILE:H	3	3.34
(4,173)	1:A:308:SER:HG	1:A:297:ALA:H	5	3.34
(4,173)	1:A:308:SER:HG	1:A:297:ALA:H	1	3.33
(4,139)	1:A:290:CYS:HG	1:A:428:GLU:H	11	3.33
(4,119)	1:A:290:CYS:HG	1:A:306:PHE:H	2	3.33
(4,143)	1:A:296:SER:HG	1:A:226:GLN:H	4	3.32
(4,119)	1:A:290:CYS:HG	1:A:306:PHE:H	13	3.32
(4,137)	1:A:290:CYS:HG	1:A:426:GLU:H	3	3.31
(4,119)	1:A:290:CYS:HG	1:A:306:PHE:H	9	3.31
(4,202)	1:A:296:SER:HG	1:A:310:GLN:HE21	10	3.3
(4,202)	1:A:296:SER:HG	1:A:310:GLN:HE22	10	3.3
(4,132)	1:A:290:CYS:HG	1:A:398:ILE:H	11	3.3
(4,119)	1:A:290:CYS:HG	1:A:306:PHE:H	15	3.3
(4,204)	1:A:296:SER:HG	1:A:390:GLN:HE21	10	3.29
(4,204)	1:A:296:SER:HG	1:A:390:GLN:HE22	10	3.29
(4,163)	1:A:308:SER:HG	1:A:233:LEU:H	6	3.29
(4,154)	1:A:296:SER:HG	1:A:315:GLY:H	6	3.29
(4,143)	1:A:296:SER:HG	1:A:226:GLN:H	11	3.29
(4,212)	1:A:296:SER:HG	1:A:271:ARG:H	10	3.28
(4,119)	1:A:290:CYS:HG	1:A:306:PHE:H	8	3.28
(4,119)	1:A:290:CYS:HG	1:A:306:PHE:H	11	3.28
(4,113)	1:A:290:CYS:HG	1:A:243:TRP:H	12	3.28
(4,163)	1:A:308:SER:HG	1:A:233:LEU:H	5	3.27
(4,173)	1:A:308:SER:HG	1:A:297:ALA:H	8	3.26
(4,173)	1:A:308:SER:HG	1:A:297:ALA:H	15	3.26
(4,119)	1:A:290:CYS:HG	1:A:306:PHE:H	14	3.26
(4,111)	1:A:290:CYS:HG	1:A:221:GLY:H	13	3.26
(4,154)	1:A:296:SER:HG	1:A:315:GLY:H	10	3.25
(4,124)	1:A:290:CYS:HG	1:A:315:GLY:H	2	3.25
(4,178)	1:A:308:SER:HG	1:A:400:ARG:H	8	3.24

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(4,122)	1:A:290:CYS:HG	1:A:312:GLU:H	14	3.24
(4,132)	1:A:290:CYS:HG	1:A:398:ILE:H	10	3.23
(4,173)	1:A:308:SER:HG	1:A:297:ALA:H	6	3.22
(4,119)	1:A:290:CYS:HG	1:A:306:PHE:H	5	3.22
(4,212)	1:A:296:SER:HG	1:A:271:ARG:H	7	3.21
(4,146)	1:A:296:SER:HG	1:A:278:SER:H	14	3.21
(4,134)	1:A:290:CYS:HG	1:A:403:PHE:H	13	3.21
(4,119)	1:A:290:CYS:HG	1:A:306:PHE:H	3	3.21
(4,204)	1:A:296:SER:HG	1:A:390:GLN:HE21	8	3.2
(4,204)	1:A:296:SER:HG	1:A:390:GLN:HE22	8	3.2
(4,167)	1:A:308:SER:HG	1:A:241:SER:H	2	3.2
(4,173)	1:A:308:SER:HG	1:A:297:ALA:H	4	3.19
(4,146)	1:A:296:SER:HG	1:A:278:SER:H	12	3.19
(4,143)	1:A:296:SER:HG	1:A:226:GLN:H	13	3.18
(4,134)	1:A:290:CYS:HG	1:A:403:PHE:H	5	3.17
(4,173)	1:A:308:SER:HG	1:A:297:ALA:H	11	3.15
(4,173)	1:A:308:SER:HG	1:A:297:ALA:H	12	3.15
(4,154)	1:A:296:SER:HG	1:A:315:GLY:H	8	3.15
(4,167)	1:A:308:SER:HG	1:A:241:SER:H	10	3.13
(4,162)	1:A:308:SER:HG	1:A:231:SER:H	5	3.13
(4,160)	1:A:296:SER:HG	1:A:428:GLU:H	13	3.13
(4,127)	1:A:290:CYS:HG	1:A:318:PHE:H	15	3.13
(4,144)	1:A:296:SER:HG	1:A:227:LEU:H	1	3.12
(4,142)	1:A:296:SER:HG	1:A:223:TYR:H	6	3.12
(4,132)	1:A:290:CYS:HG	1:A:398:ILE:H	4	3.1
(4,173)	1:A:308:SER:HG	1:A:297:ALA:H	10	3.09
(4,167)	1:A:308:SER:HG	1:A:241:SER:H	9	3.08
(4,167)	1:A:308:SER:HG	1:A:241:SER:H	11	3.08
(4,167)	1:A:308:SER:HG	1:A:241:SER:H	14	3.08
(4,160)	1:A:296:SER:HG	1:A:428:GLU:H	3	3.08
(4,167)	1:A:308:SER:HG	1:A:241:SER:H	3	3.07
(4,204)	1:A:296:SER:HG	1:A:390:GLN:HE21	12	3.06
(4,204)	1:A:296:SER:HG	1:A:390:GLN:HE22	12	3.06
(4,173)	1:A:308:SER:HG	1:A:297:ALA:H	7	3.06
(4,132)	1:A:290:CYS:HG	1:A:398:ILE:H	1	3.05
(4,143)	1:A:296:SER:HG	1:A:226:GLN:H	15	3.04
(4,167)	1:A:308:SER:HG	1:A:241:SER:H	12	3.03
(4,144)	1:A:296:SER:HG	1:A:227:LEU:H	8	3.03
(4,183)	1:A:308:SER:HG	1:A:416:ILE:H	14	3.02
(4,132)	1:A:290:CYS:HG	1:A:398:ILE:H	13	3.02
(4,202)	1:A:296:SER:HG	1:A:310:GLN:HE21	14	3.01
(4,202)	1:A:296:SER:HG	1:A:310:GLN:HE22	14	3.01

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(4,173)	1:A:308:SER:HG	1:A:297:ALA:H	13	3.01
(4,144)	1:A:296:SER:HG	1:A:227:LEU:H	2	3.0
(4,144)	1:A:296:SER:HG	1:A:227:LEU:H	10	3.0
(4,142)	1:A:296:SER:HG	1:A:223:TYR:H	5	2.99
(4,173)	1:A:308:SER:HG	1:A:297:ALA:H	2	2.98
(4,155)	1:A:296:SER:HG	1:A:316:GLY:H	6	2.98
(4,132)	1:A:290:CYS:HG	1:A:398:ILE:H	12	2.96
(4,215)	1:A:308:SER:HG	1:A:256:GLY:H	11	2.95
(4,173)	1:A:308:SER:HG	1:A:297:ALA:H	3	2.95
(4,173)	1:A:308:SER:HG	1:A:297:ALA:H	9	2.95
(4,167)	1:A:308:SER:HG	1:A:241:SER:H	8	2.95
(4,148)	1:A:296:SER:HG	1:A:280:VAL:H	11	2.95
(4,143)	1:A:296:SER:HG	1:A:226:GLN:H	14	2.94
(4,183)	1:A:308:SER:HG	1:A:416:ILE:H	10	2.93
(4,144)	1:A:296:SER:HG	1:A:227:LEU:H	4	2.93
(4,111)	1:A:290:CYS:HG	1:A:221:GLY:H	15	2.93
(4,155)	1:A:296:SER:HG	1:A:316:GLY:H	4	2.92
(4,111)	1:A:290:CYS:HG	1:A:221:GLY:H	12	2.92
(4,204)	1:A:296:SER:HG	1:A:390:GLN:HE21	13	2.91
(4,204)	1:A:296:SER:HG	1:A:390:GLN:HE22	13	2.91
(4,132)	1:A:290:CYS:HG	1:A:398:ILE:H	3	2.91
(4,111)	1:A:290:CYS:HG	1:A:221:GLY:H	4	2.91
(4,144)	1:A:296:SER:HG	1:A:227:LEU:H	9	2.9
(4,195)	1:A:296:SER:HG	1:A:218:ARG:HE	13	2.89
(4,132)	1:A:290:CYS:HG	1:A:398:ILE:H	9	2.88
(4,122)	1:A:290:CYS:HG	1:A:312:GLU:H	10	2.88
(4,183)	1:A:308:SER:HG	1:A:416:ILE:H	5	2.87
(4,214)	1:A:308:SER:HG	1:A:253:VAL:H	12	2.86
(4,144)	1:A:296:SER:HG	1:A:227:LEU:H	13	2.86
(4,200)	1:A:308:SER:HG	1:A:245:ASN:HD21	6	2.85
(4,200)	1:A:308:SER:HG	1:A:245:ASN:HD22	6	2.85
(4,144)	1:A:296:SER:HG	1:A:227:LEU:H	11	2.85
(4,214)	1:A:308:SER:HG	1:A:253:VAL:H	14	2.84
(4,204)	1:A:296:SER:HG	1:A:390:GLN:HE21	11	2.84
(4,204)	1:A:296:SER:HG	1:A:390:GLN:HE22	11	2.84
(4,142)	1:A:296:SER:HG	1:A:223:TYR:H	8	2.82
(4,152)	1:A:296:SER:HG	1:A:284:ASP:H	7	2.81
(4,137)	1:A:290:CYS:HG	1:A:426:GLU:H	13	2.81
(4,142)	1:A:296:SER:HG	1:A:223:TYR:H	1	2.8
(4,139)	1:A:290:CYS:HG	1:A:428:GLU:H	8	2.79
(4,111)	1:A:290:CYS:HG	1:A:221:GLY:H	14	2.79
(4,183)	1:A:308:SER:HG	1:A:416:ILE:H	7	2.78

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(4,142)	1:A:296:SER:HG	1:A:223:TYR:H	10	2.78
(4,202)	1:A:296:SER:HG	1:A:310:GLN:HE21	4	2.77
(4,202)	1:A:296:SER:HG	1:A:310:GLN:HE22	4	2.77
(4,217)	1:A:308:SER:HG	1:A:260:VAL:H	6	2.76
(4,143)	1:A:296:SER:HG	1:A:226:GLN:H	3	2.76
(4,142)	1:A:296:SER:HG	1:A:223:TYR:H	2	2.76
(4,183)	1:A:308:SER:HG	1:A:416:ILE:H	12	2.74
(4,148)	1:A:296:SER:HG	1:A:280:VAL:H	13	2.74
(4,134)	1:A:290:CYS:HG	1:A:403:PHE:H	8	2.74
(4,148)	1:A:296:SER:HG	1:A:280:VAL:H	7	2.73
(4,144)	1:A:296:SER:HG	1:A:227:LEU:H	7	2.73
(4,148)	1:A:296:SER:HG	1:A:280:VAL:H	15	2.72
(4,142)	1:A:296:SER:HG	1:A:223:TYR:H	13	2.72
(4,110)	1:A:290:CYS:HG	1:A:220:LEU:H	13	2.72
(4,209)	1:A:296:SER:HG	1:A:263:LEU:H	5	2.71
(4,139)	1:A:290:CYS:HG	1:A:428:GLU:H	6	2.7
(4,111)	1:A:290:CYS:HG	1:A:221:GLY:H	3	2.7
(4,143)	1:A:296:SER:HG	1:A:226:GLN:H	12	2.69
(4,202)	1:A:296:SER:HG	1:A:310:GLN:HE21	5	2.68
(4,202)	1:A:296:SER:HG	1:A:310:GLN:HE22	5	2.68
(4,142)	1:A:296:SER:HG	1:A:223:TYR:H	3	2.67
(4,142)	1:A:296:SER:HG	1:A:223:TYR:H	9	2.67
(4,216)	1:A:308:SER:HG	1:A:257:ILE:H	6	2.66
(4,142)	1:A:296:SER:HG	1:A:223:TYR:H	11	2.66
(4,139)	1:A:290:CYS:HG	1:A:428:GLU:H	4	2.66
(4,110)	1:A:290:CYS:HG	1:A:220:LEU:H	12	2.66
(4,209)	1:A:296:SER:HG	1:A:263:LEU:H	6	2.64
(4,160)	1:A:296:SER:HG	1:A:428:GLU:H	10	2.64
(4,110)	1:A:290:CYS:HG	1:A:220:LEU:H	3	2.64
(4,183)	1:A:308:SER:HG	1:A:416:ILE:H	8	2.63
(4,148)	1:A:296:SER:HG	1:A:280:VAL:H	12	2.63
(4,182)	1:A:308:SER:HG	1:A:415:TRP:H	5	2.62
(4,182)	1:A:308:SER:HG	1:A:415:TRP:H	14	2.62
(4,144)	1:A:296:SER:HG	1:A:227:LEU:H	15	2.62
(4,139)	1:A:290:CYS:HG	1:A:428:GLU:H	9	2.62
(4,111)	1:A:290:CYS:HG	1:A:221:GLY:H	9	2.62
(4,142)	1:A:296:SER:HG	1:A:223:TYR:H	15	2.61
(4,109)	1:A:290:CYS:HG	1:A:219:GLN:H	13	2.61
(4,139)	1:A:290:CYS:HG	1:A:428:GLU:H	3	2.6
(4,111)	1:A:290:CYS:HG	1:A:221:GLY:H	1	2.6
(4,155)	1:A:296:SER:HG	1:A:316:GLY:H	14	2.59
(4,175)	1:A:308:SER:HG	1:A:395:ILE:H	3	2.58

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(4,156)	1:A:296:SER:HG	1:A:317:GLY:H	10	2.58
(4,144)	1:A:296:SER:HG	1:A:227:LEU:H	3	2.58
(4,209)	1:A:296:SER:HG	1:A:263:LEU:H	1	2.57
(4,144)	1:A:296:SER:HG	1:A:227:LEU:H	14	2.57
(4,214)	1:A:308:SER:HG	1:A:253:VAL:H	2	2.56
(4,142)	1:A:296:SER:HG	1:A:223:TYR:H	7	2.56
(4,142)	1:A:296:SER:HG	1:A:223:TYR:H	14	2.56
(4,111)	1:A:290:CYS:HG	1:A:221:GLY:H	2	2.56
(4,209)	1:A:296:SER:HG	1:A:263:LEU:H	11	2.55
(4,160)	1:A:296:SER:HG	1:A:428:GLU:H	8	2.55
(4,160)	1:A:296:SER:HG	1:A:428:GLU:H	15	2.55
(4,137)	1:A:290:CYS:HG	1:A:426:GLU:H	15	2.55
(4,216)	1:A:308:SER:HG	1:A:257:ILE:H	5	2.54
(4,183)	1:A:308:SER:HG	1:A:416:ILE:H	13	2.54
(4,182)	1:A:308:SER:HG	1:A:415:TRP:H	7	2.54
(4,148)	1:A:296:SER:HG	1:A:280:VAL:H	8	2.54
(4,142)	1:A:296:SER:HG	1:A:223:TYR:H	4	2.54
(4,209)	1:A:296:SER:HG	1:A:263:LEU:H	9	2.53
(4,182)	1:A:308:SER:HG	1:A:415:TRP:H	10	2.52
(4,214)	1:A:308:SER:HG	1:A:253:VAL:H	10	2.51
(4,209)	1:A:296:SER:HG	1:A:263:LEU:H	4	2.51
(4,204)	1:A:296:SER:HG	1:A:390:GLN:HE21	7	2.51
(4,204)	1:A:296:SER:HG	1:A:390:GLN:HE22	7	2.51
(4,129)	1:A:290:CYS:HG	1:A:394:LYS:H	3	2.51
(4,202)	1:A:296:SER:HG	1:A:310:GLN:HE21	1	2.5
(4,202)	1:A:296:SER:HG	1:A:310:GLN:HE22	1	2.5
(4,162)	1:A:308:SER:HG	1:A:231:SER:H	1	2.5
(4,127)	1:A:290:CYS:HG	1:A:318:PHE:H	5	2.5
(4,111)	1:A:290:CYS:HG	1:A:221:GLY:H	6	2.5
(4,111)	1:A:290:CYS:HG	1:A:221:GLY:H	8	2.5
(4,209)	1:A:296:SER:HG	1:A:263:LEU:H	8	2.49
(4,202)	1:A:296:SER:HG	1:A:310:GLN:HE21	8	2.49
(4,202)	1:A:296:SER:HG	1:A:310:GLN:HE22	8	2.49
(4,160)	1:A:296:SER:HG	1:A:428:GLU:H	2	2.49
(4,148)	1:A:296:SER:HG	1:A:280:VAL:H	1	2.49
(4,214)	1:A:308:SER:HG	1:A:253:VAL:H	9	2.48
(4,128)	1:A:290:CYS:HG	1:A:390:GLN:H	9	2.48
(4,200)	1:A:308:SER:HG	1:A:245:ASN:HD21	5	2.47
(4,200)	1:A:308:SER:HG	1:A:245:ASN:HD22	5	2.47
(4,162)	1:A:308:SER:HG	1:A:231:SER:H	14	2.47
(4,111)	1:A:290:CYS:HG	1:A:221:GLY:H	11	2.46
(4,148)	1:A:296:SER:HG	1:A:280:VAL:H	10	2.45

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(4,130)	1:A:290:CYS:HG	1:A:396:ASP:H	8	2.45
(4,110)	1:A:290:CYS:HG	1:A:220:LEU:H	14	2.45
(4,110)	1:A:290:CYS:HG	1:A:220:LEU:H	15	2.45
(4,160)	1:A:296:SER:HG	1:A:428:GLU:H	4	2.44
(4,148)	1:A:296:SER:HG	1:A:280:VAL:H	2	2.44
(4,183)	1:A:308:SER:HG	1:A:416:ILE:H	9	2.43
(4,162)	1:A:308:SER:HG	1:A:231:SER:H	13	2.43
(4,183)	1:A:308:SER:HG	1:A:416:ILE:H	1	2.42
(4,183)	1:A:308:SER:HG	1:A:416:ILE:H	4	2.42
(4,183)	1:A:308:SER:HG	1:A:416:ILE:H	6	2.41
(4,183)	1:A:308:SER:HG	1:A:416:ILE:H	15	2.41
(4,182)	1:A:308:SER:HG	1:A:415:TRP:H	12	2.41
(4,134)	1:A:290:CYS:HG	1:A:403:PHE:H	3	2.41
(4,111)	1:A:290:CYS:HG	1:A:221:GLY:H	5	2.41
(4,139)	1:A:290:CYS:HG	1:A:428:GLU:H	12	2.4
(4,202)	1:A:296:SER:HG	1:A:310:GLN:HE21	6	2.38
(4,202)	1:A:296:SER:HG	1:A:310:GLN:HE22	6	2.38
(4,162)	1:A:308:SER:HG	1:A:231:SER:H	4	2.38
(4,160)	1:A:296:SER:HG	1:A:428:GLU:H	5	2.38
(4,139)	1:A:290:CYS:HG	1:A:428:GLU:H	13	2.38
(4,127)	1:A:290:CYS:HG	1:A:318:PHE:H	3	2.38
(4,209)	1:A:296:SER:HG	1:A:263:LEU:H	13	2.37
(4,183)	1:A:308:SER:HG	1:A:416:ILE:H	11	2.37
(4,182)	1:A:308:SER:HG	1:A:415:TRP:H	13	2.37
(4,162)	1:A:308:SER:HG	1:A:231:SER:H	10	2.37
(4,195)	1:A:296:SER:HG	1:A:218:ARG:HE	12	2.36
(4,217)	1:A:308:SER:HG	1:A:260:VAL:H	5	2.35
(4,216)	1:A:308:SER:HG	1:A:257:ILE:H	15	2.35
(4,209)	1:A:296:SER:HG	1:A:263:LEU:H	2	2.35
(4,109)	1:A:290:CYS:HG	1:A:219:GLN:H	12	2.35
(4,148)	1:A:296:SER:HG	1:A:280:VAL:H	6	2.34
(4,128)	1:A:290:CYS:HG	1:A:390:GLN:H	7	2.34
(4,195)	1:A:296:SER:HG	1:A:218:ARG:HE	7	2.33
(4,134)	1:A:290:CYS:HG	1:A:403:PHE:H	2	2.33
(4,209)	1:A:296:SER:HG	1:A:263:LEU:H	10	2.32
(4,182)	1:A:308:SER:HG	1:A:415:TRP:H	15	2.32
(4,168)	1:A:308:SER:HG	1:A:242:PHE:H	15	2.32
(4,139)	1:A:290:CYS:HG	1:A:428:GLU:H	1	2.32
(4,209)	1:A:296:SER:HG	1:A:263:LEU:H	15	2.31
(4,183)	1:A:308:SER:HG	1:A:416:ILE:H	2	2.31
(4,152)	1:A:296:SER:HG	1:A:284:ASP:H	11	2.31
(4,128)	1:A:290:CYS:HG	1:A:390:GLN:H	13	2.31

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(4,132)	1:A:290:CYS:HG	1:A:398:ILE:H	8	2.3
(4,204)	1:A:296:SER:HG	1:A:390:GLN:HE21	15	2.29
(4,204)	1:A:296:SER:HG	1:A:390:GLN:HE22	15	2.29
(4,109)	1:A:290:CYS:HG	1:A:219:GLN:H	3	2.29
(4,109)	1:A:290:CYS:HG	1:A:219:GLN:H	14	2.29
(4,128)	1:A:290:CYS:HG	1:A:390:GLN:H	11	2.27
(4,110)	1:A:290:CYS:HG	1:A:220:LEU:H	4	2.27
(4,163)	1:A:308:SER:HG	1:A:233:LEU:H	1	2.26
(4,163)	1:A:308:SER:HG	1:A:233:LEU:H	10	2.26
(4,148)	1:A:296:SER:HG	1:A:280:VAL:H	9	2.26
(4,128)	1:A:290:CYS:HG	1:A:390:GLN:H	2	2.26
(4,217)	1:A:308:SER:HG	1:A:260:VAL:H	15	2.25
(4,207)	1:A:290:CYS:HG	1:A:270:SER:H	3	2.25
(4,152)	1:A:296:SER:HG	1:A:284:ASP:H	12	2.25
(4,142)	1:A:296:SER:HG	1:A:223:TYR:H	12	2.25
(4,127)	1:A:290:CYS:HG	1:A:318:PHE:H	4	2.25
(4,134)	1:A:290:CYS:HG	1:A:403:PHE:H	7	2.24
(4,134)	1:A:290:CYS:HG	1:A:403:PHE:H	14	2.24
(4,148)	1:A:296:SER:HG	1:A:280:VAL:H	3	2.23
(4,148)	1:A:296:SER:HG	1:A:280:VAL:H	4	2.23
(4,163)	1:A:308:SER:HG	1:A:233:LEU:H	7	2.22
(4,183)	1:A:308:SER:HG	1:A:416:ILE:H	3	2.21
(4,162)	1:A:308:SER:HG	1:A:231:SER:H	15	2.21
(4,152)	1:A:296:SER:HG	1:A:284:ASP:H	10	2.21
(4,209)	1:A:296:SER:HG	1:A:263:LEU:H	3	2.2
(4,144)	1:A:296:SER:HG	1:A:227:LEU:H	12	2.2
(4,134)	1:A:290:CYS:HG	1:A:403:PHE:H	11	2.2
(4,122)	1:A:290:CYS:HG	1:A:312:GLU:H	1	2.2
(4,122)	1:A:290:CYS:HG	1:A:312:GLU:H	9	2.2
(4,111)	1:A:290:CYS:HG	1:A:221:GLY:H	10	2.2
(4,109)	1:A:290:CYS:HG	1:A:219:GLN:H	15	2.2
(4,209)	1:A:296:SER:HG	1:A:263:LEU:H	12	2.19
(4,129)	1:A:290:CYS:HG	1:A:394:LYS:H	7	2.19
(4,169)	1:A:308:SER:HG	1:A:243:TRP:H	5	2.18
(4,163)	1:A:308:SER:HG	1:A:233:LEU:H	13	2.17
(4,166)	1:A:308:SER:HG	1:A:239:TRP:H	6	2.16
(4,163)	1:A:308:SER:HG	1:A:233:LEU:H	14	2.16
(4,128)	1:A:290:CYS:HG	1:A:390:GLN:H	12	2.16
(4,163)	1:A:308:SER:HG	1:A:233:LEU:H	4	2.15
(4,109)	1:A:290:CYS:HG	1:A:219:GLN:H	4	2.14
(4,169)	1:A:308:SER:HG	1:A:243:TRP:H	6	2.13
(4,148)	1:A:296:SER:HG	1:A:280:VAL:H	14	2.13

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(4,138)	1:A:290:CYS:HG	1:A:427:PHE:H	6	2.13
(4,182)	1:A:308:SER:HG	1:A:415:TRP:H	8	2.12
(4,209)	1:A:296:SER:HG	1:A:263:LEU:H	14	2.11
(4,134)	1:A:290:CYS:HG	1:A:403:PHE:H	9	2.11
(4,110)	1:A:290:CYS:HG	1:A:220:LEU:H	9	2.11
(4,155)	1:A:296:SER:HG	1:A:316:GLY:H	8	2.1
(4,195)	1:A:296:SER:HG	1:A:218:ARG:HE	11	2.09
(4,162)	1:A:308:SER:HG	1:A:231:SER:H	12	2.09
(4,209)	1:A:296:SER:HG	1:A:263:LEU:H	7	2.08
(4,162)	1:A:308:SER:HG	1:A:231:SER:H	8	2.08
(4,149)	1:A:296:SER:HG	1:A:281:LYS:H	7	2.08
(4,110)	1:A:290:CYS:HG	1:A:220:LEU:H	2	2.07
(4,168)	1:A:308:SER:HG	1:A:242:PHE:H	4	2.06
(4,152)	1:A:296:SER:HG	1:A:284:ASP:H	3	2.06
(4,137)	1:A:290:CYS:HG	1:A:426:GLU:H	7	2.06
(4,217)	1:A:308:SER:HG	1:A:260:VAL:H	8	2.05
(4,163)	1:A:308:SER:HG	1:A:233:LEU:H	15	2.05
(4,134)	1:A:290:CYS:HG	1:A:403:PHE:H	10	2.03
(4,182)	1:A:308:SER:HG	1:A:415:TRP:H	9	2.02
(4,181)	1:A:308:SER:HG	1:A:411:ASN:H	6	2.02
(4,139)	1:A:290:CYS:HG	1:A:428:GLU:H	15	2.02
(4,109)	1:A:290:CYS:HG	1:A:219:GLN:H	2	2.02
(4,182)	1:A:308:SER:HG	1:A:415:TRP:H	6	2.01
(4,166)	1:A:308:SER:HG	1:A:239:TRP:H	5	2.01
(4,138)	1:A:290:CYS:HG	1:A:427:PHE:H	1	2.01
(4,110)	1:A:290:CYS:HG	1:A:220:LEU:H	8	2.01
(4,109)	1:A:290:CYS:HG	1:A:219:GLN:H	9	2.01
(4,217)	1:A:308:SER:HG	1:A:260:VAL:H	13	2.0
(4,195)	1:A:296:SER:HG	1:A:218:ARG:HE	8	2.0
(4,181)	1:A:308:SER:HG	1:A:411:ASN:H	9	2.0
(4,168)	1:A:308:SER:HG	1:A:242:PHE:H	1	2.0
(4,147)	1:A:296:SER:HG	1:A:279:TYR:H	8	2.0
(4,110)	1:A:290:CYS:HG	1:A:220:LEU:H	1	2.0
(4,134)	1:A:290:CYS:HG	1:A:403:PHE:H	12	1.99
(4,129)	1:A:290:CYS:HG	1:A:394:LYS:H	11	1.99
(4,127)	1:A:290:CYS:HG	1:A:318:PHE:H	1	1.99
(4,181)	1:A:308:SER:HG	1:A:411:ASN:H	5	1.97
(4,168)	1:A:308:SER:HG	1:A:242:PHE:H	13	1.96
(4,122)	1:A:290:CYS:HG	1:A:312:GLU:H	3	1.96
(4,147)	1:A:296:SER:HG	1:A:279:TYR:H	13	1.95
(4,129)	1:A:290:CYS:HG	1:A:394:LYS:H	2	1.95
(4,218)	1:A:308:SER:HG	1:A:263:LEU:H	6	1.94

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(4,181)	1:A:308:SER:HG	1:A:411:ASN:H	13	1.94
(4,162)	1:A:308:SER:HG	1:A:231:SER:H	11	1.94
(4,160)	1:A:296:SER:HG	1:A:428:GLU:H	9	1.94
(4,148)	1:A:296:SER:HG	1:A:280:VAL:H	5	1.94
(4,127)	1:A:290:CYS:HG	1:A:318:PHE:H	6	1.94
(4,111)	1:A:290:CYS:HG	1:A:221:GLY:H	7	1.94
(4,160)	1:A:296:SER:HG	1:A:428:GLU:H	1	1.93
(4,126)	1:A:290:CYS:HG	1:A:317:GLY:H	4	1.93
(4,110)	1:A:290:CYS:HG	1:A:220:LEU:H	11	1.93
(4,109)	1:A:290:CYS:HG	1:A:219:GLN:H	8	1.93
(4,163)	1:A:308:SER:HG	1:A:233:LEU:H	2	1.92
(4,182)	1:A:308:SER:HG	1:A:415:TRP:H	1	1.91
(4,182)	1:A:308:SER:HG	1:A:415:TRP:H	4	1.91
(4,156)	1:A:296:SER:HG	1:A:317:GLY:H	2	1.91
(4,110)	1:A:290:CYS:HG	1:A:220:LEU:H	6	1.91
(4,147)	1:A:296:SER:HG	1:A:279:TYR:H	15	1.9
(4,109)	1:A:290:CYS:HG	1:A:219:GLN:H	1	1.9
(4,181)	1:A:308:SER:HG	1:A:411:ASN:H	4	1.89
(4,181)	1:A:308:SER:HG	1:A:411:ASN:H	15	1.89
(4,163)	1:A:308:SER:HG	1:A:233:LEU:H	11	1.89
(4,137)	1:A:290:CYS:HG	1:A:426:GLU:H	10	1.89
(4,110)	1:A:290:CYS:HG	1:A:220:LEU:H	10	1.88
(4,163)	1:A:308:SER:HG	1:A:233:LEU:H	12	1.87
(4,152)	1:A:296:SER:HG	1:A:284:ASP:H	14	1.87
(4,129)	1:A:290:CYS:HG	1:A:394:LYS:H	10	1.87
(4,109)	1:A:290:CYS:HG	1:A:219:GLN:H	6	1.87
(4,217)	1:A:308:SER:HG	1:A:260:VAL:H	4	1.86
(4,181)	1:A:308:SER:HG	1:A:411:ASN:H	7	1.86
(4,177)	1:A:308:SER:HG	1:A:398:ILE:H	15	1.86
(4,136)	1:A:290:CYS:HG	1:A:419:LYS:H	1	1.86
(4,214)	1:A:308:SER:HG	1:A:253:VAL:H	11	1.85
(4,212)	1:A:296:SER:HG	1:A:271:ARG:H	13	1.85
(4,182)	1:A:308:SER:HG	1:A:415:TRP:H	11	1.85
(4,181)	1:A:308:SER:HG	1:A:411:ASN:H	8	1.85
(4,160)	1:A:296:SER:HG	1:A:428:GLU:H	12	1.85
(4,155)	1:A:296:SER:HG	1:A:316:GLY:H	10	1.85
(4,212)	1:A:296:SER:HG	1:A:271:ARG:H	3	1.84
(4,208)	1:A:290:CYS:HG	1:A:271:ARG:H	3	1.84
(4,181)	1:A:308:SER:HG	1:A:411:ASN:H	2	1.84
(4,182)	1:A:308:SER:HG	1:A:415:TRP:H	2	1.83
(4,163)	1:A:308:SER:HG	1:A:233:LEU:H	8	1.83
(4,151)	1:A:296:SER:HG	1:A:283:ILE:H	8	1.83

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(4,139)	1:A:290:CYS:HG	1:A:428:GLU:H	7	1.83
(4,181)	1:A:308:SER:HG	1:A:411:ASN:H	1	1.81
(4,109)	1:A:290:CYS:HG	1:A:219:GLN:H	11	1.81
(4,204)	1:A:296:SER:HG	1:A:390:GLN:HE21	3	1.8
(4,204)	1:A:296:SER:HG	1:A:390:GLN:HE22	3	1.8
(4,200)	1:A:308:SER:HG	1:A:245:ASN:HD21	15	1.8
(4,200)	1:A:308:SER:HG	1:A:245:ASN:HD22	15	1.8
(4,181)	1:A:308:SER:HG	1:A:411:ASN:H	11	1.8
(4,181)	1:A:308:SER:HG	1:A:411:ASN:H	12	1.8
(4,168)	1:A:308:SER:HG	1:A:242:PHE:H	7	1.8
(4,217)	1:A:308:SER:HG	1:A:260:VAL:H	1	1.79
(4,212)	1:A:296:SER:HG	1:A:271:ARG:H	15	1.79
(4,162)	1:A:308:SER:HG	1:A:231:SER:H	2	1.79
(4,129)	1:A:290:CYS:HG	1:A:394:LYS:H	1	1.77
(4,181)	1:A:308:SER:HG	1:A:411:ASN:H	10	1.76
(4,162)	1:A:308:SER:HG	1:A:231:SER:H	7	1.76
(4,160)	1:A:296:SER:HG	1:A:428:GLU:H	6	1.76
(4,122)	1:A:290:CYS:HG	1:A:312:GLU:H	11	1.76
(4,181)	1:A:308:SER:HG	1:A:411:ASN:H	14	1.75
(4,171)	1:A:308:SER:HG	1:A:291:LEU:H	10	1.75
(4,147)	1:A:296:SER:HG	1:A:279:TYR:H	2	1.75
(4,127)	1:A:290:CYS:HG	1:A:318:PHE:H	8	1.75
(4,163)	1:A:308:SER:HG	1:A:233:LEU:H	9	1.74
(4,162)	1:A:308:SER:HG	1:A:231:SER:H	3	1.74
(4,151)	1:A:296:SER:HG	1:A:283:ILE:H	15	1.72
(4,149)	1:A:296:SER:HG	1:A:281:LYS:H	10	1.72
(4,147)	1:A:296:SER:HG	1:A:279:TYR:H	1	1.72
(4,136)	1:A:290:CYS:HG	1:A:419:LYS:H	4	1.72
(4,125)	1:A:290:CYS:HG	1:A:316:GLY:H	15	1.71
(4,216)	1:A:308:SER:HG	1:A:257:ILE:H	4	1.7
(4,181)	1:A:308:SER:HG	1:A:411:ASN:H	3	1.7
(4,162)	1:A:308:SER:HG	1:A:231:SER:H	9	1.7
(4,110)	1:A:290:CYS:HG	1:A:220:LEU:H	5	1.7
(4,109)	1:A:290:CYS:HG	1:A:219:GLN:H	5	1.7
(4,217)	1:A:308:SER:HG	1:A:260:VAL:H	10	1.69
(4,182)	1:A:308:SER:HG	1:A:415:TRP:H	3	1.69
(4,175)	1:A:308:SER:HG	1:A:395:ILE:H	8	1.69
(4,129)	1:A:290:CYS:HG	1:A:394:LYS:H	9	1.69
(4,195)	1:A:296:SER:HG	1:A:218:ARG:HE	5	1.68
(4,168)	1:A:308:SER:HG	1:A:242:PHE:H	3	1.68
(4,147)	1:A:296:SER:HG	1:A:279:TYR:H	11	1.68
(4,145)	1:A:296:SER:HG	1:A:277:VAL:H	7	1.68

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(4,128)	1:A:290:CYS:HG	1:A:390:GLN:H	3	1.68
(4,177)	1:A:308:SER:HG	1:A:398:ILE:H	6	1.67
(4,128)	1:A:290:CYS:HG	1:A:390:GLN:H	15	1.67
(4,109)	1:A:290:CYS:HG	1:A:219:GLN:H	10	1.67
(4,149)	1:A:296:SER:HG	1:A:281:LYS:H	11	1.65
(4,122)	1:A:290:CYS:HG	1:A:312:GLU:H	12	1.65
(4,216)	1:A:308:SER:HG	1:A:257:ILE:H	8	1.64
(4,195)	1:A:296:SER:HG	1:A:218:ARG:HE	10	1.63
(4,168)	1:A:308:SER:HG	1:A:242:PHE:H	12	1.63
(4,149)	1:A:296:SER:HG	1:A:281:LYS:H	3	1.63
(4,198)	1:A:296:SER:HG	1:A:226:GLN:HE21	5	1.62
(4,198)	1:A:296:SER:HG	1:A:226:GLN:HE22	5	1.62
(4,198)	1:A:296:SER:HG	1:A:226:GLN:HE21	6	1.62
(4,198)	1:A:296:SER:HG	1:A:226:GLN:HE22	6	1.62
(4,168)	1:A:308:SER:HG	1:A:242:PHE:H	2	1.62
(4,147)	1:A:296:SER:HG	1:A:279:TYR:H	6	1.6
(4,216)	1:A:308:SER:HG	1:A:257:ILE:H	13	1.59
(4,212)	1:A:296:SER:HG	1:A:271:ARG:H	8	1.59
(4,138)	1:A:290:CYS:HG	1:A:427:PHE:H	3	1.59
(4,151)	1:A:296:SER:HG	1:A:283:ILE:H	2	1.58
(4,150)	1:A:296:SER:HG	1:A:282:ALA:H	7	1.58
(4,145)	1:A:296:SER:HG	1:A:277:VAL:H	11	1.58
(4,171)	1:A:308:SER:HG	1:A:291:LEU:H	14	1.57
(4,168)	1:A:308:SER:HG	1:A:242:PHE:H	8	1.56
(4,168)	1:A:308:SER:HG	1:A:242:PHE:H	10	1.55
(4,151)	1:A:296:SER:HG	1:A:283:ILE:H	7	1.55
(4,137)	1:A:290:CYS:HG	1:A:426:GLU:H	2	1.55
(4,128)	1:A:290:CYS:HG	1:A:390:GLN:H	8	1.55
(4,168)	1:A:308:SER:HG	1:A:242:PHE:H	14	1.54
(4,152)	1:A:296:SER:HG	1:A:284:ASP:H	13	1.54
(4,217)	1:A:308:SER:HG	1:A:260:VAL:H	3	1.53
(4,217)	1:A:308:SER:HG	1:A:260:VAL:H	12	1.53
(4,150)	1:A:296:SER:HG	1:A:282:ALA:H	13	1.53
(4,127)	1:A:290:CYS:HG	1:A:318:PHE:H	14	1.53
(4,151)	1:A:296:SER:HG	1:A:283:ILE:H	13	1.52
(4,129)	1:A:290:CYS:HG	1:A:394:LYS:H	12	1.52
(4,216)	1:A:308:SER:HG	1:A:257:ILE:H	3	1.51
(4,171)	1:A:308:SER:HG	1:A:291:LEU:H	4	1.51
(4,152)	1:A:296:SER:HG	1:A:284:ASP:H	1	1.51
(4,145)	1:A:296:SER:HG	1:A:277:VAL:H	1	1.51
(4,177)	1:A:308:SER:HG	1:A:398:ILE:H	5	1.5
(4,168)	1:A:308:SER:HG	1:A:242:PHE:H	9	1.5

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(4,160)	1:A:296:SER:HG	1:A:428:GLU:H	11	1.5
(4,150)	1:A:296:SER:HG	1:A:282:ALA:H	11	1.5
(4,149)	1:A:296:SER:HG	1:A:281:LYS:H	12	1.5
(4,122)	1:A:290:CYS:HG	1:A:312:GLU:H	13	1.5
(4,152)	1:A:296:SER:HG	1:A:284:ASP:H	8	1.49
(4,138)	1:A:290:CYS:HG	1:A:427:PHE:H	4	1.49
(4,137)	1:A:290:CYS:HG	1:A:426:GLU:H	11	1.49
(4,217)	1:A:308:SER:HG	1:A:260:VAL:H	14	1.48
(4,151)	1:A:296:SER:HG	1:A:283:ILE:H	11	1.48
(4,128)	1:A:290:CYS:HG	1:A:390:GLN:H	1	1.48
(4,212)	1:A:296:SER:HG	1:A:271:ARG:H	6	1.47
(4,171)	1:A:308:SER:HG	1:A:291:LEU:H	1	1.47
(4,163)	1:A:308:SER:HG	1:A:233:LEU:H	3	1.47
(4,160)	1:A:296:SER:HG	1:A:428:GLU:H	14	1.47
(4,152)	1:A:296:SER:HG	1:A:284:ASP:H	15	1.47
(4,137)	1:A:290:CYS:HG	1:A:426:GLU:H	1	1.47
(4,126)	1:A:290:CYS:HG	1:A:317:GLY:H	6	1.47
(4,110)	1:A:290:CYS:HG	1:A:220:LEU:H	7	1.47
(4,168)	1:A:308:SER:HG	1:A:242:PHE:H	11	1.46
(4,171)	1:A:308:SER:HG	1:A:291:LEU:H	5	1.45
(4,152)	1:A:296:SER:HG	1:A:284:ASP:H	6	1.45
(4,205)	1:A:290:CYS:HG	1:A:400:ARG:HH21	1	1.44
(4,205)	1:A:290:CYS:HG	1:A:400:ARG:HH22	1	1.44
(4,122)	1:A:290:CYS:HG	1:A:312:GLU:H	7	1.44
(4,218)	1:A:308:SER:HG	1:A:263:LEU:H	15	1.43
(4,212)	1:A:296:SER:HG	1:A:271:ARG:H	1	1.43
(4,200)	1:A:308:SER:HG	1:A:245:ASN:HD21	13	1.43
(4,200)	1:A:308:SER:HG	1:A:245:ASN:HD22	13	1.43
(4,145)	1:A:296:SER:HG	1:A:277:VAL:H	10	1.43
(4,129)	1:A:290:CYS:HG	1:A:394:LYS:H	13	1.43
(4,156)	1:A:296:SER:HG	1:A:317:GLY:H	12	1.42
(4,136)	1:A:290:CYS:HG	1:A:419:LYS:H	13	1.41
(4,109)	1:A:290:CYS:HG	1:A:219:GLN:H	7	1.41
(4,216)	1:A:308:SER:HG	1:A:257:ILE:H	1	1.4
(4,176)	1:A:308:SER:HG	1:A:396:ASP:H	3	1.4
(4,147)	1:A:296:SER:HG	1:A:279:TYR:H	4	1.4
(4,136)	1:A:290:CYS:HG	1:A:419:LYS:H	6	1.4
(4,195)	1:A:296:SER:HG	1:A:218:ARG:HE	2	1.39
(4,171)	1:A:308:SER:HG	1:A:291:LEU:H	6	1.39
(4,155)	1:A:296:SER:HG	1:A:316:GLY:H	2	1.39
(4,147)	1:A:296:SER:HG	1:A:279:TYR:H	9	1.39
(4,150)	1:A:296:SER:HG	1:A:282:ALA:H	1	1.38

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(4,218)	1:A:308:SER:HG	1:A:263:LEU:H	5	1.37
(4,122)	1:A:290:CYS:HG	1:A:312:GLU:H	5	1.37
(4,212)	1:A:296:SER:HG	1:A:271:ARG:H	2	1.35
(4,152)	1:A:296:SER:HG	1:A:284:ASP:H	9	1.35
(4,137)	1:A:290:CYS:HG	1:A:426:GLU:H	6	1.34
(4,150)	1:A:296:SER:HG	1:A:282:ALA:H	10	1.33
(4,125)	1:A:290:CYS:HG	1:A:316:GLY:H	3	1.33
(4,218)	1:A:308:SER:HG	1:A:263:LEU:H	8	1.32
(4,166)	1:A:308:SER:HG	1:A:239:TRP:H	7	1.32
(4,155)	1:A:296:SER:HG	1:A:316:GLY:H	3	1.32
(4,218)	1:A:308:SER:HG	1:A:263:LEU:H	13	1.31
(4,212)	1:A:296:SER:HG	1:A:271:ARG:H	4	1.31
(4,196)	1:A:290:CYS:HG	1:A:219:GLN:HE21	13	1.31
(4,196)	1:A:290:CYS:HG	1:A:219:GLN:HE22	13	1.31
(4,171)	1:A:308:SER:HG	1:A:291:LEU:H	13	1.31
(4,200)	1:A:308:SER:HG	1:A:245:ASN:HD21	4	1.3
(4,200)	1:A:308:SER:HG	1:A:245:ASN:HD22	4	1.3
(4,155)	1:A:296:SER:HG	1:A:316:GLY:H	12	1.3
(4,152)	1:A:296:SER:HG	1:A:284:ASP:H	4	1.3
(4,145)	1:A:296:SER:HG	1:A:277:VAL:H	3	1.3
(4,157)	1:A:296:SER:HG	1:A:418:TYR:H	7	1.29
(4,152)	1:A:296:SER:HG	1:A:284:ASP:H	2	1.29
(4,138)	1:A:290:CYS:HG	1:A:427:PHE:H	2	1.29
(4,128)	1:A:290:CYS:HG	1:A:390:GLN:H	4	1.29
(4,128)	1:A:290:CYS:HG	1:A:390:GLN:H	6	1.29
(4,126)	1:A:290:CYS:HG	1:A:317:GLY:H	8	1.29
(4,212)	1:A:296:SER:HG	1:A:271:ARG:H	11	1.28
(4,200)	1:A:308:SER:HG	1:A:245:ASN:HD21	1	1.27
(4,200)	1:A:308:SER:HG	1:A:245:ASN:HD22	1	1.27
(4,171)	1:A:308:SER:HG	1:A:291:LEU:H	7	1.27
(4,171)	1:A:308:SER:HG	1:A:291:LEU:H	8	1.27
(4,150)	1:A:296:SER:HG	1:A:282:ALA:H	8	1.27
(4,145)	1:A:296:SER:HG	1:A:277:VAL:H	9	1.27
(4,208)	1:A:290:CYS:HG	1:A:271:ARG:H	13	1.26
(4,127)	1:A:290:CYS:HG	1:A:318:PHE:H	10	1.26
(4,149)	1:A:296:SER:HG	1:A:281:LYS:H	1	1.25
(4,129)	1:A:290:CYS:HG	1:A:394:LYS:H	4	1.25
(4,150)	1:A:296:SER:HG	1:A:282:ALA:H	3	1.24
(4,145)	1:A:296:SER:HG	1:A:277:VAL:H	6	1.24
(4,128)	1:A:290:CYS:HG	1:A:390:GLN:H	5	1.24
(4,145)	1:A:296:SER:HG	1:A:277:VAL:H	4	1.23
(4,139)	1:A:290:CYS:HG	1:A:428:GLU:H	14	1.23

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(4,125)	1:A:290:CYS:HG	1:A:316:GLY:H	7	1.23
(4,218)	1:A:308:SER:HG	1:A:263:LEU:H	1	1.22
(4,150)	1:A:296:SER:HG	1:A:282:ALA:H	15	1.22
(4,149)	1:A:296:SER:HG	1:A:281:LYS:H	14	1.21
(4,108)	1:A:290:CYS:HG	1:A:217:GLU:H	3	1.2
(4,218)	1:A:308:SER:HG	1:A:263:LEU:H	10	1.19
(4,136)	1:A:290:CYS:HG	1:A:419:LYS:H	3	1.19
(4,156)	1:A:296:SER:HG	1:A:317:GLY:H	9	1.18
(4,151)	1:A:296:SER:HG	1:A:283:ILE:H	10	1.18
(4,151)	1:A:296:SER:HG	1:A:283:ILE:H	12	1.17
(4,136)	1:A:290:CYS:HG	1:A:419:LYS:H	15	1.17
(4,218)	1:A:308:SER:HG	1:A:263:LEU:H	4	1.16
(4,139)	1:A:290:CYS:HG	1:A:428:GLU:H	10	1.16
(4,136)	1:A:290:CYS:HG	1:A:419:LYS:H	5	1.16
(4,129)	1:A:290:CYS:HG	1:A:394:LYS:H	6	1.16
(4,126)	1:A:290:CYS:HG	1:A:317:GLY:H	5	1.16
(4,208)	1:A:290:CYS:HG	1:A:271:ARG:H	2	1.15
(4,200)	1:A:308:SER:HG	1:A:245:ASN:HD21	3	1.15
(4,200)	1:A:308:SER:HG	1:A:245:ASN:HD22	3	1.15
(4,171)	1:A:308:SER:HG	1:A:291:LEU:H	15	1.15
(4,150)	1:A:296:SER:HG	1:A:282:ALA:H	6	1.14
(4,129)	1:A:290:CYS:HG	1:A:394:LYS:H	5	1.14
(4,152)	1:A:296:SER:HG	1:A:284:ASP:H	5	1.13
(4,108)	1:A:290:CYS:HG	1:A:217:GLU:H	13	1.13
(4,211)	1:A:296:SER:HG	1:A:267:SER:H	14	1.12
(4,150)	1:A:296:SER:HG	1:A:282:ALA:H	12	1.12
(4,147)	1:A:296:SER:HG	1:A:279:TYR:H	5	1.12
(4,136)	1:A:290:CYS:HG	1:A:419:LYS:H	2	1.11
(4,122)	1:A:290:CYS:HG	1:A:312:GLU:H	8	1.11
(4,171)	1:A:308:SER:HG	1:A:291:LEU:H	11	1.1
(4,150)	1:A:296:SER:HG	1:A:282:ALA:H	2	1.1
(4,122)	1:A:290:CYS:HG	1:A:312:GLU:H	15	1.1
(4,150)	1:A:296:SER:HG	1:A:282:ALA:H	9	1.09
(4,147)	1:A:296:SER:HG	1:A:279:TYR:H	7	1.09
(4,212)	1:A:296:SER:HG	1:A:271:ARG:H	5	1.08
(4,196)	1:A:290:CYS:HG	1:A:219:GLN:HE21	12	1.08
(4,196)	1:A:290:CYS:HG	1:A:219:GLN:HE22	12	1.08
(4,195)	1:A:296:SER:HG	1:A:218:ARG:HE	14	1.08
(4,151)	1:A:296:SER:HG	1:A:283:ILE:H	1	1.08
(4,150)	1:A:296:SER:HG	1:A:282:ALA:H	4	1.07
(4,145)	1:A:296:SER:HG	1:A:277:VAL:H	14	1.07
(4,136)	1:A:290:CYS:HG	1:A:419:LYS:H	11	1.07

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(4,129)	1:A:290:CYS:HG	1:A:394:LYS:H	14	1.07
(4,196)	1:A:290:CYS:HG	1:A:219:GLN:HE21	3	1.06
(4,196)	1:A:290:CYS:HG	1:A:219:GLN:HE22	3	1.06
(4,196)	1:A:290:CYS:HG	1:A:219:GLN:HE21	15	1.06
(4,196)	1:A:290:CYS:HG	1:A:219:GLN:HE22	15	1.06
(4,211)	1:A:296:SER:HG	1:A:267:SER:H	7	1.05
(4,205)	1:A:290:CYS:HG	1:A:400:ARG:HH21	4	1.05
(4,205)	1:A:290:CYS:HG	1:A:400:ARG:HH22	4	1.05
(4,145)	1:A:296:SER:HG	1:A:277:VAL:H	12	1.05
(4,135)	1:A:290:CYS:HG	1:A:418:TYR:H	13	1.04
(4,128)	1:A:290:CYS:HG	1:A:390:GLN:H	14	1.04
(4,126)	1:A:290:CYS:HG	1:A:317:GLY:H	14	1.03
(4,122)	1:A:290:CYS:HG	1:A:312:GLU:H	2	1.02
(4,211)	1:A:296:SER:HG	1:A:267:SER:H	12	1.01
(4,149)	1:A:296:SER:HG	1:A:281:LYS:H	13	1.01
(4,138)	1:A:290:CYS:HG	1:A:427:PHE:H	5	1.01
(4,136)	1:A:290:CYS:HG	1:A:419:LYS:H	8	1.01
(4,129)	1:A:290:CYS:HG	1:A:394:LYS:H	15	1.01
(4,196)	1:A:290:CYS:HG	1:A:219:GLN:HE21	14	0.99
(4,196)	1:A:290:CYS:HG	1:A:219:GLN:HE22	14	0.99
(4,125)	1:A:290:CYS:HG	1:A:316:GLY:H	11	0.99
(4,217)	1:A:308:SER:HG	1:A:260:VAL:H	9	0.98
(4,149)	1:A:296:SER:HG	1:A:281:LYS:H	9	0.98
(4,138)	1:A:290:CYS:HG	1:A:427:PHE:H	11	0.98
(4,171)	1:A:308:SER:HG	1:A:291:LEU:H	2	0.97
(4,218)	1:A:308:SER:HG	1:A:263:LEU:H	14	0.96
(4,208)	1:A:290:CYS:HG	1:A:271:ARG:H	8	0.96
(4,171)	1:A:308:SER:HG	1:A:291:LEU:H	9	0.96
(4,171)	1:A:308:SER:HG	1:A:291:LEU:H	12	0.96
(4,166)	1:A:308:SER:HG	1:A:239:TRP:H	2	0.96
(4,166)	1:A:308:SER:HG	1:A:239:TRP:H	10	0.96
(4,151)	1:A:296:SER:HG	1:A:283:ILE:H	3	0.96
(4,138)	1:A:290:CYS:HG	1:A:427:PHE:H	14	0.96
(4,149)	1:A:296:SER:HG	1:A:281:LYS:H	4	0.95
(4,149)	1:A:296:SER:HG	1:A:281:LYS:H	6	0.95
(4,145)	1:A:296:SER:HG	1:A:277:VAL:H	8	0.95
(4,108)	1:A:290:CYS:HG	1:A:217:GLU:H	14	0.95
(4,216)	1:A:308:SER:HG	1:A:257:ILE:H	12	0.94
(4,198)	1:A:296:SER:HG	1:A:226:GLN:HE21	1	0.94
(4,198)	1:A:296:SER:HG	1:A:226:GLN:HE22	1	0.94
(4,166)	1:A:308:SER:HG	1:A:239:TRP:H	13	0.94
(4,121)	1:A:290:CYS:HG	1:A:309:ARG:H	7	0.94

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(4,121)	1:A:290:CYS:HG	1:A:309:ARG:H	9	0.94
(4,212)	1:A:296:SER:HG	1:A:271:ARG:H	9	0.93
(4,211)	1:A:296:SER:HG	1:A:267:SER:H	10	0.93
(4,145)	1:A:296:SER:HG	1:A:277:VAL:H	15	0.93
(4,217)	1:A:308:SER:HG	1:A:260:VAL:H	11	0.92
(4,198)	1:A:296:SER:HG	1:A:226:GLN:HE21	7	0.92
(4,198)	1:A:296:SER:HG	1:A:226:GLN:HE22	7	0.92
(4,172)	1:A:308:SER:HG	1:A:295:PHE:H	1	0.92
(4,147)	1:A:296:SER:HG	1:A:279:TYR:H	3	0.92
(4,126)	1:A:290:CYS:HG	1:A:317:GLY:H	15	0.92
(4,216)	1:A:308:SER:HG	1:A:257:ILE:H	14	0.91
(4,157)	1:A:296:SER:HG	1:A:418:TYR:H	10	0.91
(4,151)	1:A:296:SER:HG	1:A:283:ILE:H	6	0.91
(4,147)	1:A:296:SER:HG	1:A:279:TYR:H	10	0.91
(4,115)	1:A:290:CYS:HG	1:A:248:ALA:H	3	0.91
(4,208)	1:A:290:CYS:HG	1:A:271:ARG:H	15	0.9
(4,200)	1:A:308:SER:HG	1:A:245:ASN:HD21	8	0.9
(4,200)	1:A:308:SER:HG	1:A:245:ASN:HD22	8	0.9
(4,198)	1:A:296:SER:HG	1:A:226:GLN:HE21	2	0.9
(4,198)	1:A:296:SER:HG	1:A:226:GLN:HE22	2	0.9
(4,147)	1:A:296:SER:HG	1:A:279:TYR:H	12	0.9
(4,121)	1:A:290:CYS:HG	1:A:309:ARG:H	12	0.9
(4,216)	1:A:308:SER:HG	1:A:257:ILE:H	10	0.89
(4,151)	1:A:296:SER:HG	1:A:283:ILE:H	9	0.89
(4,135)	1:A:290:CYS:HG	1:A:418:TYR:H	5	0.89
(4,125)	1:A:290:CYS:HG	1:A:316:GLY:H	1	0.89
(4,211)	1:A:296:SER:HG	1:A:267:SER:H	2	0.88
(4,211)	1:A:296:SER:HG	1:A:267:SER:H	15	0.88
(4,121)	1:A:290:CYS:HG	1:A:309:ARG:H	2	0.88
(4,211)	1:A:296:SER:HG	1:A:267:SER:H	3	0.87
(4,211)	1:A:296:SER:HG	1:A:267:SER:H	13	0.87
(4,196)	1:A:290:CYS:HG	1:A:219:GLN:HE21	4	0.87
(4,196)	1:A:290:CYS:HG	1:A:219:GLN:HE22	4	0.87
(4,196)	1:A:290:CYS:HG	1:A:219:GLN:HE21	9	0.87
(4,196)	1:A:290:CYS:HG	1:A:219:GLN:HE22	9	0.87
(4,172)	1:A:308:SER:HG	1:A:295:PHE:H	14	0.87
(4,155)	1:A:296:SER:HG	1:A:316:GLY:H	9	0.87
(4,158)	1:A:296:SER:HG	1:A:419:LYS:H	7	0.86
(4,151)	1:A:296:SER:HG	1:A:283:ILE:H	4	0.86
(4,137)	1:A:290:CYS:HG	1:A:426:GLU:H	5	0.86
(4,125)	1:A:290:CYS:HG	1:A:316:GLY:H	13	0.86
(4,198)	1:A:296:SER:HG	1:A:226:GLN:HE21	4	0.85

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(4,198)	1:A:296:SER:HG	1:A:226:GLN:HE22	4	0.85
(4,166)	1:A:308:SER:HG	1:A:239:TRP:H	1	0.85
(4,150)	1:A:296:SER:HG	1:A:282:ALA:H	5	0.85
(4,145)	1:A:296:SER:HG	1:A:277:VAL:H	5	0.85
(4,125)	1:A:290:CYS:HG	1:A:316:GLY:H	5	0.85
(4,151)	1:A:296:SER:HG	1:A:283:ILE:H	14	0.84
(4,150)	1:A:296:SER:HG	1:A:282:ALA:H	14	0.84
(4,135)	1:A:290:CYS:HG	1:A:418:TYR:H	1	0.84
(4,198)	1:A:296:SER:HG	1:A:226:GLN:HE21	8	0.83
(4,198)	1:A:296:SER:HG	1:A:226:GLN:HE22	8	0.83
(4,135)	1:A:290:CYS:HG	1:A:418:TYR:H	6	0.83
(4,125)	1:A:290:CYS:HG	1:A:316:GLY:H	9	0.82
(4,121)	1:A:290:CYS:HG	1:A:309:ARG:H	15	0.82
(4,218)	1:A:308:SER:HG	1:A:263:LEU:H	12	0.81
(4,166)	1:A:308:SER:HG	1:A:239:TRP:H	15	0.81
(4,136)	1:A:290:CYS:HG	1:A:419:LYS:H	9	0.81
(2,27)	1:A:276:LYS:O	1:A:280:VAL:N	13	0.81
(4,198)	1:A:296:SER:HG	1:A:226:GLN:HE21	9	0.8
(4,198)	1:A:296:SER:HG	1:A:226:GLN:HE22	9	0.8
(4,172)	1:A:308:SER:HG	1:A:295:PHE:H	10	0.8
(4,169)	1:A:308:SER:HG	1:A:243:TRP:H	15	0.8
(4,145)	1:A:296:SER:HG	1:A:277:VAL:H	13	0.8
(2,28)	1:A:277:VAL:O	1:A:281:LYS:N	3	0.8
(2,28)	1:A:277:VAL:O	1:A:281:LYS:N	12	0.8
(2,28)	1:A:277:VAL:O	1:A:281:LYS:N	14	0.8
(2,27)	1:A:276:LYS:O	1:A:280:VAL:N	15	0.8
(2,14)	1:A:236:ILE:O	1:A:240:ILE:N	7	0.8
(4,217)	1:A:308:SER:HG	1:A:260:VAL:H	7	0.79
(4,138)	1:A:290:CYS:HG	1:A:427:PHE:H	13	0.79
(2,3)	1:A:222:TYR:O	1:A:226:GLN:N	12	0.79
(2,14)	1:A:236:ILE:O	1:A:240:ILE:N	6	0.79
(2,14)	1:A:236:ILE:O	1:A:240:ILE:N	10	0.79
(2,14)	1:A:236:ILE:O	1:A:240:ILE:N	11	0.79
(2,14)	1:A:236:ILE:O	1:A:240:ILE:N	14	0.79
(4,217)	1:A:308:SER:HG	1:A:260:VAL:H	2	0.78
(4,198)	1:A:296:SER:HG	1:A:226:GLN:HE21	10	0.78
(4,198)	1:A:296:SER:HG	1:A:226:GLN:HE22	10	0.78
(4,196)	1:A:290:CYS:HG	1:A:219:GLN:HE21	2	0.78
(4,196)	1:A:290:CYS:HG	1:A:219:GLN:HE22	2	0.78
(4,169)	1:A:308:SER:HG	1:A:243:TRP:H	4	0.78
(4,166)	1:A:308:SER:HG	1:A:239:TRP:H	12	0.78
(2,39)	1:A:300:GLU:O	1:A:304:VAL:N	6	0.78

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,33)	1:A:292:LEU:O	1:A:296:SER:N	2	0.78
(2,33)	1:A:292:LEU:O	1:A:296:SER:N	4	0.78
(2,33)	1:A:292:LEU:O	1:A:296:SER:N	6	0.78
(2,33)	1:A:292:LEU:O	1:A:296:SER:N	9	0.78
(2,33)	1:A:292:LEU:O	1:A:296:SER:N	11	0.78
(2,33)	1:A:292:LEU:O	1:A:296:SER:N	12	0.78
(2,33)	1:A:292:LEU:O	1:A:296:SER:N	14	0.78
(2,33)	1:A:292:LEU:O	1:A:296:SER:N	15	0.78
(2,14)	1:A:236:ILE:O	1:A:240:ILE:N	2	0.78
(2,14)	1:A:236:ILE:O	1:A:240:ILE:N	3	0.78
(2,14)	1:A:236:ILE:O	1:A:240:ILE:N	4	0.78
(2,14)	1:A:236:ILE:O	1:A:240:ILE:N	9	0.78
(2,14)	1:A:236:ILE:O	1:A:240:ILE:N	12	0.78
(2,14)	1:A:236:ILE:O	1:A:240:ILE:N	13	0.78
(2,14)	1:A:236:ILE:O	1:A:240:ILE:N	15	0.78
(4,218)	1:A:308:SER:HG	1:A:263:LEU:H	3	0.77
(4,211)	1:A:296:SER:HG	1:A:267:SER:H	8	0.77
(4,158)	1:A:296:SER:HG	1:A:419:LYS:H	10	0.77
(4,157)	1:A:296:SER:HG	1:A:418:TYR:H	13	0.77
(2,53)	1:A:414:TYR:O	1:A:418:TYR:N	5	0.77
(2,53)	1:A:414:TYR:O	1:A:418:TYR:N	6	0.77
(2,53)	1:A:414:TYR:O	1:A:418:TYR:N	7	0.77
(2,53)	1:A:414:TYR:O	1:A:418:TYR:N	13	0.77
(2,53)	1:A:414:TYR:O	1:A:418:TYR:N	15	0.77
(2,39)	1:A:300:GLU:O	1:A:304:VAL:N	1	0.77
(2,39)	1:A:300:GLU:O	1:A:304:VAL:N	4	0.77
(2,39)	1:A:300:GLU:O	1:A:304:VAL:N	5	0.77
(2,39)	1:A:300:GLU:O	1:A:304:VAL:N	7	0.77
(2,39)	1:A:300:GLU:O	1:A:304:VAL:N	8	0.77
(2,39)	1:A:300:GLU:O	1:A:304:VAL:N	9	0.77
(2,39)	1:A:300:GLU:O	1:A:304:VAL:N	11	0.77
(2,39)	1:A:300:GLU:O	1:A:304:VAL:N	13	0.77
(2,39)	1:A:300:GLU:O	1:A:304:VAL:N	14	0.77
(2,33)	1:A:292:LEU:O	1:A:296:SER:N	1	0.77
(2,33)	1:A:292:LEU:O	1:A:296:SER:N	3	0.77
(2,33)	1:A:292:LEU:O	1:A:296:SER:N	8	0.77
(2,33)	1:A:292:LEU:O	1:A:296:SER:N	13	0.77
(2,3)	1:A:222:TYR:O	1:A:226:GLN:N	1	0.77
(2,3)	1:A:222:TYR:O	1:A:226:GLN:N	4	0.77
(2,3)	1:A:222:TYR:O	1:A:226:GLN:N	5	0.77
(2,3)	1:A:222:TYR:O	1:A:226:GLN:N	6	0.77
(2,3)	1:A:222:TYR:O	1:A:226:GLN:N	8	0.77

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,3)	1:A:222:TYR:O	1:A:226:GLN:N	9	0.77
(2,3)	1:A:222:TYR:O	1:A:226:GLN:N	11	0.77
(2,3)	1:A:222:TYR:O	1:A:226:GLN:N	13	0.77
(2,3)	1:A:222:TYR:O	1:A:226:GLN:N	14	0.77
(2,3)	1:A:222:TYR:O	1:A:226:GLN:N	15	0.77
(2,28)	1:A:277:VAL:O	1:A:281:LYS:N	4	0.77
(2,28)	1:A:277:VAL:O	1:A:281:LYS:N	5	0.77
(2,28)	1:A:277:VAL:O	1:A:281:LYS:N	9	0.77
(2,28)	1:A:277:VAL:O	1:A:281:LYS:N	10	0.77
(2,14)	1:A:236:ILE:O	1:A:240:ILE:N	1	0.77
(2,14)	1:A:236:ILE:O	1:A:240:ILE:N	5	0.77
(2,14)	1:A:236:ILE:O	1:A:240:ILE:N	8	0.77
(4,196)	1:A:290:CYS:HG	1:A:219:GLN:HE21	8	0.76
(4,196)	1:A:290:CYS:HG	1:A:219:GLN:HE22	8	0.76
(4,166)	1:A:308:SER:HG	1:A:239:TRP:H	11	0.76
(4,154)	1:A:296:SER:HG	1:A:315:GLY:H	12	0.76
(4,125)	1:A:290:CYS:HG	1:A:316:GLY:H	12	0.76
(4,122)	1:A:290:CYS:HG	1:A:312:GLU:H	4	0.76
(2,39)	1:A:300:GLU:O	1:A:304:VAL:N	2	0.76
(2,39)	1:A:300:GLU:O	1:A:304:VAL:N	15	0.76
(2,33)	1:A:292:LEU:O	1:A:296:SER:N	10	0.76
(2,3)	1:A:222:TYR:O	1:A:226:GLN:N	2	0.76
(2,3)	1:A:222:TYR:O	1:A:226:GLN:N	3	0.76
(2,3)	1:A:222:TYR:O	1:A:226:GLN:N	10	0.76
(2,28)	1:A:277:VAL:O	1:A:281:LYS:N	11	0.76
(2,11)	1:A:232:LEU:O	1:A:236:ILE:N	7	0.76
(2,11)	1:A:232:LEU:O	1:A:236:ILE:N	15	0.76
(4,211)	1:A:296:SER:HG	1:A:267:SER:H	9	0.75
(2,39)	1:A:300:GLU:O	1:A:304:VAL:N	3	0.75
(2,3)	1:A:222:TYR:O	1:A:226:GLN:N	7	0.75
(2,28)	1:A:277:VAL:O	1:A:281:LYS:N	1	0.75
(2,27)	1:A:276:LYS:O	1:A:280:VAL:N	2	0.75
(2,27)	1:A:276:LYS:O	1:A:280:VAL:N	10	0.75
(2,27)	1:A:276:LYS:O	1:A:280:VAL:N	12	0.75
(2,27)	1:A:276:LYS:O	1:A:280:VAL:N	14	0.75
(4,121)	1:A:290:CYS:HG	1:A:309:ARG:H	13	0.74
(4,118)	1:A:290:CYS:HG	1:A:305:ASN:H	8	0.74
(2,53)	1:A:414:TYR:O	1:A:418:TYR:N	1	0.74
(2,42)	1:A:398:ILE:O	1:A:402:GLY:N	5	0.74
(2,39)	1:A:300:GLU:O	1:A:304:VAL:N	12	0.74
(2,33)	1:A:292:LEU:O	1:A:296:SER:N	5	0.74
(2,33)	1:A:292:LEU:O	1:A:296:SER:N	7	0.74

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,27)	1:A:276:LYS:O	1:A:280:VAL:N	7	0.74
(2,27)	1:A:276:LYS:O	1:A:280:VAL:N	8	0.74
(2,11)	1:A:232:LEU:O	1:A:236:ILE:N	8	0.74
(2,11)	1:A:232:LEU:O	1:A:236:ILE:N	10	0.74
(2,11)	1:A:232:LEU:O	1:A:236:ILE:N	12	0.74
(2,11)	1:A:232:LEU:O	1:A:236:ILE:N	14	0.74
(4,198)	1:A:296:SER:HG	1:A:226:GLN:HE21	11	0.73
(4,198)	1:A:296:SER:HG	1:A:226:GLN:HE22	11	0.73
(4,166)	1:A:308:SER:HG	1:A:239:TRP:H	4	0.73
(2,53)	1:A:414:TYR:O	1:A:418:TYR:N	9	0.73
(2,32)	1:A:290:CYS:O	1:A:294:VAL:N	15	0.73
(2,27)	1:A:276:LYS:O	1:A:280:VAL:N	1	0.73
(2,25)	1:A:261:LEU:O	1:A:265:THR:N	14	0.73
(2,11)	1:A:232:LEU:O	1:A:236:ILE:N	2	0.73
(2,11)	1:A:232:LEU:O	1:A:236:ILE:N	3	0.73
(2,11)	1:A:232:LEU:O	1:A:236:ILE:N	9	0.73
(2,11)	1:A:232:LEU:O	1:A:236:ILE:N	11	0.73
(2,11)	1:A:232:LEU:O	1:A:236:ILE:N	13	0.73
(4,195)	1:A:296:SER:HG	1:A:218:ARG:HE	15	0.72
(4,172)	1:A:308:SER:HG	1:A:295:PHE:H	5	0.72
(4,166)	1:A:308:SER:HG	1:A:239:TRP:H	14	0.72
(4,156)	1:A:296:SER:HG	1:A:317:GLY:H	11	0.72
(4,149)	1:A:296:SER:HG	1:A:281:LYS:H	5	0.72
(4,135)	1:A:290:CYS:HG	1:A:418:TYR:H	15	0.72
(4,128)	1:A:290:CYS:HG	1:A:390:GLN:H	10	0.72
(2,53)	1:A:414:TYR:O	1:A:418:TYR:N	3	0.72
(2,48)	1:A:405:LEU:O	1:A:409:ILE:N	15	0.72
(2,42)	1:A:398:ILE:O	1:A:402:GLY:N	9	0.72
(2,42)	1:A:398:ILE:O	1:A:402:GLY:N	11	0.72
(2,32)	1:A:290:CYS:O	1:A:294:VAL:N	5	0.72
(2,32)	1:A:290:CYS:O	1:A:294:VAL:N	8	0.72
(2,27)	1:A:276:LYS:O	1:A:280:VAL:N	6	0.72
(2,11)	1:A:232:LEU:O	1:A:236:ILE:N	4	0.72
(4,136)	1:A:290:CYS:HG	1:A:419:LYS:H	14	0.71
(2,7)	1:A:227:LEU:O	1:A:231:SER:N	6	0.71
(2,42)	1:A:398:ILE:O	1:A:402:GLY:N	2	0.71
(2,32)	1:A:290:CYS:O	1:A:294:VAL:N	10	0.71
(2,25)	1:A:261:LEU:O	1:A:265:THR:N	2	0.71
(2,25)	1:A:261:LEU:O	1:A:265:THR:N	3	0.71
(2,25)	1:A:261:LEU:O	1:A:265:THR:N	4	0.71
(2,25)	1:A:261:LEU:O	1:A:265:THR:N	6	0.71
(2,25)	1:A:261:LEU:O	1:A:265:THR:N	7	0.71

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,25)	1:A:261:LEU:O	1:A:265:THR:N	8	0.71
(2,25)	1:A:261:LEU:O	1:A:265:THR:N	9	0.71
(2,12)	1:A:233:LEU:O	1:A:237:LEU:N	5	0.71
(2,12)	1:A:233:LEU:O	1:A:237:LEU:N	6	0.71
(2,11)	1:A:232:LEU:O	1:A:236:ILE:N	1	0.71
(4,211)	1:A:296:SER:HG	1:A:267:SER:H	11	0.7
(4,135)	1:A:290:CYS:HG	1:A:418:TYR:H	4	0.7
(2,7)	1:A:227:LEU:O	1:A:231:SER:N	3	0.7
(2,53)	1:A:414:TYR:O	1:A:418:TYR:N	4	0.7
(2,48)	1:A:405:LEU:O	1:A:409:ILE:N	7	0.7
(2,48)	1:A:405:LEU:O	1:A:409:ILE:N	12	0.7
(2,48)	1:A:405:LEU:O	1:A:409:ILE:N	14	0.7
(2,32)	1:A:290:CYS:O	1:A:294:VAL:N	3	0.7
(2,28)	1:A:277:VAL:O	1:A:281:LYS:N	7	0.7
(2,28)	1:A:277:VAL:O	1:A:281:LYS:N	8	0.7
(2,25)	1:A:261:LEU:O	1:A:265:THR:N	12	0.7
(4,216)	1:A:308:SER:HG	1:A:257:ILE:H	7	0.69
(4,198)	1:A:296:SER:HG	1:A:226:GLN:HE21	13	0.69
(4,198)	1:A:296:SER:HG	1:A:226:GLN:HE22	13	0.69
(4,195)	1:A:296:SER:HG	1:A:218:ARG:HE	9	0.69
(4,155)	1:A:296:SER:HG	1:A:316:GLY:H	11	0.69
(4,145)	1:A:296:SER:HG	1:A:277:VAL:H	2	0.69
(4,125)	1:A:290:CYS:HG	1:A:316:GLY:H	2	0.69
(2,7)	1:A:227:LEU:O	1:A:231:SER:N	13	0.69
(2,53)	1:A:414:TYR:O	1:A:418:TYR:N	2	0.69
(2,53)	1:A:414:TYR:O	1:A:418:TYR:N	11	0.69
(2,42)	1:A:398:ILE:O	1:A:402:GLY:N	7	0.69
(2,35)	1:A:295:PHE:O	1:A:299:LEU:N	7	0.69
(2,32)	1:A:290:CYS:O	1:A:294:VAL:N	2	0.69
(2,25)	1:A:261:LEU:O	1:A:265:THR:N	10	0.69
(2,25)	1:A:261:LEU:O	1:A:265:THR:N	13	0.69
(2,25)	1:A:261:LEU:O	1:A:265:THR:N	15	0.69
(4,199)	1:A:290:CYS:HG	1:A:226:GLN:HE21	13	0.68
(4,199)	1:A:290:CYS:HG	1:A:226:GLN:HE22	13	0.68
(4,172)	1:A:308:SER:HG	1:A:295:PHE:H	4	0.68
(4,172)	1:A:308:SER:HG	1:A:295:PHE:H	13	0.68
(4,157)	1:A:296:SER:HG	1:A:418:TYR:H	8	0.68
(2,7)	1:A:227:LEU:O	1:A:231:SER:N	15	0.68
(2,6)	1:A:225:ILE:O	1:A:229:ILE:N	12	0.68
(2,48)	1:A:405:LEU:O	1:A:409:ILE:N	1	0.68
(2,48)	1:A:405:LEU:O	1:A:409:ILE:N	2	0.68
(2,48)	1:A:405:LEU:O	1:A:409:ILE:N	13	0.68

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,16)	1:A:239:TRP:O	1:A:243:TRP:N	7	0.68
(4,172)	1:A:308:SER:HG	1:A:295:PHE:H	6	0.67
(4,157)	1:A:296:SER:HG	1:A:418:TYR:H	5	0.67
(2,7)	1:A:227:LEU:O	1:A:231:SER:N	5	0.67
(2,6)	1:A:225:ILE:O	1:A:229:ILE:N	7	0.67
(2,48)	1:A:405:LEU:O	1:A:409:ILE:N	3	0.67
(2,48)	1:A:405:LEU:O	1:A:409:ILE:N	4	0.67
(2,48)	1:A:405:LEU:O	1:A:409:ILE:N	6	0.67
(2,48)	1:A:405:LEU:O	1:A:409:ILE:N	8	0.67
(2,48)	1:A:405:LEU:O	1:A:409:ILE:N	10	0.67
(2,48)	1:A:405:LEU:O	1:A:409:ILE:N	11	0.67
(2,30)	1:A:279:TYR:O	1:A:283:ILE:N	8	0.67
(2,25)	1:A:261:LEU:O	1:A:265:THR:N	5	0.67
(2,25)	1:A:261:LEU:O	1:A:265:THR:N	11	0.67
(2,12)	1:A:233:LEU:O	1:A:237:LEU:N	7	0.67
(2,12)	1:A:233:LEU:O	1:A:237:LEU:N	15	0.67
(4,196)	1:A:290:CYS:HG	1:A:219:GLN:HE21	1	0.66
(4,196)	1:A:290:CYS:HG	1:A:219:GLN:HE22	1	0.66
(4,172)	1:A:308:SER:HG	1:A:295:PHE:H	7	0.66
(2,7)	1:A:227:LEU:O	1:A:231:SER:N	1	0.66
(2,7)	1:A:227:LEU:O	1:A:231:SER:N	2	0.66
(2,7)	1:A:227:LEU:O	1:A:231:SER:N	4	0.66
(2,6)	1:A:225:ILE:O	1:A:229:ILE:N	4	0.66
(2,6)	1:A:225:ILE:O	1:A:229:ILE:N	8	0.66
(2,6)	1:A:225:ILE:O	1:A:229:ILE:N	9	0.66
(2,6)	1:A:225:ILE:O	1:A:229:ILE:N	10	0.66
(2,6)	1:A:225:ILE:O	1:A:229:ILE:N	11	0.66
(2,6)	1:A:225:ILE:O	1:A:229:ILE:N	14	0.66
(2,53)	1:A:414:TYR:O	1:A:418:TYR:N	14	0.66
(2,48)	1:A:405:LEU:O	1:A:409:ILE:N	5	0.66
(2,47)	1:A:404:PRO:O	1:A:408:LEU:N	13	0.66
(2,42)	1:A:398:ILE:O	1:A:402:GLY:N	6	0.66
(2,42)	1:A:398:ILE:O	1:A:402:GLY:N	13	0.66
(2,39)	1:A:300:GLU:O	1:A:304:VAL:N	10	0.66
(2,28)	1:A:277:VAL:O	1:A:281:LYS:N	6	0.66
(2,1)	1:A:220:LEU:O	1:A:224:LEU:N	12	0.66
(4,155)	1:A:296:SER:HG	1:A:316:GLY:H	7	0.65
(4,136)	1:A:290:CYS:HG	1:A:419:LYS:H	10	0.65
(2,7)	1:A:227:LEU:O	1:A:231:SER:N	8	0.65
(2,7)	1:A:227:LEU:O	1:A:231:SER:N	9	0.65
(2,7)	1:A:227:LEU:O	1:A:231:SER:N	11	0.65
(2,6)	1:A:225:ILE:O	1:A:229:ILE:N	1	0.65

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,6)	1:A:225:ILE:O	1:A:229:ILE:N	2	0.65
(2,6)	1:A:225:ILE:O	1:A:229:ILE:N	5	0.65
(2,53)	1:A:414:TYR:O	1:A:418:TYR:N	8	0.65
(2,32)	1:A:290:CYS:O	1:A:294:VAL:N	1	0.65
(2,30)	1:A:279:TYR:O	1:A:283:ILE:N	15	0.65
(2,24)	1:A:260:VAL:O	1:A:264:THR:N	14	0.65
(2,21)	1:A:256:GLY:O	1:A:260:VAL:N	12	0.65
(2,1)	1:A:220:LEU:O	1:A:224:LEU:N	3	0.65
(4,211)	1:A:296:SER:HG	1:A:267:SER:H	4	0.64
(4,115)	1:A:290:CYS:HG	1:A:248:ALA:H	14	0.64
(4,108)	1:A:290:CYS:HG	1:A:217:GLU:H	12	0.64
(2,7)	1:A:227:LEU:O	1:A:231:SER:N	14	0.64
(2,6)	1:A:225:ILE:O	1:A:229:ILE:N	13	0.64
(2,6)	1:A:225:ILE:O	1:A:229:ILE:N	15	0.64
(2,47)	1:A:404:PRO:O	1:A:408:LEU:N	8	0.64
(2,47)	1:A:404:PRO:O	1:A:408:LEU:N	11	0.64
(2,35)	1:A:295:PHE:O	1:A:299:LEU:N	5	0.64
(2,31)	1:A:288:ALA:O	1:A:292:LEU:N	13	0.64
(2,21)	1:A:256:GLY:O	1:A:260:VAL:N	8	0.64
(2,21)	1:A:256:GLY:O	1:A:260:VAL:N	10	0.64
(2,16)	1:A:239:TRP:O	1:A:243:TRP:N	3	0.64
(2,16)	1:A:239:TRP:O	1:A:243:TRP:N	14	0.64
(2,1)	1:A:220:LEU:O	1:A:224:LEU:N	4	0.64
(2,1)	1:A:220:LEU:O	1:A:224:LEU:N	8	0.64
(4,174)	1:A:308:SER:HG	1:A:298:LEU:H	14	0.63
(4,156)	1:A:296:SER:HG	1:A:317:GLY:H	13	0.63
(4,151)	1:A:296:SER:HG	1:A:283:ILE:H	5	0.63
(4,121)	1:A:290:CYS:HG	1:A:309:ARG:H	11	0.63
(2,7)	1:A:227:LEU:O	1:A:231:SER:N	10	0.63
(2,6)	1:A:225:ILE:O	1:A:229:ILE:N	6	0.63
(2,53)	1:A:414:TYR:O	1:A:418:TYR:N	12	0.63
(2,47)	1:A:404:PRO:O	1:A:408:LEU:N	3	0.63
(2,43)	1:A:399:SER:O	1:A:403:PHE:N	8	0.63
(2,42)	1:A:398:ILE:O	1:A:402:GLY:N	12	0.63
(2,24)	1:A:260:VAL:O	1:A:264:THR:N	12	0.63
(2,21)	1:A:256:GLY:O	1:A:260:VAL:N	6	0.63
(2,16)	1:A:239:TRP:O	1:A:243:TRP:N	5	0.63
(2,16)	1:A:239:TRP:O	1:A:243:TRP:N	8	0.63
(2,16)	1:A:239:TRP:O	1:A:243:TRP:N	15	0.63
(2,1)	1:A:220:LEU:O	1:A:224:LEU:N	9	0.63
(2,1)	1:A:220:LEU:O	1:A:224:LEU:N	15	0.63
(4,196)	1:A:290:CYS:HG	1:A:219:GLN:HE21	6	0.62

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(4,196)	1:A:290:CYS:HG	1:A:219:GLN:HE22	6	0.62
(4,149)	1:A:296:SER:HG	1:A:281:LYS:H	15	0.62
(4,121)	1:A:290:CYS:HG	1:A:309:ARG:H	10	0.62
(2,6)	1:A:225:ILE:O	1:A:229:ILE:N	3	0.62
(2,53)	1:A:414:TYR:O	1:A:418:TYR:N	10	0.62
(2,42)	1:A:398:ILE:O	1:A:402:GLY:N	3	0.62
(2,42)	1:A:398:ILE:O	1:A:402:GLY:N	10	0.62
(2,30)	1:A:279:TYR:O	1:A:283:ILE:N	2	0.62
(2,26)	1:A:262:THR:O	1:A:266:GLN:N	2	0.62
(2,24)	1:A:260:VAL:O	1:A:264:THR:N	7	0.62
(2,24)	1:A:260:VAL:O	1:A:264:THR:N	10	0.62
(2,21)	1:A:256:GLY:O	1:A:260:VAL:N	9	0.62
(2,21)	1:A:256:GLY:O	1:A:260:VAL:N	11	0.62
(2,21)	1:A:256:GLY:O	1:A:260:VAL:N	13	0.62
(2,16)	1:A:239:TRP:O	1:A:243:TRP:N	10	0.62
(2,12)	1:A:233:LEU:O	1:A:237:LEU:N	3	0.62
(2,12)	1:A:233:LEU:O	1:A:237:LEU:N	10	0.62
(4,169)	1:A:308:SER:HG	1:A:243:TRP:H	1	0.61
(4,155)	1:A:296:SER:HG	1:A:316:GLY:H	13	0.61
(2,7)	1:A:227:LEU:O	1:A:231:SER:N	7	0.61
(2,50)	1:A:407:PHE:O	1:A:411:ASN:N	15	0.61
(2,49)	1:A:406:ALA:O	1:A:410:PHE:N	15	0.61
(2,47)	1:A:404:PRO:O	1:A:408:LEU:N	1	0.61
(2,35)	1:A:295:PHE:O	1:A:299:LEU:N	10	0.61
(2,32)	1:A:290:CYS:O	1:A:294:VAL:N	4	0.61
(2,32)	1:A:290:CYS:O	1:A:294:VAL:N	7	0.61
(2,32)	1:A:290:CYS:O	1:A:294:VAL:N	13	0.61
(2,28)	1:A:277:VAL:O	1:A:281:LYS:N	2	0.61
(2,26)	1:A:262:THR:O	1:A:266:GLN:N	4	0.61
(2,24)	1:A:260:VAL:O	1:A:264:THR:N	15	0.61
(2,18)	1:A:251:ALA:O	1:A:255:LEU:N	4	0.61
(2,18)	1:A:251:ALA:O	1:A:255:LEU:N	7	0.61
(2,18)	1:A:251:ALA:O	1:A:255:LEU:N	10	0.61
(2,16)	1:A:239:TRP:O	1:A:243:TRP:N	6	0.61
(2,16)	1:A:239:TRP:O	1:A:243:TRP:N	13	0.61
(2,12)	1:A:233:LEU:O	1:A:237:LEU:N	9	0.61
(4,211)	1:A:296:SER:HG	1:A:267:SER:H	1	0.6
(4,196)	1:A:290:CYS:HG	1:A:219:GLN:HE21	11	0.6
(4,196)	1:A:290:CYS:HG	1:A:219:GLN:HE22	11	0.6
(4,158)	1:A:296:SER:HG	1:A:419:LYS:H	8	0.6
(4,138)	1:A:290:CYS:HG	1:A:427:PHE:H	15	0.6
(2,48)	1:A:405:LEU:O	1:A:409:ILE:N	9	0.6

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,47)	1:A:404:PRO:O	1:A:408:LEU:N	2	0.6
(2,43)	1:A:399:SER:O	1:A:403:PHE:N	7	0.6
(2,43)	1:A:399:SER:O	1:A:403:PHE:N	11	0.6
(2,35)	1:A:295:PHE:O	1:A:299:LEU:N	13	0.6
(2,32)	1:A:290:CYS:O	1:A:294:VAL:N	9	0.6
(2,30)	1:A:279:TYR:O	1:A:283:ILE:N	6	0.6
(2,26)	1:A:262:THR:O	1:A:266:GLN:N	1	0.6
(2,24)	1:A:260:VAL:O	1:A:264:THR:N	3	0.6
(2,24)	1:A:260:VAL:O	1:A:264:THR:N	4	0.6
(2,24)	1:A:260:VAL:O	1:A:264:THR:N	13	0.6
(2,23)	1:A:259:THR:O	1:A:263:LEU:N	1	0.6
(2,18)	1:A:251:ALA:O	1:A:255:LEU:N	9	0.6
(2,16)	1:A:239:TRP:O	1:A:243:TRP:N	2	0.6
(2,16)	1:A:239:TRP:O	1:A:243:TRP:N	12	0.6
(2,12)	1:A:233:LEU:O	1:A:237:LEU:N	12	0.6
(2,12)	1:A:233:LEU:O	1:A:237:LEU:N	14	0.6
(4,174)	1:A:308:SER:HG	1:A:298:LEU:H	1	0.59
(4,136)	1:A:290:CYS:HG	1:A:419:LYS:H	12	0.59
(4,116)	1:A:290:CYS:HG	1:A:277:VAL:H	1	0.59
(2,47)	1:A:404:PRO:O	1:A:408:LEU:N	4	0.59
(2,47)	1:A:404:PRO:O	1:A:408:LEU:N	14	0.59
(2,43)	1:A:399:SER:O	1:A:403:PHE:N	10	0.59
(2,4)	1:A:223:TYR:O	1:A:227:LEU:N	3	0.59
(2,4)	1:A:223:TYR:O	1:A:227:LEU:N	10	0.59
(2,36)	1:A:297:ALA:O	1:A:301:TYR:N	12	0.59
(2,32)	1:A:290:CYS:O	1:A:294:VAL:N	12	0.59
(2,26)	1:A:262:THR:O	1:A:266:GLN:N	9	0.59
(2,25)	1:A:261:LEU:O	1:A:265:THR:N	1	0.59
(2,24)	1:A:260:VAL:O	1:A:264:THR:N	2	0.59
(2,24)	1:A:260:VAL:O	1:A:264:THR:N	6	0.59
(2,24)	1:A:260:VAL:O	1:A:264:THR:N	8	0.59
(2,21)	1:A:256:GLY:O	1:A:260:VAL:N	15	0.59
(2,18)	1:A:251:ALA:O	1:A:255:LEU:N	2	0.59
(2,18)	1:A:251:ALA:O	1:A:255:LEU:N	6	0.59
(2,18)	1:A:251:ALA:O	1:A:255:LEU:N	12	0.59
(2,18)	1:A:251:ALA:O	1:A:255:LEU:N	13	0.59
(2,12)	1:A:233:LEU:O	1:A:237:LEU:N	11	0.59
(2,1)	1:A:220:LEU:O	1:A:224:LEU:N	10	0.59
(4,157)	1:A:296:SER:HG	1:A:418:TYR:H	15	0.58
(2,44)	1:A:401:ILE:O	1:A:405:LEU:N	1	0.58
(2,43)	1:A:399:SER:O	1:A:403:PHE:N	9	0.58
(2,43)	1:A:399:SER:O	1:A:403:PHE:N	13	0.58

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,36)	1:A:297:ALA:O	1:A:301:TYR:N	1	0.58
(2,36)	1:A:297:ALA:O	1:A:301:TYR:N	4	0.58
(2,36)	1:A:297:ALA:O	1:A:301:TYR:N	9	0.58
(2,36)	1:A:297:ALA:O	1:A:301:TYR:N	13	0.58
(2,36)	1:A:297:ALA:O	1:A:301:TYR:N	14	0.58
(2,36)	1:A:297:ALA:O	1:A:301:TYR:N	15	0.58
(2,32)	1:A:290:CYS:O	1:A:294:VAL:N	6	0.58
(2,32)	1:A:290:CYS:O	1:A:294:VAL:N	14	0.58
(2,24)	1:A:260:VAL:O	1:A:264:THR:N	9	0.58
(2,21)	1:A:256:GLY:O	1:A:260:VAL:N	1	0.58
(2,21)	1:A:256:GLY:O	1:A:260:VAL:N	2	0.58
(2,21)	1:A:256:GLY:O	1:A:260:VAL:N	14	0.58
(2,18)	1:A:251:ALA:O	1:A:255:LEU:N	1	0.58
(2,18)	1:A:251:ALA:O	1:A:255:LEU:N	3	0.58
(2,18)	1:A:251:ALA:O	1:A:255:LEU:N	5	0.58
(2,18)	1:A:251:ALA:O	1:A:255:LEU:N	8	0.58
(2,18)	1:A:251:ALA:O	1:A:255:LEU:N	14	0.58
(2,17)	1:A:250:PRO:O	1:A:254:GLY:N	7	0.58
(2,16)	1:A:239:TRP:O	1:A:243:TRP:N	1	0.58
(2,12)	1:A:233:LEU:O	1:A:237:LEU:N	4	0.58
(2,12)	1:A:233:LEU:O	1:A:237:LEU:N	8	0.58
(4,172)	1:A:308:SER:HG	1:A:295:PHE:H	11	0.57
(4,172)	1:A:308:SER:HG	1:A:295:PHE:H	12	0.57
(4,115)	1:A:290:CYS:HG	1:A:248:ALA:H	8	0.57
(2,51)	1:A:409:ILE:O	1:A:413:PHE:N	5	0.57
(2,51)	1:A:409:ILE:O	1:A:413:PHE:N	10	0.57
(2,50)	1:A:407:PHE:O	1:A:411:ASN:N	5	0.57
(2,50)	1:A:407:PHE:O	1:A:411:ASN:N	6	0.57
(2,47)	1:A:404:PRO:O	1:A:408:LEU:N	7	0.57
(2,47)	1:A:404:PRO:O	1:A:408:LEU:N	9	0.57
(2,44)	1:A:401:ILE:O	1:A:405:LEU:N	6	0.57
(2,43)	1:A:399:SER:O	1:A:403:PHE:N	12	0.57
(2,43)	1:A:399:SER:O	1:A:403:PHE:N	14	0.57
(2,4)	1:A:223:TYR:O	1:A:227:LEU:N	7	0.57
(2,36)	1:A:297:ALA:O	1:A:301:TYR:N	3	0.57
(2,36)	1:A:297:ALA:O	1:A:301:TYR:N	8	0.57
(2,36)	1:A:297:ALA:O	1:A:301:TYR:N	11	0.57
(2,35)	1:A:295:PHE:O	1:A:299:LEU:N	11	0.57
(2,23)	1:A:259:THR:O	1:A:263:LEU:N	10	0.57
(2,21)	1:A:256:GLY:O	1:A:260:VAL:N	5	0.57
(2,18)	1:A:251:ALA:O	1:A:255:LEU:N	15	0.57
(2,16)	1:A:239:TRP:O	1:A:243:TRP:N	11	0.57

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,12)	1:A:233:LEU:O	1:A:237:LEU:N	2	0.57
(4,211)	1:A:296:SER:HG	1:A:267:SER:H	6	0.56
(4,147)	1:A:296:SER:HG	1:A:279:TYR:H	14	0.56
(4,116)	1:A:290:CYS:HG	1:A:277:VAL:H	4	0.56
(2,52)	1:A:410:PHE:O	1:A:414:TYR:N	7	0.56
(2,47)	1:A:404:PRO:O	1:A:408:LEU:N	10	0.56
(2,47)	1:A:404:PRO:O	1:A:408:LEU:N	12	0.56
(2,44)	1:A:401:ILE:O	1:A:405:LEU:N	10	0.56
(2,44)	1:A:401:ILE:O	1:A:405:LEU:N	14	0.56
(2,36)	1:A:297:ALA:O	1:A:301:TYR:N	7	0.56
(2,32)	1:A:290:CYS:O	1:A:294:VAL:N	11	0.56
(2,29)	1:A:278:SER:O	1:A:282:ALA:N	8	0.56
(2,26)	1:A:262:THR:O	1:A:266:GLN:N	3	0.56
(2,26)	1:A:262:THR:O	1:A:266:GLN:N	6	0.56
(2,26)	1:A:262:THR:O	1:A:266:GLN:N	8	0.56
(2,24)	1:A:260:VAL:O	1:A:264:THR:N	5	0.56
(2,23)	1:A:259:THR:O	1:A:263:LEU:N	11	0.56
(2,21)	1:A:256:GLY:O	1:A:260:VAL:N	3	0.56
(2,21)	1:A:256:GLY:O	1:A:260:VAL:N	4	0.56
(2,12)	1:A:233:LEU:O	1:A:237:LEU:N	1	0.56
(4,211)	1:A:296:SER:HG	1:A:267:SER:H	5	0.55
(4,156)	1:A:296:SER:HG	1:A:317:GLY:H	7	0.55
(4,112)	1:A:290:CYS:HG	1:A:242:PHE:H	7	0.55
(2,52)	1:A:410:PHE:O	1:A:414:TYR:N	5	0.55
(2,52)	1:A:410:PHE:O	1:A:414:TYR:N	10	0.55
(2,52)	1:A:410:PHE:O	1:A:414:TYR:N	12	0.55
(2,52)	1:A:410:PHE:O	1:A:414:TYR:N	13	0.55
(2,52)	1:A:410:PHE:O	1:A:414:TYR:N	15	0.55
(2,51)	1:A:409:ILE:O	1:A:413:PHE:N	14	0.55
(2,36)	1:A:297:ALA:O	1:A:301:TYR:N	2	0.55
(2,36)	1:A:297:ALA:O	1:A:301:TYR:N	10	0.55
(2,34)	1:A:294:VAL:O	1:A:298:LEU:N	5	0.55
(2,30)	1:A:279:TYR:O	1:A:283:ILE:N	11	0.55
(2,28)	1:A:277:VAL:O	1:A:281:LYS:N	15	0.55
(2,26)	1:A:262:THR:O	1:A:266:GLN:N	13	0.55
(4,157)	1:A:296:SER:HG	1:A:418:TYR:H	6	0.54
(4,153)	1:A:296:SER:HG	1:A:314:GLY:H	9	0.54
(2,7)	1:A:227:LEU:O	1:A:231:SER:N	12	0.54
(2,52)	1:A:410:PHE:O	1:A:414:TYR:N	3	0.54
(2,52)	1:A:410:PHE:O	1:A:414:TYR:N	4	0.54
(2,36)	1:A:297:ALA:O	1:A:301:TYR:N	5	0.54
(2,26)	1:A:262:THR:O	1:A:266:GLN:N	11	0.54

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,16)	1:A:239:TRP:O	1:A:243:TRP:N	9	0.54
(2,12)	1:A:233:LEU:O	1:A:237:LEU:N	13	0.54
(4,200)	1:A:308:SER:HG	1:A:245:ASN:HD21	2	0.53
(4,200)	1:A:308:SER:HG	1:A:245:ASN:HD22	2	0.53
(4,172)	1:A:308:SER:HG	1:A:295:PHE:H	8	0.53
(4,171)	1:A:308:SER:HG	1:A:291:LEU:H	3	0.53
(4,156)	1:A:296:SER:HG	1:A:317:GLY:H	3	0.53
(2,9)	1:A:229:ILE:O	1:A:233:LEU:N	7	0.53
(2,52)	1:A:410:PHE:O	1:A:414:TYR:N	1	0.53
(2,52)	1:A:410:PHE:O	1:A:414:TYR:N	2	0.53
(2,52)	1:A:410:PHE:O	1:A:414:TYR:N	6	0.53
(2,52)	1:A:410:PHE:O	1:A:414:TYR:N	8	0.53
(2,52)	1:A:410:PHE:O	1:A:414:TYR:N	11	0.53
(2,52)	1:A:410:PHE:O	1:A:414:TYR:N	14	0.53
(2,47)	1:A:404:PRO:O	1:A:408:LEU:N	6	0.53
(2,4)	1:A:223:TYR:O	1:A:227:LEU:N	4	0.53
(2,35)	1:A:295:PHE:O	1:A:299:LEU:N	9	0.53
(2,35)	1:A:295:PHE:O	1:A:299:LEU:N	12	0.53
(2,27)	1:A:276:LYS:O	1:A:280:VAL:N	4	0.53
(2,27)	1:A:276:LYS:O	1:A:280:VAL:N	9	0.53
(2,26)	1:A:262:THR:O	1:A:266:GLN:N	15	0.53
(2,22)	1:A:258:THR:O	1:A:262:THR:N	5	0.53
(2,19)	1:A:253:VAL:O	1:A:257:ILE:N	1	0.53
(2,1)	1:A:220:LEU:O	1:A:224:LEU:N	7	0.53
(2,1)	1:A:220:LEU:O	1:A:224:LEU:N	11	0.53
(2,1)	1:A:220:LEU:O	1:A:224:LEU:N	13	0.53
(4,172)	1:A:308:SER:HG	1:A:295:PHE:H	15	0.52
(4,121)	1:A:290:CYS:HG	1:A:309:ARG:H	3	0.52
(4,118)	1:A:290:CYS:HG	1:A:305:ASN:H	4	0.52
(4,118)	1:A:290:CYS:HG	1:A:305:ASN:H	6	0.52
(2,50)	1:A:407:PHE:O	1:A:411:ASN:N	9	0.52
(2,44)	1:A:401:ILE:O	1:A:405:LEU:N	2	0.52
(2,44)	1:A:401:ILE:O	1:A:405:LEU:N	3	0.52
(2,44)	1:A:401:ILE:O	1:A:405:LEU:N	4	0.52
(2,44)	1:A:401:ILE:O	1:A:405:LEU:N	11	0.52
(2,4)	1:A:223:TYR:O	1:A:227:LEU:N	1	0.52
(2,4)	1:A:223:TYR:O	1:A:227:LEU:N	2	0.52
(2,4)	1:A:223:TYR:O	1:A:227:LEU:N	5	0.52
(2,4)	1:A:223:TYR:O	1:A:227:LEU:N	6	0.52
(2,4)	1:A:223:TYR:O	1:A:227:LEU:N	8	0.52
(2,4)	1:A:223:TYR:O	1:A:227:LEU:N	9	0.52
(2,4)	1:A:223:TYR:O	1:A:227:LEU:N	11	0.52

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,4)	1:A:223:TYR:O	1:A:227:LEU:N	12	0.52
(2,4)	1:A:223:TYR:O	1:A:227:LEU:N	13	0.52
(2,4)	1:A:223:TYR:O	1:A:227:LEU:N	14	0.52
(2,4)	1:A:223:TYR:O	1:A:227:LEU:N	15	0.52
(2,34)	1:A:294:VAL:O	1:A:298:LEU:N	10	0.52
(2,27)	1:A:276:LYS:O	1:A:280:VAL:N	5	0.52
(2,26)	1:A:262:THR:O	1:A:266:GLN:N	7	0.52
(2,26)	1:A:262:THR:O	1:A:266:GLN:N	10	0.52
(2,24)	1:A:260:VAL:O	1:A:264:THR:N	1	0.52
(2,22)	1:A:258:THR:O	1:A:262:THR:N	1	0.52
(2,22)	1:A:258:THR:O	1:A:262:THR:N	3	0.52
(2,22)	1:A:258:THR:O	1:A:262:THR:N	4	0.52
(2,22)	1:A:258:THR:O	1:A:262:THR:N	7	0.52
(2,19)	1:A:253:VAL:O	1:A:257:ILE:N	10	0.52
(2,16)	1:A:239:TRP:O	1:A:243:TRP:N	4	0.52
(2,13)	1:A:234:ILE:O	1:A:238:SER:N	10	0.52
(2,13)	1:A:234:ILE:O	1:A:238:SER:N	11	0.52
(2,1)	1:A:220:LEU:O	1:A:224:LEU:N	1	0.52
(4,174)	1:A:308:SER:HG	1:A:298:LEU:H	5	0.51
(4,169)	1:A:308:SER:HG	1:A:243:TRP:H	13	0.51
(4,118)	1:A:290:CYS:HG	1:A:305:ASN:H	5	0.51
(2,46)	1:A:403:PHE:O	1:A:407:PHE:N	8	0.51
(2,44)	1:A:401:ILE:O	1:A:405:LEU:N	7	0.51
(2,44)	1:A:401:ILE:O	1:A:405:LEU:N	9	0.51
(2,44)	1:A:401:ILE:O	1:A:405:LEU:N	12	0.51
(2,44)	1:A:401:ILE:O	1:A:405:LEU:N	15	0.51
(2,40)	1:A:302:ALA:O	1:A:306:PHE:N	13	0.51
(2,38)	1:A:299:LEU:O	1:A:303:ALA:N	15	0.51
(2,26)	1:A:262:THR:O	1:A:266:GLN:N	14	0.51
(2,22)	1:A:258:THR:O	1:A:262:THR:N	2	0.51
(2,22)	1:A:258:THR:O	1:A:262:THR:N	14	0.51
(2,20)	1:A:255:LEU:O	1:A:259:THR:N	1	0.51
(2,13)	1:A:234:ILE:O	1:A:238:SER:N	14	0.51
(2,1)	1:A:220:LEU:O	1:A:224:LEU:N	6	0.51
(4,216)	1:A:308:SER:HG	1:A:257:ILE:H	9	0.5
(4,200)	1:A:308:SER:HG	1:A:245:ASN:HD21	10	0.5
(4,200)	1:A:308:SER:HG	1:A:245:ASN:HD22	10	0.5
(4,154)	1:A:296:SER:HG	1:A:315:GLY:H	3	0.5
(4,108)	1:A:290:CYS:HG	1:A:217:GLU:H	2	0.5
(2,9)	1:A:229:ILE:O	1:A:233:LEU:N	10	0.5
(2,46)	1:A:403:PHE:O	1:A:407:PHE:N	3	0.5
(2,38)	1:A:299:LEU:O	1:A:303:ALA:N	14	0.5

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,36)	1:A:297:ALA:O	1:A:301:TYR:N	6	0.5
(2,35)	1:A:295:PHE:O	1:A:299:LEU:N	1	0.5
(2,26)	1:A:262:THR:O	1:A:266:GLN:N	12	0.5
(2,23)	1:A:259:THR:O	1:A:263:LEU:N	7	0.5
(2,22)	1:A:258:THR:O	1:A:262:THR:N	15	0.5
(2,20)	1:A:255:LEU:O	1:A:259:THR:N	2	0.5
(2,20)	1:A:255:LEU:O	1:A:259:THR:N	4	0.5
(2,20)	1:A:255:LEU:O	1:A:259:THR:N	5	0.5
(2,18)	1:A:251:ALA:O	1:A:255:LEU:N	11	0.5
(2,1)	1:A:220:LEU:O	1:A:224:LEU:N	14	0.5
(4,196)	1:A:290:CYS:HG	1:A:219:GLN:HE21	5	0.49
(4,196)	1:A:290:CYS:HG	1:A:219:GLN:HE22	5	0.49
(2,9)	1:A:229:ILE:O	1:A:233:LEU:N	14	0.49
(2,44)	1:A:401:ILE:O	1:A:405:LEU:N	5	0.49
(2,40)	1:A:302:ALA:O	1:A:306:PHE:N	9	0.49
(2,38)	1:A:299:LEU:O	1:A:303:ALA:N	13	0.49
(2,30)	1:A:279:TYR:O	1:A:283:ILE:N	1	0.49
(2,24)	1:A:260:VAL:O	1:A:264:THR:N	11	0.49
(2,23)	1:A:259:THR:O	1:A:263:LEU:N	3	0.49
(2,23)	1:A:259:THR:O	1:A:263:LEU:N	4	0.49
(2,23)	1:A:259:THR:O	1:A:263:LEU:N	5	0.49
(2,21)	1:A:256:GLY:O	1:A:260:VAL:N	7	0.49
(2,20)	1:A:255:LEU:O	1:A:259:THR:N	7	0.49
(2,20)	1:A:255:LEU:O	1:A:259:THR:N	9	0.49
(2,20)	1:A:255:LEU:O	1:A:259:THR:N	15	0.49
(4,116)	1:A:290:CYS:HG	1:A:277:VAL:H	6	0.48
(4,115)	1:A:290:CYS:HG	1:A:248:ALA:H	15	0.48
(4,114)	1:A:290:CYS:HG	1:A:245:ASN:H	3	0.48
(2,9)	1:A:229:ILE:O	1:A:233:LEU:N	8	0.48
(2,50)	1:A:407:PHE:O	1:A:411:ASN:N	11	0.48
(2,47)	1:A:404:PRO:O	1:A:408:LEU:N	5	0.48
(2,46)	1:A:403:PHE:O	1:A:407:PHE:N	2	0.48
(2,46)	1:A:403:PHE:O	1:A:407:PHE:N	5	0.48
(2,46)	1:A:403:PHE:O	1:A:407:PHE:N	6	0.48
(2,46)	1:A:403:PHE:O	1:A:407:PHE:N	13	0.48
(2,43)	1:A:399:SER:O	1:A:403:PHE:N	2	0.48
(2,42)	1:A:398:ILE:O	1:A:402:GLY:N	8	0.48
(2,38)	1:A:299:LEU:O	1:A:303:ALA:N	2	0.48
(2,38)	1:A:299:LEU:O	1:A:303:ALA:N	5	0.48
(2,38)	1:A:299:LEU:O	1:A:303:ALA:N	9	0.48
(2,38)	1:A:299:LEU:O	1:A:303:ALA:N	11	0.48
(2,35)	1:A:295:PHE:O	1:A:299:LEU:N	4	0.48

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,31)	1:A:288:ALA:O	1:A:292:LEU:N	12	0.48
(2,26)	1:A:262:THR:O	1:A:266:GLN:N	5	0.48
(2,20)	1:A:255:LEU:O	1:A:259:THR:N	3	0.48
(4,216)	1:A:308:SER:HG	1:A:257:ILE:H	2	0.47
(4,174)	1:A:308:SER:HG	1:A:298:LEU:H	6	0.47
(2,9)	1:A:229:ILE:O	1:A:233:LEU:N	12	0.47
(2,50)	1:A:407:PHE:O	1:A:411:ASN:N	4	0.47
(2,43)	1:A:399:SER:O	1:A:403:PHE:N	5	0.47
(2,42)	1:A:398:ILE:O	1:A:402:GLY:N	15	0.47
(2,38)	1:A:299:LEU:O	1:A:303:ALA:N	3	0.47
(2,38)	1:A:299:LEU:O	1:A:303:ALA:N	7	0.47
(2,23)	1:A:259:THR:O	1:A:263:LEU:N	9	0.47
(2,19)	1:A:253:VAL:O	1:A:257:ILE:N	13	0.47
(4,198)	1:A:296:SER:HG	1:A:226:GLN:HE21	15	0.46
(4,198)	1:A:296:SER:HG	1:A:226:GLN:HE22	15	0.46
(4,196)	1:A:290:CYS:HG	1:A:219:GLN:HE21	10	0.46
(4,196)	1:A:290:CYS:HG	1:A:219:GLN:HE22	10	0.46
(4,153)	1:A:296:SER:HG	1:A:314:GLY:H	11	0.46
(4,149)	1:A:296:SER:HG	1:A:281:LYS:H	8	0.46
(4,112)	1:A:290:CYS:HG	1:A:242:PHE:H	13	0.46
(2,49)	1:A:406:ALA:O	1:A:410:PHE:N	6	0.46
(2,42)	1:A:398:ILE:O	1:A:402:GLY:N	4	0.46
(2,40)	1:A:302:ALA:O	1:A:306:PHE:N	3	0.46
(2,38)	1:A:299:LEU:O	1:A:303:ALA:N	12	0.46
(2,29)	1:A:278:SER:O	1:A:282:ALA:N	15	0.46
(2,23)	1:A:259:THR:O	1:A:263:LEU:N	13	0.46
(4,207)	1:A:290:CYS:HG	1:A:270:SER:H	8	0.45
(4,175)	1:A:308:SER:HG	1:A:395:ILE:H	12	0.45
(4,174)	1:A:308:SER:HG	1:A:298:LEU:H	4	0.45
(4,174)	1:A:308:SER:HG	1:A:298:LEU:H	8	0.45
(4,126)	1:A:290:CYS:HG	1:A:317:GLY:H	1	0.45
(4,121)	1:A:290:CYS:HG	1:A:309:ARG:H	4	0.45
(2,9)	1:A:229:ILE:O	1:A:233:LEU:N	9	0.45
(2,9)	1:A:229:ILE:O	1:A:233:LEU:N	11	0.45
(2,50)	1:A:407:PHE:O	1:A:411:ASN:N	1	0.45
(2,46)	1:A:403:PHE:O	1:A:407:PHE:N	9	0.45
(2,41)	1:A:303:ALA:O	1:A:307:VAL:N	13	0.45
(2,38)	1:A:299:LEU:O	1:A:303:ALA:N	10	0.45
(2,30)	1:A:279:TYR:O	1:A:283:ILE:N	13	0.45
(2,23)	1:A:259:THR:O	1:A:263:LEU:N	2	0.45
(2,20)	1:A:255:LEU:O	1:A:259:THR:N	6	0.45
(2,13)	1:A:234:ILE:O	1:A:238:SER:N	1	0.45

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,13)	1:A:234:ILE:O	1:A:238:SER:N	4	0.45
(2,13)	1:A:234:ILE:O	1:A:238:SER:N	6	0.45
(2,13)	1:A:234:ILE:O	1:A:238:SER:N	9	0.45
(2,1)	1:A:220:LEU:O	1:A:224:LEU:N	2	0.45
(4,174)	1:A:308:SER:HG	1:A:298:LEU:H	15	0.44
(4,157)	1:A:296:SER:HG	1:A:418:TYR:H	9	0.44
(4,117)	1:A:290:CYS:HG	1:A:304:VAL:H	4	0.44
(2,9)	1:A:229:ILE:O	1:A:233:LEU:N	5	0.44
(2,50)	1:A:407:PHE:O	1:A:411:ASN:N	2	0.44
(2,46)	1:A:403:PHE:O	1:A:407:PHE:N	7	0.44
(2,40)	1:A:302:ALA:O	1:A:306:PHE:N	1	0.44
(2,40)	1:A:302:ALA:O	1:A:306:PHE:N	2	0.44
(2,40)	1:A:302:ALA:O	1:A:306:PHE:N	12	0.44
(2,40)	1:A:302:ALA:O	1:A:306:PHE:N	15	0.44
(2,38)	1:A:299:LEU:O	1:A:303:ALA:N	8	0.44
(2,35)	1:A:295:PHE:O	1:A:299:LEU:N	2	0.44
(2,34)	1:A:294:VAL:O	1:A:298:LEU:N	2	0.44
(2,34)	1:A:294:VAL:O	1:A:298:LEU:N	4	0.44
(2,20)	1:A:255:LEU:O	1:A:259:THR:N	11	0.44
(4,118)	1:A:290:CYS:HG	1:A:305:ASN:H	2	0.43
(2,9)	1:A:229:ILE:O	1:A:233:LEU:N	4	0.43
(2,50)	1:A:407:PHE:O	1:A:411:ASN:N	3	0.43
(2,50)	1:A:407:PHE:O	1:A:411:ASN:N	8	0.43
(2,47)	1:A:404:PRO:O	1:A:408:LEU:N	15	0.43
(2,46)	1:A:403:PHE:O	1:A:407:PHE:N	4	0.43
(2,46)	1:A:403:PHE:O	1:A:407:PHE:N	15	0.43
(2,41)	1:A:303:ALA:O	1:A:307:VAL:N	3	0.43
(2,41)	1:A:303:ALA:O	1:A:307:VAL:N	11	0.43
(2,40)	1:A:302:ALA:O	1:A:306:PHE:N	4	0.43
(2,40)	1:A:302:ALA:O	1:A:306:PHE:N	6	0.43
(2,40)	1:A:302:ALA:O	1:A:306:PHE:N	10	0.43
(2,40)	1:A:302:ALA:O	1:A:306:PHE:N	14	0.43
(2,34)	1:A:294:VAL:O	1:A:298:LEU:N	9	0.43
(2,34)	1:A:294:VAL:O	1:A:298:LEU:N	11	0.43
(2,29)	1:A:278:SER:O	1:A:282:ALA:N	2	0.43
(2,23)	1:A:259:THR:O	1:A:263:LEU:N	15	0.43
(2,20)	1:A:255:LEU:O	1:A:259:THR:N	14	0.43
(2,15)	1:A:237:LEU:O	1:A:241:SER:N	7	0.43
(2,13)	1:A:234:ILE:O	1:A:238:SER:N	3	0.43
(4,121)	1:A:290:CYS:HG	1:A:309:ARG:H	8	0.42
(4,121)	1:A:290:CYS:HG	1:A:309:ARG:H	14	0.42
(4,118)	1:A:290:CYS:HG	1:A:305:ASN:H	7	0.42

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,9)	1:A:229:ILE:O	1:A:233:LEU:N	2	0.42
(2,41)	1:A:303:ALA:O	1:A:307:VAL:N	5	0.42
(2,40)	1:A:302:ALA:O	1:A:306:PHE:N	5	0.42
(2,40)	1:A:302:ALA:O	1:A:306:PHE:N	8	0.42
(2,34)	1:A:294:VAL:O	1:A:298:LEU:N	6	0.42
(2,34)	1:A:294:VAL:O	1:A:298:LEU:N	7	0.42
(2,34)	1:A:294:VAL:O	1:A:298:LEU:N	13	0.42
(2,23)	1:A:259:THR:O	1:A:263:LEU:N	6	0.42
(2,23)	1:A:259:THR:O	1:A:263:LEU:N	14	0.42
(4,207)	1:A:290:CYS:HG	1:A:270:SER:H	2	0.41
(4,166)	1:A:308:SER:HG	1:A:239:TRP:H	9	0.41
(4,121)	1:A:290:CYS:HG	1:A:309:ARG:H	6	0.41
(4,112)	1:A:290:CYS:HG	1:A:242:PHE:H	4	0.41
(2,9)	1:A:229:ILE:O	1:A:233:LEU:N	3	0.41
(2,50)	1:A:407:PHE:O	1:A:411:ASN:N	7	0.41
(2,50)	1:A:407:PHE:O	1:A:411:ASN:N	10	0.41
(2,50)	1:A:407:PHE:O	1:A:411:ASN:N	12	0.41
(2,43)	1:A:399:SER:O	1:A:403:PHE:N	3	0.41
(2,43)	1:A:399:SER:O	1:A:403:PHE:N	6	0.41
(2,41)	1:A:303:ALA:O	1:A:307:VAL:N	9	0.41
(2,40)	1:A:302:ALA:O	1:A:306:PHE:N	11	0.41
(2,37)	1:A:298:LEU:O	1:A:302:ALA:N	10	0.41
(2,30)	1:A:279:TYR:O	1:A:283:ILE:N	4	0.41
(2,19)	1:A:253:VAL:O	1:A:257:ILE:N	6	0.41
(2,11)	1:A:232:LEU:O	1:A:236:ILE:N	6	0.41
(2,9)	1:A:229:ILE:O	1:A:233:LEU:N	1	0.4
(2,46)	1:A:403:PHE:O	1:A:407:PHE:N	1	0.4
(2,46)	1:A:403:PHE:O	1:A:407:PHE:N	12	0.4
(2,44)	1:A:401:ILE:O	1:A:405:LEU:N	13	0.4
(2,42)	1:A:398:ILE:O	1:A:402:GLY:N	14	0.4
(2,41)	1:A:303:ALA:O	1:A:307:VAL:N	6	0.4
(2,41)	1:A:303:ALA:O	1:A:307:VAL:N	12	0.4
(2,37)	1:A:298:LEU:O	1:A:302:ALA:N	2	0.4
(2,37)	1:A:298:LEU:O	1:A:302:ALA:N	12	0.4
(2,37)	1:A:298:LEU:O	1:A:302:ALA:N	15	0.4
(2,35)	1:A:295:PHE:O	1:A:299:LEU:N	3	0.4
(2,34)	1:A:294:VAL:O	1:A:298:LEU:N	8	0.4
(2,34)	1:A:294:VAL:O	1:A:298:LEU:N	14	0.4
(2,31)	1:A:288:ALA:O	1:A:292:LEU:N	14	0.4
(2,23)	1:A:259:THR:O	1:A:263:LEU:N	8	0.4
(2,20)	1:A:255:LEU:O	1:A:259:THR:N	13	0.4
(4,205)	1:A:290:CYS:HG	1:A:400:ARG:HH21	6	0.39

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(4,205)	1:A:290:CYS:HG	1:A:400:ARG:HH22	6	0.39
(4,200)	1:A:308:SER:HG	1:A:245:ASN:HD21	9	0.39
(4,200)	1:A:308:SER:HG	1:A:245:ASN:HD22	9	0.39
(4,177)	1:A:308:SER:HG	1:A:398:ILE:H	14	0.39
(4,118)	1:A:290:CYS:HG	1:A:305:ASN:H	10	0.39
(4,116)	1:A:290:CYS:HG	1:A:277:VAL:H	9	0.39
(2,41)	1:A:303:ALA:O	1:A:307:VAL:N	1	0.39
(2,41)	1:A:303:ALA:O	1:A:307:VAL:N	2	0.39
(2,41)	1:A:303:ALA:O	1:A:307:VAL:N	7	0.39
(2,41)	1:A:303:ALA:O	1:A:307:VAL:N	10	0.39
(2,20)	1:A:255:LEU:O	1:A:259:THR:N	8	0.39
(2,19)	1:A:253:VAL:O	1:A:257:ILE:N	2	0.39
(2,19)	1:A:253:VAL:O	1:A:257:ILE:N	11	0.39
(2,13)	1:A:234:ILE:O	1:A:238:SER:N	12	0.39
(2,1)	1:A:220:LEU:O	1:A:224:LEU:N	5	0.39
(4,118)	1:A:290:CYS:HG	1:A:305:ASN:H	1	0.38
(2,50)	1:A:407:PHE:O	1:A:411:ASN:N	13	0.38
(2,46)	1:A:403:PHE:O	1:A:407:PHE:N	14	0.38
(2,38)	1:A:299:LEU:O	1:A:303:ALA:N	1	0.38
(2,37)	1:A:298:LEU:O	1:A:302:ALA:N	7	0.38
(2,22)	1:A:258:THR:O	1:A:262:THR:N	13	0.38
(2,10)	1:A:230:PRO:O	1:A:234:ILE:N	12	0.38
(4,174)	1:A:308:SER:HG	1:A:298:LEU:H	10	0.37
(4,115)	1:A:290:CYS:HG	1:A:248:ALA:H	12	0.37
(4,114)	1:A:290:CYS:HG	1:A:245:ASN:H	4	0.37
(2,9)	1:A:229:ILE:O	1:A:233:LEU:N	13	0.37
(2,50)	1:A:407:PHE:O	1:A:411:ASN:N	14	0.37
(2,46)	1:A:403:PHE:O	1:A:407:PHE:N	10	0.37
(2,46)	1:A:403:PHE:O	1:A:407:PHE:N	11	0.37
(2,41)	1:A:303:ALA:O	1:A:307:VAL:N	4	0.37
(2,40)	1:A:302:ALA:O	1:A:306:PHE:N	7	0.37
(2,38)	1:A:299:LEU:O	1:A:303:ALA:N	6	0.37
(2,37)	1:A:298:LEU:O	1:A:302:ALA:N	1	0.37
(2,37)	1:A:298:LEU:O	1:A:302:ALA:N	13	0.37
(2,37)	1:A:298:LEU:O	1:A:302:ALA:N	14	0.37
(2,22)	1:A:258:THR:O	1:A:262:THR:N	9	0.37
(2,22)	1:A:258:THR:O	1:A:262:THR:N	11	0.37
(2,13)	1:A:234:ILE:O	1:A:238:SER:N	5	0.37
(2,13)	1:A:234:ILE:O	1:A:238:SER:N	8	0.37
(2,13)	1:A:234:ILE:O	1:A:238:SER:N	13	0.37
(2,11)	1:A:232:LEU:O	1:A:236:ILE:N	5	0.37
(4,208)	1:A:290:CYS:HG	1:A:271:ARG:H	11	0.36

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(4,158)	1:A:296:SER:HG	1:A:419:LYS:H	9	0.36
(4,155)	1:A:296:SER:HG	1:A:316:GLY:H	15	0.36
(4,149)	1:A:296:SER:HG	1:A:281:LYS:H	2	0.36
(4,117)	1:A:290:CYS:HG	1:A:304:VAL:H	6	0.36
(4,114)	1:A:290:CYS:HG	1:A:245:ASN:H	13	0.36
(4,114)	1:A:290:CYS:HG	1:A:245:ASN:H	14	0.36
(2,37)	1:A:298:LEU:O	1:A:302:ALA:N	9	0.36
(2,30)	1:A:279:TYR:O	1:A:283:ILE:N	12	0.36
(2,22)	1:A:258:THR:O	1:A:262:THR:N	6	0.36
(2,20)	1:A:255:LEU:O	1:A:259:THR:N	10	0.36
(4,157)	1:A:296:SER:HG	1:A:418:TYR:H	11	0.35
(4,117)	1:A:290:CYS:HG	1:A:304:VAL:H	1	0.35
(4,115)	1:A:290:CYS:HG	1:A:248:ALA:H	5	0.35
(2,9)	1:A:229:ILE:O	1:A:233:LEU:N	15	0.35
(2,49)	1:A:406:ALA:O	1:A:410:PHE:N	7	0.35
(2,37)	1:A:298:LEU:O	1:A:302:ALA:N	4	0.35
(2,30)	1:A:279:TYR:O	1:A:283:ILE:N	9	0.35
(2,29)	1:A:278:SER:O	1:A:282:ALA:N	5	0.35
(2,19)	1:A:253:VAL:O	1:A:257:ILE:N	12	0.35
(2,10)	1:A:230:PRO:O	1:A:234:ILE:N	11	0.35
(4,172)	1:A:308:SER:HG	1:A:295:PHE:H	9	0.34
(4,112)	1:A:290:CYS:HG	1:A:242:PHE:H	11	0.34
(2,49)	1:A:406:ALA:O	1:A:410:PHE:N	9	0.34
(2,49)	1:A:406:ALA:O	1:A:410:PHE:N	12	0.34
(2,44)	1:A:401:ILE:O	1:A:405:LEU:N	8	0.34
(2,35)	1:A:295:PHE:O	1:A:299:LEU:N	14	0.34
(2,20)	1:A:255:LEU:O	1:A:259:THR:N	12	0.34
(2,10)	1:A:230:PRO:O	1:A:234:ILE:N	1	0.34
(2,10)	1:A:230:PRO:O	1:A:234:ILE:N	13	0.34
(4,205)	1:A:290:CYS:HG	1:A:400:ARG:HH21	5	0.33
(4,205)	1:A:290:CYS:HG	1:A:400:ARG:HH22	5	0.33
(4,156)	1:A:296:SER:HG	1:A:317:GLY:H	15	0.33
(2,22)	1:A:258:THR:O	1:A:262:THR:N	10	0.33
(2,22)	1:A:258:THR:O	1:A:262:THR:N	12	0.33
(2,13)	1:A:234:ILE:O	1:A:238:SER:N	2	0.33
(4,157)	1:A:296:SER:HG	1:A:418:TYR:H	4	0.32
(4,118)	1:A:290:CYS:HG	1:A:305:ASN:H	14	0.32
(4,108)	1:A:290:CYS:HG	1:A:217:GLU:H	15	0.32
(2,37)	1:A:298:LEU:O	1:A:302:ALA:N	6	0.32
(2,37)	1:A:298:LEU:O	1:A:302:ALA:N	11	0.32
(2,23)	1:A:259:THR:O	1:A:263:LEU:N	12	0.32
(2,22)	1:A:258:THR:O	1:A:262:THR:N	8	0.32

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,19)	1:A:253:VAL:O	1:A:257:ILE:N	8	0.32
(2,10)	1:A:230:PRO:O	1:A:234:ILE:N	4	0.32
(2,10)	1:A:230:PRO:O	1:A:234:ILE:N	10	0.32
(4,208)	1:A:290:CYS:HG	1:A:271:ARG:H	6	0.31
(4,174)	1:A:308:SER:HG	1:A:298:LEU:H	11	0.31
(4,174)	1:A:308:SER:HG	1:A:298:LEU:H	12	0.31
(4,114)	1:A:290:CYS:HG	1:A:245:ASN:H	11	0.31
(2,52)	1:A:410:PHE:O	1:A:414:TYR:N	9	0.31
(2,49)	1:A:406:ALA:O	1:A:410:PHE:N	13	0.31
(2,45)	1:A:402:GLY:O	1:A:406:ALA:N	8	0.31
(2,37)	1:A:298:LEU:O	1:A:302:ALA:N	8	0.31
(2,34)	1:A:294:VAL:O	1:A:298:LEU:N	15	0.31
(2,19)	1:A:253:VAL:O	1:A:257:ILE:N	9	0.31
(2,10)	1:A:230:PRO:O	1:A:234:ILE:N	2	0.31
(4,175)	1:A:308:SER:HG	1:A:395:ILE:H	6	0.3
(4,169)	1:A:308:SER:HG	1:A:243:TRP:H	9	0.3
(4,158)	1:A:296:SER:HG	1:A:419:LYS:H	3	0.3
(4,114)	1:A:290:CYS:HG	1:A:245:ASN:H	7	0.3
(4,108)	1:A:290:CYS:HG	1:A:217:GLU:H	8	0.3
(2,9)	1:A:229:ILE:O	1:A:233:LEU:N	6	0.3
(2,5)	1:A:224:LEU:O	1:A:228:TYR:N	4	0.3
(2,49)	1:A:406:ALA:O	1:A:410:PHE:N	1	0.3
(2,38)	1:A:299:LEU:O	1:A:303:ALA:N	4	0.3
(2,29)	1:A:278:SER:O	1:A:282:ALA:N	3	0.3
(2,19)	1:A:253:VAL:O	1:A:257:ILE:N	4	0.3
(2,15)	1:A:237:LEU:O	1:A:241:SER:N	2	0.3
(2,10)	1:A:230:PRO:O	1:A:234:ILE:N	7	0.3
(4,208)	1:A:290:CYS:HG	1:A:271:ARG:H	9	0.29
(4,172)	1:A:308:SER:HG	1:A:295:PHE:H	2	0.29
(4,158)	1:A:296:SER:HG	1:A:419:LYS:H	13	0.29
(4,157)	1:A:296:SER:HG	1:A:418:TYR:H	12	0.29
(4,121)	1:A:290:CYS:HG	1:A:309:ARG:H	1	0.29
(4,112)	1:A:290:CYS:HG	1:A:242:PHE:H	1	0.29
(2,5)	1:A:224:LEU:O	1:A:228:TYR:N	2	0.29
(2,49)	1:A:406:ALA:O	1:A:410:PHE:N	2	0.29
(2,49)	1:A:406:ALA:O	1:A:410:PHE:N	5	0.29
(2,45)	1:A:402:GLY:O	1:A:406:ALA:N	3	0.29
(2,41)	1:A:303:ALA:O	1:A:307:VAL:N	14	0.29
(2,37)	1:A:298:LEU:O	1:A:302:ALA:N	3	0.29
(2,34)	1:A:294:VAL:O	1:A:298:LEU:N	12	0.29
(4,118)	1:A:290:CYS:HG	1:A:305:ASN:H	9	0.28
(2,5)	1:A:224:LEU:O	1:A:228:TYR:N	1	0.28

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,49)	1:A:406:ALA:O	1:A:410:PHE:N	8	0.28
(2,35)	1:A:295:PHE:O	1:A:299:LEU:N	6	0.28
(2,19)	1:A:253:VAL:O	1:A:257:ILE:N	14	0.28
(2,10)	1:A:230:PRO:O	1:A:234:ILE:N	14	0.28
(4,198)	1:A:296:SER:HG	1:A:226:GLN:HE21	14	0.27
(4,198)	1:A:296:SER:HG	1:A:226:GLN:HE22	14	0.27
(4,169)	1:A:308:SER:HG	1:A:243:TRP:H	2	0.27
(4,126)	1:A:290:CYS:HG	1:A:317:GLY:H	2	0.27
(4,117)	1:A:290:CYS:HG	1:A:304:VAL:H	8	0.27
(4,114)	1:A:290:CYS:HG	1:A:245:ASN:H	12	0.27
(2,5)	1:A:224:LEU:O	1:A:228:TYR:N	5	0.27
(2,5)	1:A:224:LEU:O	1:A:228:TYR:N	6	0.27
(2,5)	1:A:224:LEU:O	1:A:228:TYR:N	9	0.27
(2,5)	1:A:224:LEU:O	1:A:228:TYR:N	15	0.27
(2,49)	1:A:406:ALA:O	1:A:410:PHE:N	3	0.27
(2,2)	1:A:221:GLY:O	1:A:225:ILE:N	4	0.27
(2,15)	1:A:237:LEU:O	1:A:241:SER:N	12	0.27
(4,218)	1:A:308:SER:HG	1:A:263:LEU:H	11	0.26
(4,174)	1:A:308:SER:HG	1:A:298:LEU:H	7	0.26
(4,158)	1:A:296:SER:HG	1:A:419:LYS:H	11	0.26
(4,153)	1:A:296:SER:HG	1:A:314:GLY:H	2	0.26
(4,138)	1:A:290:CYS:HG	1:A:427:PHE:H	9	0.26
(4,114)	1:A:290:CYS:HG	1:A:245:ASN:H	8	0.26
(4,114)	1:A:290:CYS:HG	1:A:245:ASN:H	15	0.26
(2,51)	1:A:409:ILE:O	1:A:413:PHE:N	7	0.26
(2,51)	1:A:409:ILE:O	1:A:413:PHE:N	12	0.26
(2,5)	1:A:224:LEU:O	1:A:228:TYR:N	8	0.26
(2,5)	1:A:224:LEU:O	1:A:228:TYR:N	11	0.26
(2,5)	1:A:224:LEU:O	1:A:228:TYR:N	13	0.26
(2,45)	1:A:402:GLY:O	1:A:406:ALA:N	14	0.26
(2,31)	1:A:288:ALA:O	1:A:292:LEU:N	7	0.26
(2,29)	1:A:278:SER:O	1:A:282:ALA:N	7	0.26
(2,19)	1:A:253:VAL:O	1:A:257:ILE:N	15	0.26
(2,10)	1:A:230:PRO:O	1:A:234:ILE:N	8	0.26
(2,10)	1:A:230:PRO:O	1:A:234:ILE:N	9	0.26
(4,207)	1:A:290:CYS:HG	1:A:270:SER:H	13	0.25
(4,174)	1:A:308:SER:HG	1:A:298:LEU:H	13	0.25
(4,118)	1:A:290:CYS:HG	1:A:305:ASN:H	12	0.25
(4,118)	1:A:290:CYS:HG	1:A:305:ASN:H	15	0.25
(2,5)	1:A:224:LEU:O	1:A:228:TYR:N	3	0.25
(2,5)	1:A:224:LEU:O	1:A:228:TYR:N	14	0.25
(2,49)	1:A:406:ALA:O	1:A:410:PHE:N	4	0.25

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,2)	1:A:221:GLY:O	1:A:225:ILE:N	12	0.25
(2,19)	1:A:253:VAL:O	1:A:257:ILE:N	3	0.25
(2,13)	1:A:234:ILE:O	1:A:238:SER:N	7	0.25
(4,153)	1:A:296:SER:HG	1:A:314:GLY:H	7	0.24
(4,118)	1:A:290:CYS:HG	1:A:305:ASN:H	3	0.24
(4,118)	1:A:290:CYS:HG	1:A:305:ASN:H	11	0.24
(3,253)	1:A:416:ILE:HB	1:A:416:ILE:H	9	0.24
(2,51)	1:A:409:ILE:O	1:A:413:PHE:N	6	0.24
(2,51)	1:A:409:ILE:O	1:A:413:PHE:N	13	0.24
(2,51)	1:A:409:ILE:O	1:A:413:PHE:N	15	0.24
(2,42)	1:A:398:ILE:O	1:A:402:GLY:N	1	0.24
(2,34)	1:A:294:VAL:O	1:A:298:LEU:N	1	0.24
(2,31)	1:A:288:ALA:O	1:A:292:LEU:N	3	0.24
(4,202)	1:A:296:SER:HG	1:A:310:GLN:HE21	3	0.23
(4,202)	1:A:296:SER:HG	1:A:310:GLN:HE22	3	0.23
(4,198)	1:A:296:SER:HG	1:A:226:GLN:HE21	12	0.23
(4,198)	1:A:296:SER:HG	1:A:226:GLN:HE22	12	0.23
(2,51)	1:A:409:ILE:O	1:A:413:PHE:N	3	0.23
(2,37)	1:A:298:LEU:O	1:A:302:ALA:N	5	0.23
(2,34)	1:A:294:VAL:O	1:A:298:LEU:N	3	0.23
(2,2)	1:A:221:GLY:O	1:A:225:ILE:N	5	0.23
(4,196)	1:A:290:CYS:HG	1:A:219:GLN:HE21	7	0.22
(4,196)	1:A:290:CYS:HG	1:A:219:GLN:HE22	7	0.22
(4,175)	1:A:308:SER:HG	1:A:395:ILE:H	10	0.22
(4,175)	1:A:308:SER:HG	1:A:395:ILE:H	13	0.22
(4,126)	1:A:290:CYS:HG	1:A:317:GLY:H	10	0.22
(3,657)	1:A:276:LYS:H	1:A:274:LEU:H	13	0.22
(3,657)	1:A:276:LYS:H	1:A:274:LEU:H	15	0.22
(2,51)	1:A:409:ILE:O	1:A:413:PHE:N	2	0.22
(2,51)	1:A:409:ILE:O	1:A:413:PHE:N	4	0.22
(2,51)	1:A:409:ILE:O	1:A:413:PHE:N	11	0.22
(2,5)	1:A:224:LEU:O	1:A:228:TYR:N	7	0.22
(2,5)	1:A:224:LEU:O	1:A:228:TYR:N	12	0.22
(2,41)	1:A:303:ALA:O	1:A:307:VAL:N	8	0.22
(2,30)	1:A:279:TYR:O	1:A:283:ILE:N	5	0.22
(2,27)	1:A:276:LYS:O	1:A:280:VAL:N	3	0.22
(2,15)	1:A:237:LEU:O	1:A:241:SER:N	13	0.22
(2,10)	1:A:230:PRO:O	1:A:234:ILE:N	3	0.22
(4,205)	1:A:290:CYS:HG	1:A:400:ARG:HH21	15	0.21
(4,205)	1:A:290:CYS:HG	1:A:400:ARG:HH22	15	0.21
(4,169)	1:A:308:SER:HG	1:A:243:TRP:H	3	0.21
(2,51)	1:A:409:ILE:O	1:A:413:PHE:N	8	0.21

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,49)	1:A:406:ALA:O	1:A:410:PHE:N	10	0.21
(2,27)	1:A:276:LYS:O	1:A:280:VAL:N	11	0.21
(2,2)	1:A:221:GLY:O	1:A:225:ILE:N	14	0.21
(2,15)	1:A:237:LEU:O	1:A:241:SER:N	10	0.21
(2,10)	1:A:230:PRO:O	1:A:234:ILE:N	6	0.21
(4,175)	1:A:308:SER:HG	1:A:395:ILE:H	4	0.2
(4,175)	1:A:308:SER:HG	1:A:395:ILE:H	11	0.2
(4,157)	1:A:296:SER:HG	1:A:418:TYR:H	2	0.2
(4,136)	1:A:290:CYS:HG	1:A:419:LYS:H	7	0.2
(4,122)	1:A:290:CYS:HG	1:A:312:GLU:H	6	0.2
(4,114)	1:A:290:CYS:HG	1:A:245:ASN:H	2	0.2
(4,114)	1:A:290:CYS:HG	1:A:245:ASN:H	9	0.2
(2,51)	1:A:409:ILE:O	1:A:413:PHE:N	1	0.2
(2,5)	1:A:224:LEU:O	1:A:228:TYR:N	10	0.2
(2,2)	1:A:221:GLY:O	1:A:225:ILE:N	6	0.2
(2,2)	1:A:221:GLY:O	1:A:225:ILE:N	11	0.2
(2,19)	1:A:253:VAL:O	1:A:257:ILE:N	5	0.2
(2,10)	1:A:230:PRO:O	1:A:234:ILE:N	15	0.2
(4,176)	1:A:308:SER:HG	1:A:396:ASP:H	12	0.19
(4,169)	1:A:308:SER:HG	1:A:243:TRP:H	11	0.19
(4,157)	1:A:296:SER:HG	1:A:418:TYR:H	1	0.19
(4,157)	1:A:296:SER:HG	1:A:418:TYR:H	14	0.19
(4,114)	1:A:290:CYS:HG	1:A:245:ASN:H	1	0.19
(2,8)	1:A:228:TYR:O	1:A:232:LEU:N	5	0.19
(2,41)	1:A:303:ALA:O	1:A:307:VAL:N	15	0.19
(2,35)	1:A:295:PHE:O	1:A:299:LEU:N	15	0.19
(2,2)	1:A:221:GLY:O	1:A:225:ILE:N	1	0.19
(2,2)	1:A:221:GLY:O	1:A:225:ILE:N	2	0.19
(2,2)	1:A:221:GLY:O	1:A:225:ILE:N	7	0.19
(2,2)	1:A:221:GLY:O	1:A:225:ILE:N	8	0.19
(2,2)	1:A:221:GLY:O	1:A:225:ILE:N	9	0.19
(2,2)	1:A:221:GLY:O	1:A:225:ILE:N	13	0.19
(2,2)	1:A:221:GLY:O	1:A:225:ILE:N	15	0.19
(2,10)	1:A:230:PRO:O	1:A:234:ILE:N	5	0.19
(4,218)	1:A:308:SER:HG	1:A:263:LEU:H	9	0.18
(4,205)	1:A:290:CYS:HG	1:A:400:ARG:HH21	3	0.18
(4,205)	1:A:290:CYS:HG	1:A:400:ARG:HH22	3	0.18
(4,177)	1:A:308:SER:HG	1:A:398:ILE:H	7	0.18
(4,177)	1:A:308:SER:HG	1:A:398:ILE:H	8	0.18
(4,166)	1:A:308:SER:HG	1:A:239:TRP:H	8	0.18
(4,158)	1:A:296:SER:HG	1:A:419:LYS:H	12	0.18
(4,138)	1:A:290:CYS:HG	1:A:427:PHE:H	12	0.18

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(4,114)	1:A:290:CYS:HG	1:A:245:ASN:H	5	0.18
(4,108)	1:A:290:CYS:HG	1:A:217:GLU:H	9	0.18
(2,2)	1:A:221:GLY:O	1:A:225:ILE:N	3	0.18
(2,2)	1:A:221:GLY:O	1:A:225:ILE:N	10	0.18
(2,19)	1:A:253:VAL:O	1:A:257:ILE:N	7	0.18
(4,216)	1:A:308:SER:HG	1:A:257:ILE:H	11	0.17
(2,49)	1:A:406:ALA:O	1:A:410:PHE:N	11	0.17
(2,49)	1:A:406:ALA:O	1:A:410:PHE:N	14	0.17
(4,176)	1:A:308:SER:HG	1:A:396:ASP:H	7	0.16
(4,175)	1:A:308:SER:HG	1:A:395:ILE:H	5	0.16
(4,175)	1:A:308:SER:HG	1:A:395:ILE:H	9	0.16
(4,158)	1:A:296:SER:HG	1:A:419:LYS:H	14	0.16
(4,114)	1:A:290:CYS:HG	1:A:245:ASN:H	6	0.16
(4,114)	1:A:290:CYS:HG	1:A:245:ASN:H	10	0.16
(3,584)	1:A:274:LEU:HG	1:A:276:LYS:H	11	0.16
(2,43)	1:A:399:SER:O	1:A:403:PHE:N	1	0.16
(2,29)	1:A:278:SER:O	1:A:282:ALA:N	11	0.16
(2,13)	1:A:234:ILE:O	1:A:238:SER:N	15	0.16
(4,117)	1:A:290:CYS:HG	1:A:304:VAL:H	5	0.15
(2,15)	1:A:237:LEU:O	1:A:241:SER:N	14	0.15
(4,208)	1:A:290:CYS:HG	1:A:271:ARG:H	1	0.14
(4,174)	1:A:308:SER:HG	1:A:298:LEU:H	2	0.14
(4,172)	1:A:308:SER:HG	1:A:295:PHE:H	3	0.14
(4,137)	1:A:290:CYS:HG	1:A:426:GLU:H	14	0.14
(3,644)	1:A:420:ILE:HA	1:A:422:ARG:H	1	0.14
(3,644)	1:A:420:ILE:HA	1:A:422:ARG:H	14	0.14
(2,31)	1:A:288:ALA:O	1:A:292:LEU:N	5	0.14
(2,31)	1:A:288:ALA:O	1:A:292:LEU:N	10	0.14
(4,202)	1:A:296:SER:HG	1:A:310:GLN:HE21	12	0.13
(4,202)	1:A:296:SER:HG	1:A:310:GLN:HE22	12	0.13
(4,199)	1:A:290:CYS:HG	1:A:226:GLN:HE21	7	0.13
(4,199)	1:A:290:CYS:HG	1:A:226:GLN:HE22	7	0.13
(4,157)	1:A:296:SER:HG	1:A:418:TYR:H	3	0.13
(4,116)	1:A:290:CYS:HG	1:A:277:VAL:H	5	0.13
(4,112)	1:A:290:CYS:HG	1:A:242:PHE:H	6	0.13
(3,694)	1:A:270:SER:HA	1:A:272:ALA:H	7	0.13
(3,644)	1:A:420:ILE:HA	1:A:422:ARG:H	6	0.13
(2,8)	1:A:228:TYR:O	1:A:232:LEU:N	6	0.13
(2,30)	1:A:279:TYR:O	1:A:283:ILE:N	14	0.13
(4,197)	1:A:296:SER:HG	1:A:219:GLN:HE21	8	0.12
(4,197)	1:A:296:SER:HG	1:A:219:GLN:HE22	8	0.12
(4,158)	1:A:296:SER:HG	1:A:419:LYS:H	4	0.12

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(4,153)	1:A:296:SER:HG	1:A:314:GLY:H	13	0.12
(4,126)	1:A:290:CYS:HG	1:A:317:GLY:H	13	0.12
(3,965)	1:A:243:TRP:HA	1:A:245:ASN:H	6	0.12
(3,965)	1:A:243:TRP:HA	1:A:245:ASN:H	13	0.12
(3,694)	1:A:270:SER:HA	1:A:272:ALA:H	14	0.12
(3,644)	1:A:420:ILE:HA	1:A:422:ARG:H	2	0.12
(3,644)	1:A:420:ILE:HA	1:A:422:ARG:H	3	0.12
(3,644)	1:A:420:ILE:HA	1:A:422:ARG:H	4	0.12
(3,644)	1:A:420:ILE:HA	1:A:422:ARG:H	5	0.12
(3,644)	1:A:420:ILE:HA	1:A:422:ARG:H	8	0.12
(3,644)	1:A:420:ILE:HA	1:A:422:ARG:H	9	0.12
(3,644)	1:A:420:ILE:HA	1:A:422:ARG:H	11	0.12
(3,644)	1:A:420:ILE:HA	1:A:422:ARG:H	12	0.12
(3,510)	1:A:310:GLN:HB2	1:A:311:ARG:H	10	0.12
(3,510)	1:A:310:GLN:HB3	1:A:311:ARG:H	10	0.12
(3,485)	1:A:244:ILE:HB	1:A:245:ASN:H	6	0.12
(2,51)	1:A:409:ILE:O	1:A:413:PHE:N	9	0.12
(2,15)	1:A:237:LEU:O	1:A:241:SER:N	11	0.12
(2,15)	1:A:237:LEU:O	1:A:241:SER:N	15	0.12
(4,199)	1:A:290:CYS:HG	1:A:226:GLN:HE21	15	0.11
(4,199)	1:A:290:CYS:HG	1:A:226:GLN:HE22	15	0.11
(4,166)	1:A:308:SER:HG	1:A:239:TRP:H	3	0.11
(4,135)	1:A:290:CYS:HG	1:A:418:TYR:H	2	0.11
(4,112)	1:A:290:CYS:HG	1:A:242:PHE:H	10	0.11
(3,965)	1:A:243:TRP:HA	1:A:245:ASN:H	2	0.11
(3,965)	1:A:243:TRP:HA	1:A:245:ASN:H	4	0.11
(3,965)	1:A:243:TRP:HA	1:A:245:ASN:H	9	0.11
(3,965)	1:A:243:TRP:HA	1:A:245:ASN:H	10	0.11
(3,965)	1:A:243:TRP:HA	1:A:245:ASN:H	11	0.11
(3,694)	1:A:270:SER:HA	1:A:272:ALA:H	10	0.11
(3,694)	1:A:270:SER:HA	1:A:272:ALA:H	11	0.11
(3,694)	1:A:270:SER:HA	1:A:272:ALA:H	12	0.11
(3,644)	1:A:420:ILE:HA	1:A:422:ARG:H	7	0.11
(3,644)	1:A:420:ILE:HA	1:A:422:ARG:H	10	0.11
(3,644)	1:A:420:ILE:HA	1:A:422:ARG:H	13	0.11
(3,644)	1:A:420:ILE:HA	1:A:422:ARG:H	15	0.11
(3,586)	1:A:275:PRO:HA	1:A:277:VAL:H	11	0.11
(3,485)	1:A:244:ILE:HB	1:A:245:ASN:H	2	0.11
(3,485)	1:A:244:ILE:HB	1:A:245:ASN:H	3	0.11
(3,485)	1:A:244:ILE:HB	1:A:245:ASN:H	11	0.11
(3,485)	1:A:244:ILE:HB	1:A:245:ASN:H	12	0.11
(3,485)	1:A:244:ILE:HB	1:A:245:ASN:H	13	0.11

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,29)	1:A:278:SER:O	1:A:282:ALA:N	4	0.11

10 Dihedral-angle violation analysis (i)

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