Full wwPDB NMR Structure Validation Report (i)

Jun 3, 2023 – 06:41 PM EDT

PDB ID	:	2MQN
BMRB ID	:	25040
Title	:	Structural Investigation of hnRNP L
Authors	:	Blatter, M.; Allain, F.
Deposited on	:	2014-06-24

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:

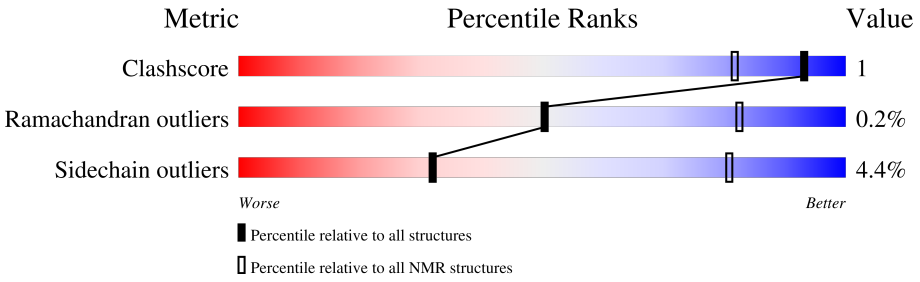
MolProbity	:	4.02b-467
Percentile statistics	:	20191225.v01 (using entries in the PDB archive December 25th 2019)
wwPDB-RCI	:	v_1n_11_5_13_A (Berjanski et al., 2005)
PANAV	:	Wang et al. (2010)
wwPDB-ShiftChecker	:	v1.2
BMRB Restraints Analysis	:	v1.2
Ideal geometry (proteins)	:	Engh & Huber (2001)
Ideal 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 75%.

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	216	83% • 12%

2 Ensemble composition and analysis (i)

This entry contains 20 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:376-A:475, A:494-A:533, A:538-A:586 (189)	0.94	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 6 clusters and 3 single-model clusters were found.

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

3 Entry composition (i)

There is only 1 type of molecule in this entry. The entry contains 3327 atoms, of which 1629 are hydrogens and 0 are deuteriums.

- Molecule 1 is a protein called Heterogenous nuclear ribonucleoprotein L.

Mol	Chain	Residues	Atoms						Trace
			Total	C	H	N	O	S	
1	A	216	3327	1069	1629	289	325	15	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: Heterogenous nuclear ribonucleoprotein L

Chain A: 83% • 12%

D371 Y372 G373 P374 H375 L386 L402 M412 F440 K445 E476 S477 R478 N479 N480 R481 F482 S483 T484 P485 E486 Q487 A488 A489 K490 N491 R492 I493 H501 G534 K535 S536 E537 Y562 G569 P570 S586

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: Heterogenous nuclear ribonucleoprotein L

Chain A: 81% 6% 12%

D371 Y372 G373 P374 H375 L386 K390 L402 M412 A418 R431 F440 K445 E476 S477 R478 N479 N480 R481 F482 S483 T484 P485 E486 Q487 A488 A489 K490 N491 R492 I493 H501 F502 F503 L507 G534 K535 S536 E537 G569 P570 Q583 S586

4.2.2 Score per residue for model 2

• Molecule 1: Heterogenous nuclear ribonucleoprotein L

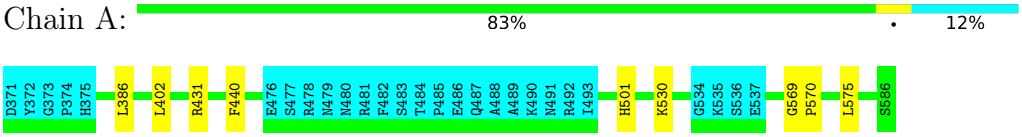
Chain A: 84% • 12%

D371 Y372 G373 P374 H375 L386 R431 F440 K445 E476 S477 R478 N479 N480 R481 F482 S483 T484 P485 E486 Q487 A488 A489 K490 N491 R492 I493 H501 G534 K535 S536 E537 G569 P570 L575 S586

4.2.3 Score per residue for model 3

• Molecule 1: Heterogenous nuclear ribonucleoprotein L

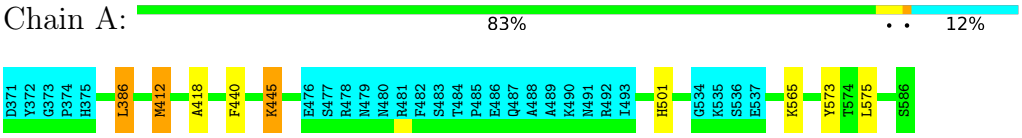
Chain A:



4.2.4 Score per residue for model 4

• Molecule 1: Heterogenous nuclear ribonucleoprotein L

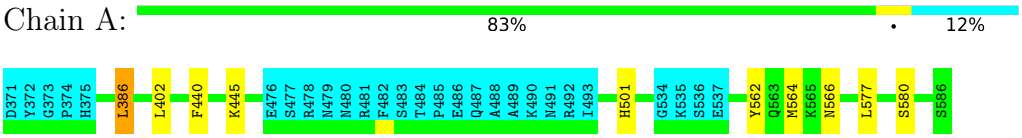
Chain A:



4.2.5 Score per residue for model 5

• Molecule 1: Heterogenous nuclear ribonucleoprotein L

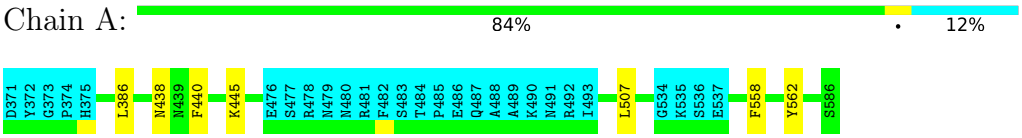
Chain A:



4.2.6 Score per residue for model 6

• Molecule 1: Heterogenous nuclear ribonucleoprotein L

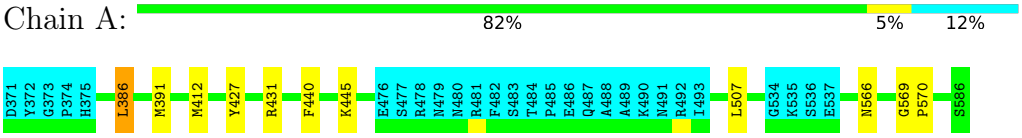
Chain A:



4.2.7 Score per residue for model 7

• Molecule 1: Heterogenous nuclear ribonucleoprotein L

Chain A:



4.2.8 Score per residue for model 8

• Molecule 1: Heterogenous nuclear ribonucleoprotein L

Chain A: 84% • 12%

D371 Y372 G373 P374 H375 L386 L402 R431 F440 K445 E476 S477 R478 N479 N480 R481 F482 S483 T484 P485 E486 Q487 A488 A489 K490 N491 R492 I493 H501 K530 G534 K535 S536 E537 Y562 S586

4.2.9 Score per residue for model 9

• Molecule 1: Heterogenous nuclear ribonucleoprotein L

Chain A: 81% 6% 12%

D371 Y372 G373 P374 H375 M382 L386 L402 M412 Y427 F440 E476 S477 R478 N479 N480 R481 F482 S483 T484 P485 E486 Q487 A488 A489 K490 N491 R492 I493 Q494 N498 H501 L507 K530 G534 K535 S536 E537 Y562 G569 P570 L577 S586

4.2.10 Score per residue for model 10

• Molecule 1: Heterogenous nuclear ribonucleoprotein L

Chain A: 80% 7% 12%

D371 Y372 G373 P374 H375 L386 L402 M412 A418 Y427 R431 F440 K445 F474 S475 E476 S477 R478 N479 N480 R481 F482 S483 T484 P485 E486 Q487 A488 A489 K490 N491 R492 I493 Q494 H501 L507 K530 G534 K535 S536 E537 W546 G569 P570

S586

4.2.11 Score per residue for model 11

• Molecule 1: Heterogenous nuclear ribonucleoprotein L

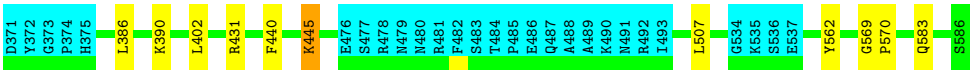
Chain A: 82% 6% 12%

D371 Y372 G373 P374 H375 L386 L402 I433 F440 K445 E476 S477 R478 N479 N480 R481 F482 S483 T484 P485 E486 Q487 A488 A489 K490 N491 R492 I493 Q494 H501 K530 G534 K535 S536 E537 W546 F558 G569 P570 S586

4.2.12 Score per residue for model 12

• Molecule 1: Heterogenous nuclear ribonucleoprotein L

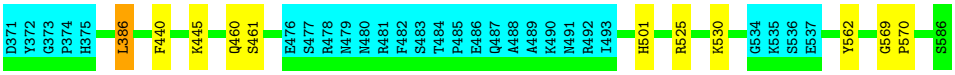
Chain A: 82% 5% 12%



4.2.13 Score per residue for model 13

- Molecule 1: Heterogenous nuclear ribonucleoprotein L

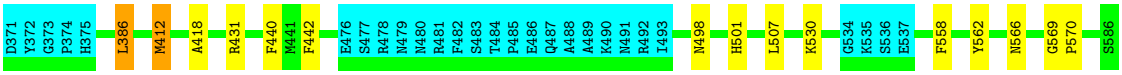
Chain A:



4.2.14 Score per residue for model 14

- Molecule 1: Heterogenous nuclear ribonucleoprotein L

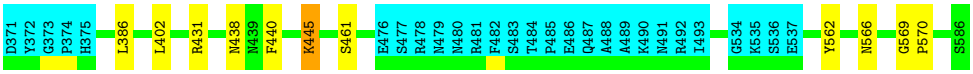
Chain A:



4.2.15 Score per residue for model 15

- Molecule 1: Heterogenous nuclear ribonucleoprotein L

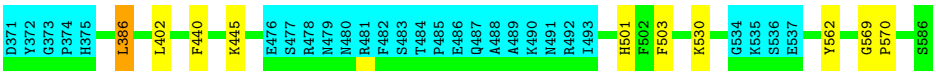
Chain A:



4.2.16 Score per residue for model 16

- Molecule 1: Heterogenous nuclear ribonucleoprotein L

Chain A:



4.2.17 Score per residue for model 17

- Molecule 1: Heterogenous nuclear ribonucleoprotein L

Chain A: 81% 5% • 12%

D371 Y372 G373 P374 H375 L386 N398 L402 M412 A418 F440 K445 K452 E476 S477 R478 N479 N480 R481 F482 S483 T484 P485 E486 Q487 A488 A489 K490 N491 R492 I493 H501 G534 K535 S536 E537 Y562 G569 P570 Y573 S580 S586

4.2.18 Score per residue for model 18

- Molecule 1: Heterogenous nuclear ribonucleoprotein L

Chain A: 80% 7% 12%

D371 Y372 G373 P374 H375 L386 K390 L402 K410 F411 M412 Y427 F440 K445 Y471 E476 S477 R478 N479 N480 R481 F482 S483 T484 P485 E486 Q487 A488 A489 K490 N491 R492 I493 N498 H501 K530 G534 K535 S536 E537 F558 Y562 G569 P570

S586

4.2.19 Score per residue for model 19

- Molecule 1: Heterogenous nuclear ribonucleoprotein L

Chain A: 81% 6% 12%

D371 Y372 G373 P374 H375 L386 K390 R431 N438 N439 F440 K445 E476 S477 R478 N479 N480 R481 F482 S483 T484 P485 E486 Q487 A488 A489 K490 N491 R492 I493 H501 K530 G534 K535 S536 E537 Y562 N566 G569 P570 L575 S586

4.2.20 Score per residue for model 20

- Molecule 1: Heterogenous nuclear ribonucleoprotein L

Chain A: 82% 5% 12%

D371 Y372 G373 P374 H375 L386 L402 M412 F440 K445 S461 E476 S477 R478 N479 N480 R481 F482 S483 T484 P485 E486 Q487 A488 A489 K490 N491 R492 I493 F502 G534 K535 S536 E537 L544 L559 Y562 G569 P570 S586

5 Refinement protocol and experimental data overview (i)

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

Of the 250 calculated structures, 20 were deposited, based on the following criterion: *structures with the lowest energy*.

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

Software name	Classification	Version
TopSpin	refinement	
CYANA	structure solution	
Amber	refinement	

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

Chemical shift file(s)	working_cs.cif
Number of chemical shift lists	1
Total number of shifts	2075
Number of shifts mapped to atoms	2075
Number of unparsed shifts	0
Number of shifts with mapping errors	0
Number of shifts with mapping warnings	0
Assignment completeness (well-defined parts)	75%

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	1481	1426	1426	4±2
All	All	29620	28520	28520	76

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 1.

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

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:386:LEU:H	1:A:386:LEU:HD23	0.58	1.59	15	12
1:A:386:LEU:HD13	1:A:386:LEU:H	0.58	1.58	13	8
1:A:412:MET:HE3	1:A:418:ALA:HB1	0.53	1.80	14	5
1:A:501:HIS:CD2	1:A:503:PHE:CZ	0.53	2.97	1	2
1:A:445:LYS:H	1:A:445:LYS:CD	0.49	2.21	15	5
1:A:569:GLY:N	1:A:570:PRO:CD	0.46	2.79	9	16
1:A:386:LEU:H	1:A:386:LEU:CD1	0.46	2.23	9	5
1:A:442:PHE:CE1	1:A:558:PHE:CD1	0.45	3.05	14	1
1:A:575:LEU:H	1:A:575:LEU:HD23	0.44	1.72	3	3
1:A:507:LEU:H	1:A:507:LEU:HD23	0.43	1.73	14	4
1:A:410:LYS:HE2	1:A:471:TYR:CD1	0.43	2.49	18	1
1:A:445:LYS:H	1:A:445:LYS:HD3	0.42	1.73	17	2
1:A:559:LEU:O	1:A:559:LEU:HD13	0.42	2.15	20	1
1:A:445:LYS:HD3	1:A:445:LYS:H	0.42	1.74	2	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:562:TYR:CZ	1:A:573:TYR:CE2	0.41	3.08	17	1
1:A:501:HIS:CD2	1:A:580:SER:HB3	0.41	2.50	17	2
1:A:507:LEU:HD23	1:A:507:LEU:H	0.41	1.76	1	2
1:A:382:MET:CE	1:A:412:MET:SD	0.41	3.09	9	1
1:A:502:PHE:CD1	1:A:544:LEU:HD23	0.40	2.51	20	1
1:A:573:TYR:O	1:A:573:TYR:CG	0.40	2.74	4	1
1:A:427:TYR:CD1	1:A:427:TYR:C	0.40	2.95	18	1
1:A:386:LEU:H	1:A:386:LEU:CD2	0.40	2.30	6	1

6.3 Torsion angles (i)

6.3.1 Protein backbone (i)

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

Mol	Chain	Analysed	Favoured	Allowed	Outliers	Percentiles	
1	A	188/216 (87%)	178±2 (95±1%)	10±2 (5±1%)	0±1 (0±0%)	50	82
All	All	3760/4320 (87%)	3563 (95%)	190 (5%)	7 (0%)	50	82

All 4 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	461	SER	3
1	A	494	GLN	2
1	A	565	LYS	1
1	A	460	GLN	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	166/189 (88%)	159±2 (96±1%)	7±2 (4±1%)	32	81
All	All	3320/3780 (88%)	3173 (96%)	147 (4%)	32	81

All 29 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	440	PHE	20
1	A	445	LYS	17
1	A	402	LEU	13
1	A	562	TYR	13
1	A	501	HIS	11
1	A	431	ARG	10
1	A	530	LYS	10
1	A	386	LEU	8
1	A	412	MET	7
1	A	566	ASN	5
1	A	390	LYS	4
1	A	438	ASN	3
1	A	558	PHE	3
1	A	427	TYR	3
1	A	498	ASN	3
1	A	583	GLN	2
1	A	577	LEU	2
1	A	546	TRP	2
1	A	564	MET	1
1	A	391	MET	1
1	A	474	PHE	1
1	A	433	ILE	1
1	A	494	GLN	1
1	A	507	LEU	1
1	A	525	ARG	1
1	A	398	ASN	1
1	A	452	LYS	1
1	A	575	LEU	1
1	A	559	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 75% for the well-defined parts and 73% 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	2075
Number of shifts mapped to atoms	2075
Number of unparsed shifts	0
Number of shifts with mapping errors	0
Number of shifts with mapping warnings	0
Number of shift outliers (ShiftChecker)	14

7.1.2 Chemical shift referencing (i)

The following table shows the suggested chemical shift referencing corrections.

Nucleus	# values	Correction ± precision, *ppm*	Suggested action
$^{13}C_{\alpha}$	186	2.46 ± 0.20	Should be applied
$^{13}C_{\beta}$	180	2.68 ± 0.13	Should be applied
$^{13}C'$	0	—	None (insufficient data)
^{15}N	203	-0.50 ± 0.30	None needed (< 0.5 ppm)

7.1.3 Completeness of resonance assignments (i)

The following table shows the completeness of the chemical shift assignments for the well-defined regions of the structure. The overall completeness is 75%, i.e. 1866 atoms were assigned a chemical shift out of a possible 2495. 0 out of 30 assigned methyl groups (LEU and VAL) were assigned stereospecifically.

	Total	^{1}H	^{13}C	^{15}N
Backbone	700/937 (75%)	356/380 (94%)	165/378 (44%)	179/179 (100%)
Sidechain	1051/1309 (80%)	717/851 (84%)	324/413 (78%)	10/45 (22%)

Continued on next page...

Continued from previous page...

	Total	^{1}H	^{13}C	^{15}N
Aromatic	115/249 (46%)	74/123 (60%)	40/120 (33%)	1/6 (17%)
Overall	1866/2495 (75%)	1147/1354 (85%)	529/911 (58%)	190/230 (83%)

The following table shows the completeness of the chemical shift assignments for the full structure. The overall completeness is 73%, i.e. 2074 atoms were assigned a chemical shift out of a possible 2853. 0 out of 30 assigned methyl groups (LEU and VAL) were assigned stereospecifically.

	Total	^{1}H	^{13}C	^{15}N
Backbone	791/1070 (74%)	402/434 (93%)	186/432 (43%)	203/204 (100%)
Sidechain	1162/1508 (77%)	791/975 (81%)	359/473 (76%)	12/60 (20%)
Aromatic	121/275 (44%)	78/136 (57%)	42/132 (32%)	1/7 (14%)
Overall	2074/2853 (73%)	1271/1545 (82%)	587/1037 (57%)	216/271 (80%)

7.1.4 Statistically unusual chemical shifts (i)

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

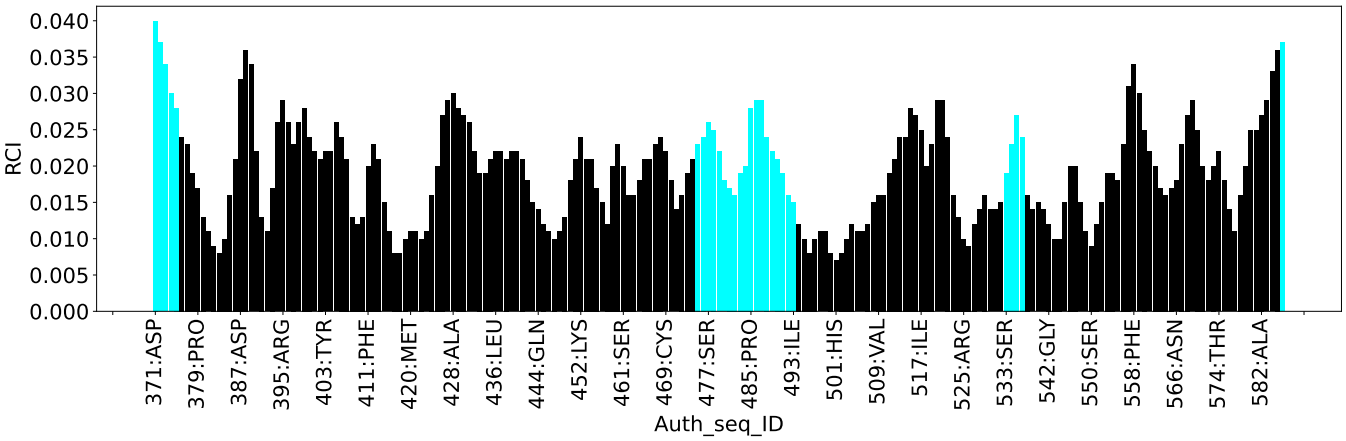
List Id	Chain	Res	Type	Atom	Shift, *ppm*	Expected range, *ppm*	Z-score
1	A	561	HIS	HE1	134.81	5.13 – 10.76	225.3
1	A	561	HIS	CE1	8.20	126.08 – 149.12	-56.2
1	A	478	ARG	CD	33.89	38.57 – 47.75	-10.1
1	A	554	GLU	HG2	0.31	1.24 – 3.30	-9.5
1	A	554	GLU	HG3	0.31	1.20 – 3.30	-9.2
1	A	496	PRO	HA	1.43	2.78 – 6.00	-9.2
1	A	472	LYS	HG2	-0.23	0.13 – 2.61	-6.4
1	A	470	SER	HB2	2.50	2.61 – 5.13	-5.5
1	A	526	PRO	HA	2.67	2.78 – 6.00	-5.3
1	A	576	LYS	HB2	0.51	0.58 – 2.97	-5.3
1	A	542	GLY	HA2	2.06	2.15 – 5.77	-5.2
1	A	419	ALA	HB1	0.12	0.14 – 2.58	-5.1
1	A	419	ALA	HB2	0.12	0.14 – 2.58	-5.1
1	A	419	ALA	HB3	0.12	0.14 – 2.58	-5.1

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	3758
Intra-residue (|i-j|=0)	481
Sequential (|i-j|=1)	1003
Medium range (|i-j|>1 and |i-j|<5)	574
Long range (|i-j|≥5)	1461
Inter-chain	0
Hydrogen bond restraints	239
Disulfide bond restraints	0
Total dihedral-angle restraints	0
Number of unmapped restraints	3
Number of restraints per residue	17.4
Number of long range restraints per residue[1]	7.3

[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)	9.1	0.2
0.2-0.5 (Medium)	9.1	0.5
>0.5 (Large)	53.6	3.15

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)

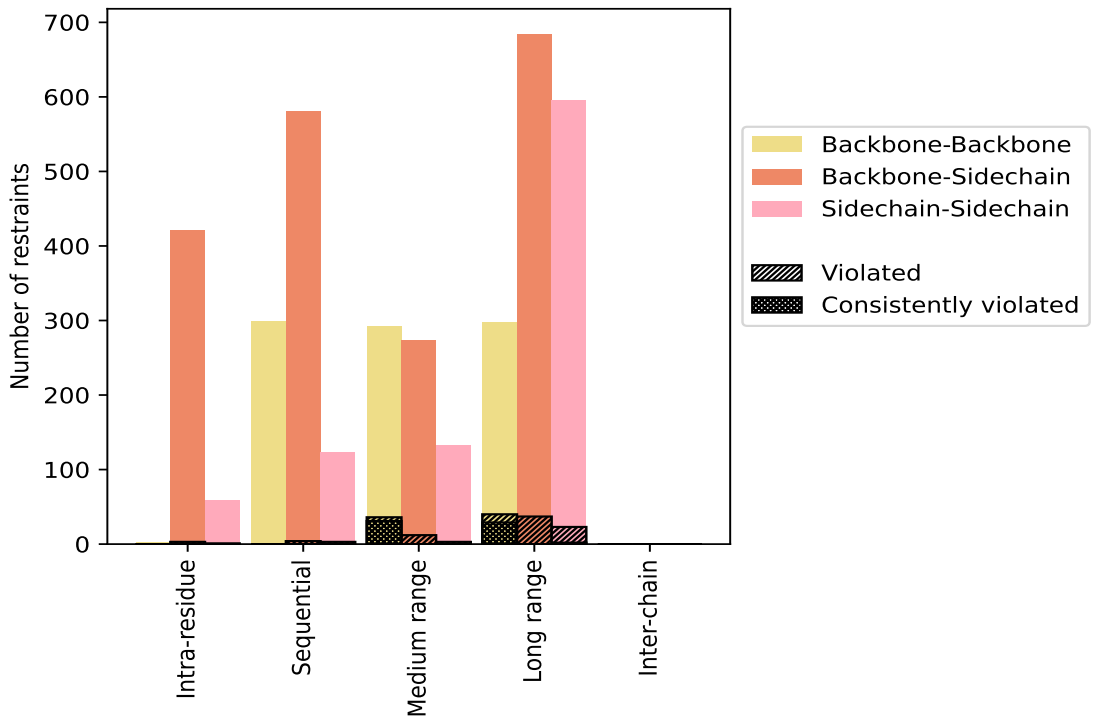
9.1 Summary of distance violations (i)

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)	481	12.8	4	0.8	0.1	0	0.0	0.0
Backbone-Backbone	2	0.1	0	0.0	0.0	0	0.0	0.0
Backbone-Sidechain	421	11.2	3	0.7	0.1	0	0.0	0.0
Sidechain-Sidechain	58	1.5	1	1.7	0.0	0	0.0	0.0
Sequential (|i-j|=1)	1003	26.7	7	0.7	0.2	0	0.0	0.0
Backbone-Backbone	299	8.0	0	0.0	0.0	0	0.0	0.0
Backbone-Sidechain	581	15.5	4	0.7	0.1	0	0.0	0.0
Sidechain-Sidechain	123	3.3	3	2.4	0.1	0	0.0	0.0
Medium range (|i-j|>1 & |i-j|<5)	574	15.3	16	2.8	0.4	0	0.0	0.0
Backbone-Backbone	168	4.5	1	0.6	0.0	0	0.0	0.0
Backbone-Sidechain	273	7.3	12	4.4	0.3	0	0.0	0.0
Sidechain-Sidechain	133	3.5	3	2.3	0.1	0	0.0	0.0
Long range (|i-j|≥5)	1461	38.9	71	4.9	1.9	2	0.1	0.1
Backbone-Backbone	182	4.8	11	6.0	0.3	0	0.0	0.0
Backbone-Sidechain	684	18.2	37	5.4	1.0	0	0.0	0.0
Sidechain-Sidechain	595	15.8	23	3.9	0.6	2	0.3	0.1
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	239	6.4	64	26.8	1.7	60	25.1	1.6
Disulfide bond	0	0.0	0	0.0	0.0	0	0.0	0.0
Total	3758	100.0	162	4.3	4.3	62	1.6	1.6
Backbone-Backbone	890	23.7	76	8.5	2.0	60	6.7	1.6
Backbone-Sidechain	1959	52.1	56	2.9	1.5	0	0.0	0.0
Sidechain-Sidechain	909	24.2	30	3.3	0.8	2	0.2	0.1

[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	1	2	34	33	0	70	0.67	1.47	0.26	0.68
2	0	1	33	38	0	72	0.65	1.24	0.27	0.69
3	2	0	32	40	0	74	0.64	1.31	0.28	0.71
4	0	1	33	33	0	67	0.7	1.38	0.24	0.71
5	1	2	32	35	0	70	0.68	2.28	0.33	0.7
6	0	2	33	39	0	74	0.62	1.67	0.3	0.6
7	0	0	34	36	0	70	0.69	2.5	0.35	0.68
8	0	0	32	36	0	68	0.69	1.68	0.27	0.74
9	0	0	34	41	0	75	0.62	1.18	0.27	0.66
10	0	2	33	37	0	72	0.65	1.06	0.26	0.7
11	0	0	34	39	0	73	0.63	1.14	0.27	0.7

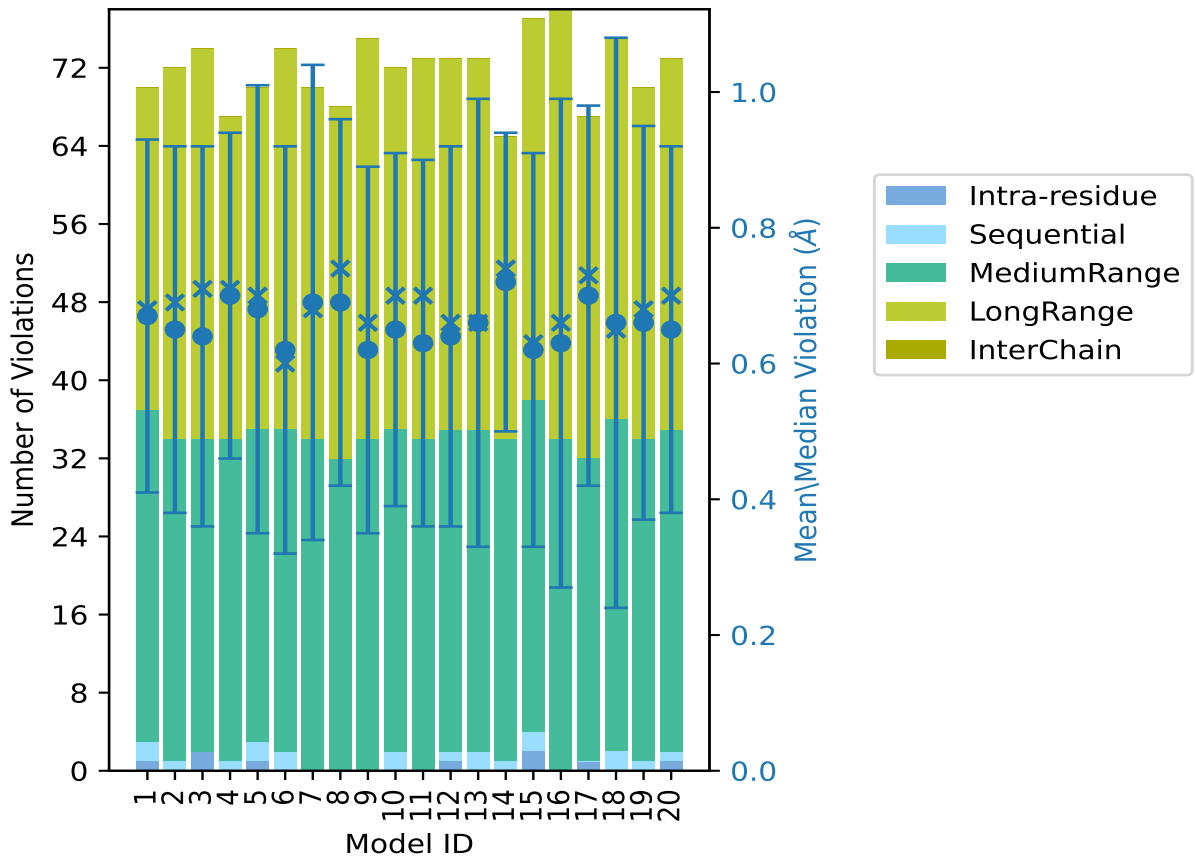
Continued on next page...

Continued from previous page...

Model ID	Number of violations						Mean (Å)	Max (Å)	SD[6] (Å)	Median (Å)
	IR[1]	SQ[2]	MR[3]	LR[4]	IC[5]	Total				
12	1	1	33	38	0	73	0.64	1.55	0.28	0.66
13	0	2	33	38	0	73	0.66	1.99	0.33	0.66
14	0	1	33	31	0	65	0.72	1.18	0.22	0.74
15	2	2	34	39	0	77	0.62	1.38	0.29	0.63
16	0	0	34	44	0	78	0.63	2.1	0.36	0.66
17	1	0	31	35	0	67	0.7	1.81	0.28	0.73
18	0	2	34	39	0	75	0.66	3.15	0.42	0.65
19	0	1	33	36	0	70	0.66	1.79	0.29	0.68
20	1	1	33	38	0	73	0.65	1.23	0.27	0.7

[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

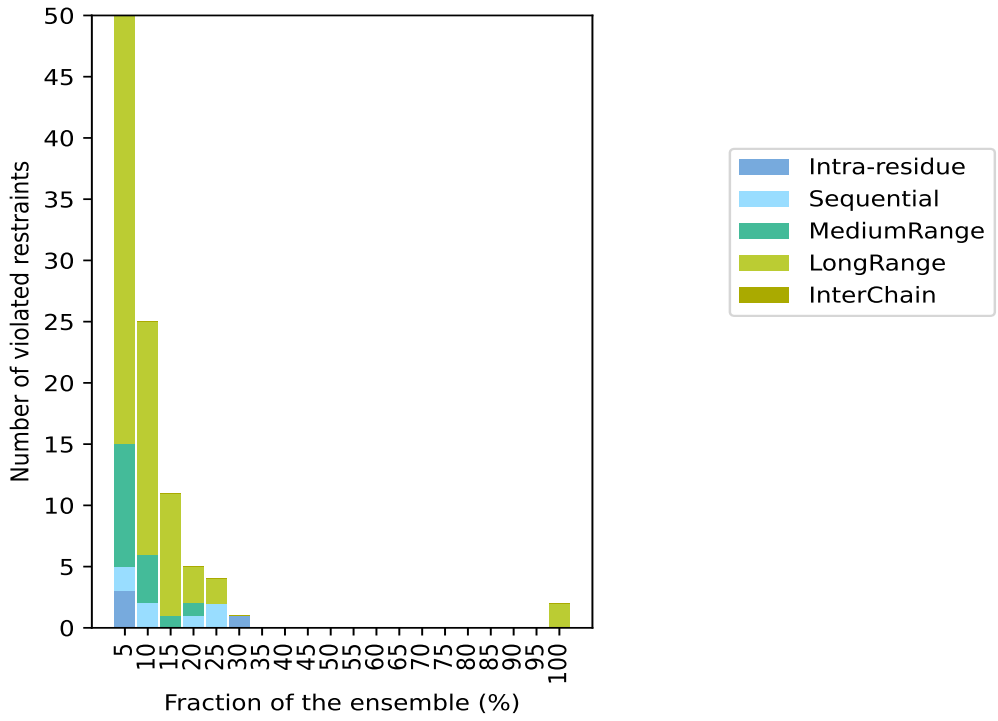
9.3 Distance violation statistics for the ensemble (i)

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, 3421(IR:477, SQ:996, MR:558, LR:1390, 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]	%
3	2	10	35	0	50	1	5.0
0	2	4	19	0	25	2	10.0
0	0	1	10	0	11	3	15.0
0	1	1	3	0	5	4	20.0
0	2	0	2	0	4	5	25.0
1	0	0	0	0	1	6	30.0
0	0	0	0	0	0	7	35.0
0	0	0	0	0	0	8	40.0
0	0	0	0	0	0	9	45.0
0	0	0	0	0	0	10	50.0
0	0	0	0	0	0	11	55.0
0	0	0	0	0	0	12	60.0
0	0	0	0	0	0	13	65.0
0	0	0	0	0	0	14	70.0
0	0	0	0	0	0	15	75.0
0	0	0	0	0	0	16	80.0
0	0	0	0	0	0	17	85.0
0	0	0	0	0	0	18	90.0
0	0	0	0	0	0	19	95.0
0	0	0	2	0	2	20	100.0

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

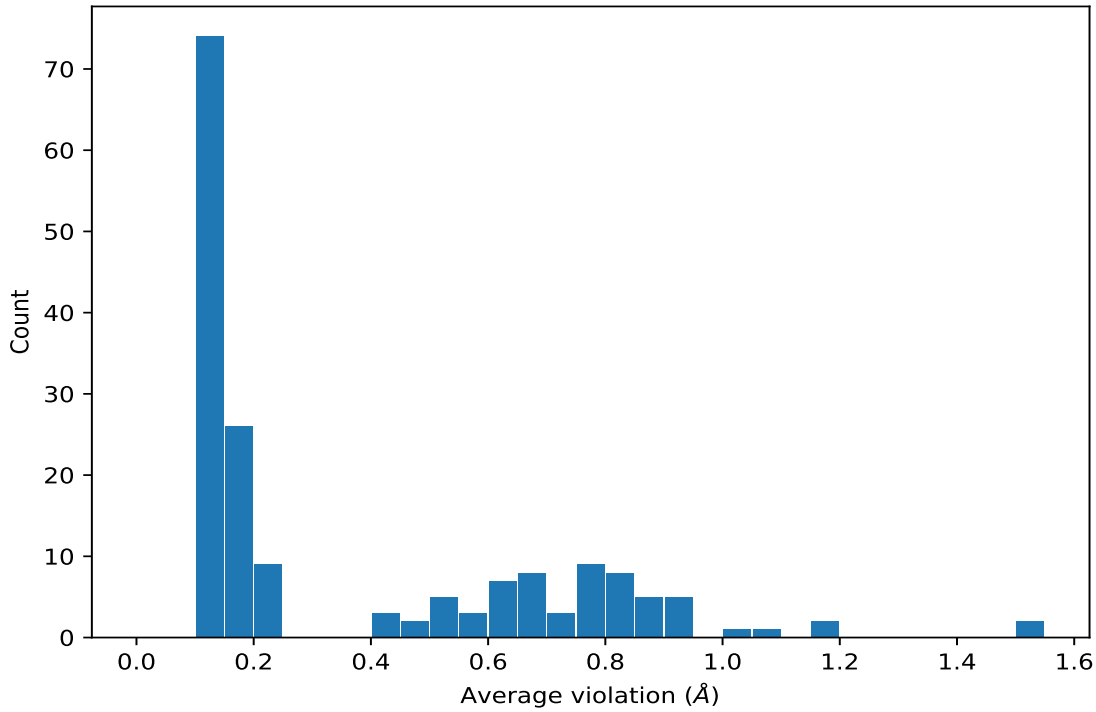
9.3.1 Bar graph : Distance violation statistics for the ensemble (i)



9.4 Most violated distance restraints in the ensemble (i)

9.4.1 Histogram : Distribution of mean distance violations (i)

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



9.4.2 Table: Most violated distance restraints (i)

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

Key	Atom-1	Atom-2	Models[1]	Mean (Å)	SD[1] (Å)	Median (Å)
(1,634)	1:A:397:PHE:HD1	1:A:472:LYS:HD2	20	1.5	0.44	1.39
(1,634)	1:A:397:PHE:HD1	1:A:472:LYS:HD3	20	1.5	0.44	1.39
(1,635)	1:A:397:PHE:HD1	1:A:472:LYS:HE2	20	1.2	0.6	1.0
(1,635)	1:A:397:PHE:HD1	1:A:472:LYS:HE3	20	1.2	0.6	1.0
(3,144)	1:A:431:ARG:N	1:A:427:TYR:O	20	1.08	0.22	1.11
(3,173)	1:A:553:LEU:N	1:A:549:LYS:O	20	1.0	0.02	1.0
(3,164)	1:A:514:PHE:N	1:A:510:THR:O	20	0.94	0.03	0.95
(3,180)	1:A:560:ASN:N	1:A:556:LEU:O	20	0.94	0.1	0.98
(3,166)	1:A:516:GLU:N	1:A:512:GLU:O	20	0.94	0.02	0.94
(3,136)	1:A:397:PHE:N	1:A:393:CYS:O	20	0.93	0.04	0.94
(3,162)	1:A:578:CYS:N	1:A:501:HIS:O	20	0.93	0.05	0.94
(3,167)	1:A:517:ILE:N	1:A:513:ASN:O	20	0.89	0.03	0.9
(3,168)	1:A:518:CYS:N	1:A:514:PHE:O	20	0.89	0.09	0.92
(3,161)	1:A:576:LYS:N	1:A:503:PHE:O	20	0.87	0.1	0.91
(3,145)	1:A:432:ALA:N	1:A:428:ALA:O	20	0.87	0.04	0.86
(3,175)	1:A:555:THR:N	1:A:551:ASP:O	20	0.86	0.13	0.94

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models[1]	Mean (Å)	SD[1] (Å)	Median (Å)
(3,169)	1:A:519:ASP:N	1:A:515:PHE:O	20	0.85	0.03	0.86
(3,174)	1:A:554:GLU:N	1:A:550:SER:O	20	0.84	0.1	0.88
(3,170)	1:A:520:GLU:N	1:A:517:ILE:O	20	0.83	0.04	0.84
(3,178)	1:A:558:PHE:N	1:A:554:GLU:O	20	0.83	0.08	0.84
(3,165)	1:A:515:PHE:N	1:A:511:GLU:O	20	0.82	0.03	0.82
(3,149)	1:A:436:LEU:N	1:A:432:ALA:O	20	0.82	0.08	0.85
(3,127)	1:A:410:LYS:N	1:A:420:MET:O	20	0.81	0.11	0.82
(3,171)	1:A:521:LEU:N	1:A:517:ILE:O	20	0.8	0.04	0.8
(3,163)	1:A:580:SER:N	1:A:499:VAL:O	20	0.78	0.2	0.85
(3,155)	1:A:528:SER:N	1:A:545:GLU:O	20	0.77	0.05	0.8
(3,138)	1:A:399:VAL:N	1:A:395:ARG:O	20	0.77	0.08	0.77
(3,143)	1:A:430:ASP:N	1:A:426:GLY:O	20	0.77	0.13	0.77
(3,177)	1:A:557:GLY:N	1:A:553:LEU:O	20	0.76	0.12	0.73
(3,142)	1:A:404:GLY:N	1:A:401:CYS:O	20	0.76	0.08	0.72
(3,176)	1:A:556:LEU:N	1:A:552:ALA:O	20	0.75	0.14	0.76
(3,139)	1:A:400:PHE:N	1:A:396:VAL:O	20	0.75	0.14	0.78
(3,137)	1:A:398:ASN:N	1:A:394:ASP:O	20	0.75	0.11	0.78
(3,151)	1:A:501:HIS:N	1:A:578:CYS:O	20	0.74	0.11	0.76
(3,148)	1:A:435:HIS:N	1:A:431:ARG:O	20	0.72	0.09	0.77
(3,134)	1:A:472:LYS:N	1:A:409:VAL:O	20	0.72	0.03	0.71
(3,159)	1:A:545:GLU:N	1:A:528:SER:O	20	0.7	0.06	0.69
(3,128)	1:A:411:PHE:N	1:A:470:SER:O	20	0.69	0.09	0.68
(3,156)	1:A:530:LYS:N	1:A:543:LEU:O	20	0.68	0.11	0.68
(3,154)	1:A:527:THR:N	1:A:545:GLU:O	20	0.67	0.09	0.66
(3,140)	1:A:401:CYS:N	1:A:397:PHE:O	20	0.67	0.15	0.69
(3,153)	1:A:505:ALA:N	1:A:540:SER:O	20	0.67	0.09	0.66
(3,158)	1:A:542:GLY:N	1:A:502:PHE:O	20	0.66	0.06	0.67
(3,132)	1:A:422:GLU:N	1:A:408:LYS:O	20	0.65	0.08	0.64
(3,130)	1:A:420:MET:N	1:A:410:LYS:O	20	0.64	0.08	0.63
(3,121)	1:A:381:LEU:N	1:A:421:VAL:O	20	0.63	0.1	0.61
(3,172)	1:A:552:ALA:N	1:A:548:SER:O	20	0.63	0.08	0.62
(3,147)	1:A:434:THR:N	1:A:430:ASP:O	20	0.62	0.14	0.59
(3,150)	1:A:500:LEU:N	1:A:544:LEU:O	20	0.62	0.11	0.57
(3,131)	1:A:421:VAL:N	1:A:381:LEU:O	20	0.61	0.1	0.59
(3,160)	1:A:543:LEU:N	1:A:530:LYS:O	20	0.61	0.12	0.56
(3,141)	1:A:403:TYR:N	1:A:401:CYS:O	20	0.6	0.04	0.6
(3,129)	1:A:419:ALA:N	1:A:383:VAL:O	20	0.57	0.05	0.56
(3,133)	1:A:423:MET:N	1:A:379:PRO:O	20	0.56	0.13	0.55
(3,157)	1:A:544:LEU:N	1:A:500:LEU:O	20	0.53	0.08	0.5
(3,146)	1:A:433:ILE:N	1:A:429:VAL:O	20	0.53	0.09	0.5
(3,123)	1:A:383:VAL:N	1:A:419:ALA:O	20	0.52	0.05	0.52
(3,152)	1:A:502:PHE:N	1:A:542:GLY:O	20	0.52	0.07	0.52

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models[1]	Mean (Å)	SD[1] (Å)	Median (Å)
(3,126)	1:A:409:VAL:N	1:A:472:LYS:O	20	0.52	0.03	0.52
(3,124)	1:A:384:TYR:N	1:A:447:ASN:O	20	0.49	0.06	0.46
(3,125)	1:A:385:GLY:N	1:A:417:GLY:O	20	0.47	0.07	0.48
(3,122)	1:A:382:MET:N	1:A:449:CYS:O	20	0.44	0.03	0.44
(3,135)	1:A:474:PHE:N	1:A:407:GLU:O	20	0.44	0.05	0.44
(3,179)	1:A:559:LEU:N	1:A:555:THR:O	20	0.41	0.08	0.42
(3,82)	1:A:553:LEU:H	1:A:549:LYS:O	13	0.12	0.01	0.12
(1,2869)	1:A:530:LYS:HB2	1:A:530:LYS:HE2	6	0.14	0.02	0.13
(1,2869)	1:A:530:LYS:HB2	1:A:530:LYS:HE3	6	0.14	0.02	0.13
(1,2869)	1:A:530:LYS:HB3	1:A:530:LYS:HE2	6	0.14	0.02	0.13
(1,2869)	1:A:530:LYS:HB3	1:A:530:LYS:HE3	6	0.14	0.02	0.13
(1,1899)	1:A:480:ASN:HA	1:A:481:ARG:HG2	5	0.22	0.08	0.22
(1,1899)	1:A:480:ASN:HA	1:A:481:ARG:HG3	5	0.22	0.08	0.22
(1,682)	1:A:399:VAL:HG21	1:A:440:PHE:HD1	5	0.16	0.03	0.17
(1,682)	1:A:399:VAL:HG21	1:A:440:PHE:HD2	5	0.16	0.03	0.17
(1,682)	1:A:399:VAL:HG22	1:A:440:PHE:HD1	5	0.16	0.03	0.17
(1,682)	1:A:399:VAL:HG22	1:A:440:PHE:HD2	5	0.16	0.03	0.17
(1,682)	1:A:399:VAL:HG23	1:A:440:PHE:HD1	5	0.16	0.03	0.17
(1,682)	1:A:399:VAL:HG23	1:A:440:PHE:HD2	5	0.16	0.03	0.17
(2,1)	1:A:373:GLY:H	1:A:374:PRO:HG2	5	0.13	0.03	0.11
(2,1)	1:A:373:GLY:H	1:A:374:PRO:HG3	5	0.13	0.03	0.11
(1,242)	1:A:382:MET:HE1	1:A:413:LYS:HG2	5	0.12	0.01	0.12
(1,242)	1:A:382:MET:HE1	1:A:413:LYS:HG3	5	0.12	0.01	0.12
(1,242)	1:A:382:MET:HE2	1:A:413:LYS:HG2	5	0.12	0.01	0.12
(1,242)	1:A:382:MET:HE2	1:A:413:LYS:HG3	5	0.12	0.01	0.12
(1,242)	1:A:382:MET:HE3	1:A:413:LYS:HG2	5	0.12	0.01	0.12
(1,242)	1:A:382:MET:HE3	1:A:413:LYS:HG3	5	0.12	0.01	0.12
(2,88)	1:A:573:TYR:HD1	1:A:574:THR:HB	4	0.19	0.06	0.18
(2,88)	1:A:573:TYR:HD2	1:A:574:THR:HB	4	0.19	0.06	0.18
(1,2994)	1:A:546:TRP:HD1	1:A:551:ASP:HA	4	0.16	0.02	0.15
(1,2357)	1:A:508:GLU:H	1:A:540:SER:HB2	4	0.15	0.02	0.14
(1,2357)	1:A:508:GLU:H	1:A:540:SER:HB3	4	0.15	0.02	0.14
(2,24)	1:A:387:ASP:HB2	1:A:391:MET:HA	4	0.14	0.02	0.13
(2,24)	1:A:387:ASP:HB3	1:A:391:MET:HA	4	0.14	0.02	0.13
(1,2255)	1:A:504:ASN:H	1:A:541:SER:H	4	0.12	0.01	0.12
(1,641)	1:A:397:PHE:HB2	1:A:406:VAL:HB	3	0.15	0.01	0.16
(1,641)	1:A:397:PHE:HB3	1:A:406:VAL:HB	3	0.15	0.01	0.16
(1,2157)	1:A:500:LEU:HD11	1:A:580:SER:H	3	0.15	0.02	0.15
(1,2157)	1:A:500:LEU:HD12	1:A:580:SER:H	3	0.15	0.02	0.15
(1,2157)	1:A:500:LEU:HD13	1:A:580:SER:H	3	0.15	0.02	0.15
(2,80)	1:A:527:THR:HB	1:A:546:TRP:HD1	3	0.14	0.02	0.15
(1,18)	1:A:375:HIS:HA	1:A:430:ASP:HB2	3	0.14	0.02	0.13

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models[1]	Mean (Å)	SD[1] (Å)	Median (Å)
(1,18)	1:A:375:HIS:HA	1:A:430:ASP:HB3	3	0.14	0.02	0.13
(2,56)	1:A:455:ALA:HA	1:A:457:MET:HG2	3	0.13	0.0	0.13
(2,56)	1:A:455:ALA:HA	1:A:457:MET:HG3	3	0.13	0.0	0.13
(1,2240)	1:A:503:PHE:HD1	1:A:541:SER:H	3	0.12	0.01	0.12
(1,2240)	1:A:503:PHE:HD2	1:A:541:SER:H	3	0.12	0.01	0.12
(1,3211)	1:A:563:GLN:HA	1:A:574:THR:HB	3	0.12	0.01	0.11
(1,1047)	1:A:411:PHE:H	1:A:472:LYS:H	3	0.12	0.0	0.12
(2,35)	1:A:407:GLU:HB2	1:A:474:PHE:HE1	3	0.12	0.0	0.12
(2,35)	1:A:407:GLU:HB2	1:A:474:PHE:HE2	3	0.12	0.0	0.12
(2,35)	1:A:407:GLU:HB3	1:A:474:PHE:HE1	3	0.12	0.0	0.12
(2,35)	1:A:407:GLU:HB3	1:A:474:PHE:HE2	3	0.12	0.0	0.12
(1,2249)	1:A:503:PHE:HE1	1:A:542:GLY:HA2	3	0.11	0.0	0.11
(1,2249)	1:A:503:PHE:HE1	1:A:542:GLY:HA3	3	0.11	0.0	0.11
(1,2249)	1:A:503:PHE:HE2	1:A:542:GLY:HA2	3	0.11	0.0	0.11
(1,2249)	1:A:503:PHE:HE2	1:A:542:GLY:HA3	3	0.11	0.0	0.11
(1,2799)	1:A:527:THR:HG21	1:A:545:GLU:H	3	0.11	0.0	0.11
(1,2799)	1:A:527:THR:HG22	1:A:545:GLU:H	3	0.11	0.0	0.11
(1,2799)	1:A:527:THR:HG23	1:A:545:GLU:H	3	0.11	0.0	0.11
(1,1310)	1:A:431:ARG:H	1:A:433:ILE:HG21	2	0.24	0.03	0.24
(1,1310)	1:A:431:ARG:H	1:A:433:ILE:HG22	2	0.24	0.03	0.24
(1,1310)	1:A:431:ARG:H	1:A:433:ILE:HG23	2	0.24	0.03	0.24
(1,2146)	1:A:500:LEU:HG	1:A:546:TRP:H	2	0.23	0.01	0.23
(1,3185)	1:A:562:TYR:H	1:A:563:GLN:HG2	2	0.23	0.01	0.23
(1,3185)	1:A:562:TYR:H	1:A:563:GLN:HG3	2	0.23	0.01	0.23
(1,2148)	1:A:500:LEU:HG	1:A:546:TRP:HZ2	2	0.22	0.1	0.22
(1,1090)	1:A:412:MET:HE1	1:A:419:ALA:HB1	2	0.18	0.07	0.18
(1,1090)	1:A:412:MET:HE1	1:A:419:ALA:HB2	2	0.18	0.07	0.18
(1,1090)	1:A:412:MET:HE1	1:A:419:ALA:HB3	2	0.18	0.07	0.18
(1,1090)	1:A:412:MET:HE2	1:A:419:ALA:HB1	2	0.18	0.07	0.18
(1,1090)	1:A:412:MET:HE2	1:A:419:ALA:HB2	2	0.18	0.07	0.18
(1,1090)	1:A:412:MET:HE2	1:A:419:ALA:HB3	2	0.18	0.07	0.18
(1,1090)	1:A:412:MET:HE3	1:A:419:ALA:HB1	2	0.18	0.07	0.18
(1,1090)	1:A:412:MET:HE3	1:A:419:ALA:HB2	2	0.18	0.07	0.18
(1,1090)	1:A:412:MET:HE3	1:A:419:ALA:HB3	2	0.18	0.07	0.18
(1,2019)	1:A:489:ALA:H	1:A:491:ASN:HB2	2	0.18	0.03	0.18
(1,2019)	1:A:489:ALA:H	1:A:491:ASN:HB3	2	0.18	0.03	0.18
(1,1086)	1:A:412:MET:HE1	1:A:413:LYS:HB2	2	0.16	0.02	0.16
(1,1086)	1:A:412:MET:HE1	1:A:413:LYS:HB3	2	0.16	0.02	0.16
(1,1086)	1:A:412:MET:HE2	1:A:413:LYS:HB2	2	0.16	0.02	0.16
(1,1086)	1:A:412:MET:HE2	1:A:413:LYS:HB3	2	0.16	0.02	0.16
(1,1086)	1:A:412:MET:HE3	1:A:413:LYS:HB2	2	0.16	0.02	0.16
(1,1086)	1:A:412:MET:HE3	1:A:413:LYS:HB3	2	0.16	0.02	0.16

Continued on next page...

Continued from previous page...

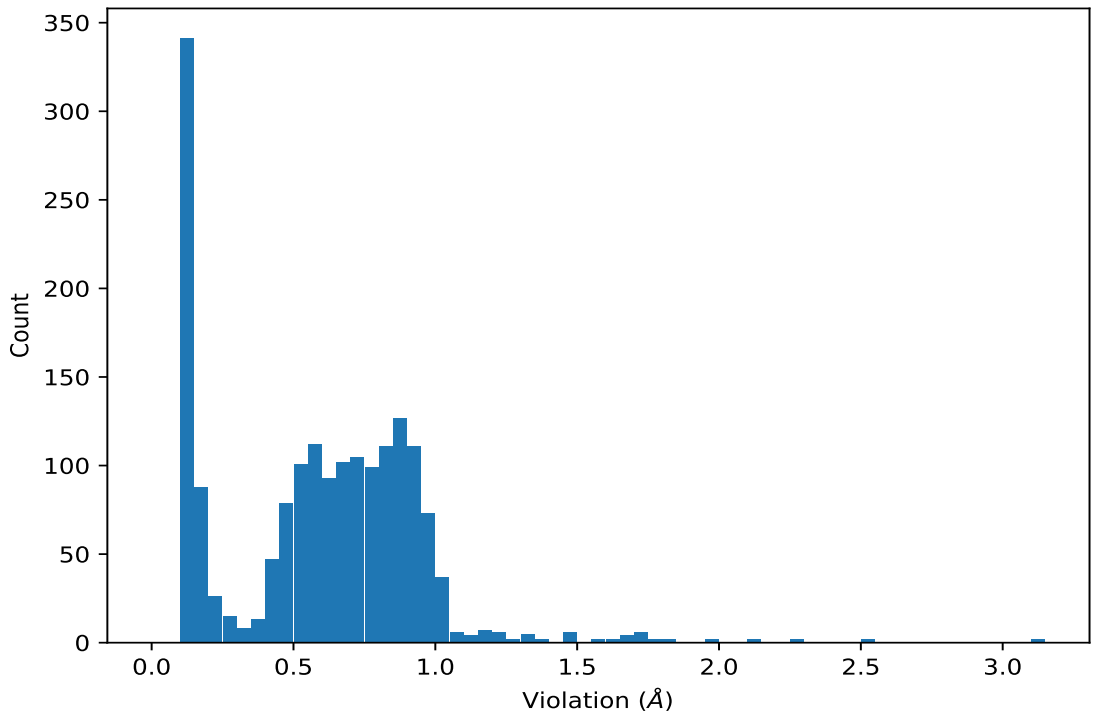
Key	Atom-1	Atom-2	Models[1]	Mean (Å)	SD[1] (Å)	Median (Å)
(2,73)	1:A:505:ALA:HA	1:A:575:LEU:H	2	0.15	0.01	0.15
(1,368)	1:A:386:LEU:HG	1:A:419:ALA:H	2	0.15	0.02	0.15
(1,1726)	1:A:464:LEU:H	1:A:470:SER:HB2	2	0.15	0.02	0.15
(1,1726)	1:A:464:LEU:H	1:A:470:SER:HB3	2	0.15	0.02	0.15
(1,3122)	1:A:556:LEU:HA	1:A:559:LEU:HG	2	0.14	0.02	0.14
(1,457)	1:A:389:SER:HA	1:A:465:GLU:HB2	2	0.14	0.02	0.14
(1,457)	1:A:389:SER:HA	1:A:465:GLU:HB3	2	0.14	0.02	0.14
(1,668)	1:A:399:VAL:HB	1:A:556:LEU:HD11	2	0.14	0.02	0.14
(1,668)	1:A:399:VAL:HB	1:A:556:LEU:HD12	2	0.14	0.02	0.14
(1,668)	1:A:399:VAL:HB	1:A:556:LEU:HD13	2	0.14	0.02	0.14
(1,1298)	1:A:430:ASP:HA	1:A:433:ILE:HD11	2	0.14	0.01	0.14
(1,1298)	1:A:430:ASP:HA	1:A:433:ILE:HD12	2	0.14	0.01	0.14
(1,1298)	1:A:430:ASP:HA	1:A:433:ILE:HD13	2	0.14	0.01	0.14
(1,2358)	1:A:508:GLU:H	1:A:564:MET:HE1	2	0.12	0.02	0.12
(1,2358)	1:A:508:GLU:H	1:A:564:MET:HE2	2	0.12	0.02	0.12
(1,2358)	1:A:508:GLU:H	1:A:564:MET:HE3	2	0.12	0.02	0.12
(1,3019)	1:A:547:ASP:HA	1:A:552:ALA:H	2	0.12	0.01	0.12
(1,243)	1:A:382:MET:HE1	1:A:418:ALA:HA	2	0.12	0.01	0.12
(1,243)	1:A:382:MET:HE2	1:A:418:ALA:HA	2	0.12	0.01	0.12
(1,243)	1:A:382:MET:HE3	1:A:418:ALA:HA	2	0.12	0.01	0.12
(1,1725)	1:A:464:LEU:H	1:A:470:SER:HA	2	0.12	0.01	0.12
(1,2231)	1:A:503:PHE:HB3	1:A:542:GLY:H	2	0.12	0.01	0.12
(1,2684)	1:A:521:LEU:HB2	1:A:559:LEU:H	2	0.12	0.01	0.12
(1,2684)	1:A:521:LEU:HB3	1:A:559:LEU:H	2	0.12	0.01	0.12
(1,2731)	1:A:524:LYS:H	1:A:551:ASP:HA	2	0.12	0.01	0.12
(2,69)	1:A:499:VAL:HB	1:A:583:GLN:H	2	0.12	0.0	0.12
(1,598)	1:A:396:VAL:HB	1:A:411:PHE:HZ	2	0.11	0.0	0.11
(1,1937)	1:A:483:SER:H	1:A:488:ALA:HA	2	0.11	0.0	0.11
(1,2542)	1:A:514:PHE:HE1	1:A:531:VAL:HB	2	0.11	0.0	0.11
(1,2542)	1:A:514:PHE:HE2	1:A:531:VAL:HB	2	0.11	0.0	0.11
(3,21)	1:A:403:TYR:H	1:A:401:CYS:O	2	0.11	0.0	0.11

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

9.5 All violated distance restraints (i)

9.5.1 Histogram : Distribution of distance violations (i)

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



9.5.2 Table : All distance violations (i)

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

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,635)	1:A:397:PHE:HD1	1:A:472:LYS:HE2	18	3.15
(1,635)	1:A:397:PHE:HD1	1:A:472:LYS:HE3	18	3.15
(1,634)	1:A:397:PHE:HD1	1:A:472:LYS:HD2	7	2.5
(1,634)	1:A:397:PHE:HD1	1:A:472:LYS:HD3	7	2.5
(1,634)	1:A:397:PHE:HD1	1:A:472:LYS:HD2	5	2.28
(1,634)	1:A:397:PHE:HD1	1:A:472:LYS:HD3	5	2.28
(1,634)	1:A:397:PHE:HD1	1:A:472:LYS:HD2	16	2.1
(1,634)	1:A:397:PHE:HD1	1:A:472:LYS:HD3	16	2.1
(1,634)	1:A:397:PHE:HD1	1:A:472:LYS:HD2	13	1.99
(1,634)	1:A:397:PHE:HD1	1:A:472:LYS:HD3	13	1.99
(1,634)	1:A:397:PHE:HD1	1:A:472:LYS:HD2	17	1.81
(1,634)	1:A:397:PHE:HD1	1:A:472:LYS:HD3	17	1.81
(1,634)	1:A:397:PHE:HD1	1:A:472:LYS:HD2	19	1.79
(1,634)	1:A:397:PHE:HD1	1:A:472:LYS:HD3	19	1.79
(1,635)	1:A:397:PHE:HD1	1:A:472:LYS:HE2	13	1.73
(1,635)	1:A:397:PHE:HD1	1:A:472:LYS:HE3	13	1.73

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,635)	1:A:397:PHE:HD1	1:A:472:LYS:HE2	5	1.72
(1,635)	1:A:397:PHE:HD1	1:A:472:LYS:HE3	5	1.72
(1,635)	1:A:397:PHE:HD1	1:A:472:LYS:HE2	16	1.7
(1,635)	1:A:397:PHE:HD1	1:A:472:LYS:HE3	16	1.7
(1,634)	1:A:397:PHE:HD1	1:A:472:LYS:HD2	8	1.68
(1,634)	1:A:397:PHE:HD1	1:A:472:LYS:HD3	8	1.68
(1,635)	1:A:397:PHE:HD1	1:A:472:LYS:HE2	6	1.67
(1,635)	1:A:397:PHE:HD1	1:A:472:LYS:HE3	6	1.67
(1,635)	1:A:397:PHE:HD1	1:A:472:LYS:HE2	7	1.61
(1,635)	1:A:397:PHE:HD1	1:A:472:LYS:HE3	7	1.61
(1,634)	1:A:397:PHE:HD1	1:A:472:LYS:HD2	12	1.55
(1,634)	1:A:397:PHE:HD1	1:A:472:LYS:HD3	12	1.55
(1,635)	1:A:397:PHE:HD1	1:A:472:LYS:HE2	17	1.49
(1,635)	1:A:397:PHE:HD1	1:A:472:LYS:HE3	17	1.49
(1,634)	1:A:397:PHE:HD1	1:A:472:LYS:HD2	18	1.49
(1,634)	1:A:397:PHE:HD1	1:A:472:LYS:HD3	18	1.49
(1,634)	1:A:397:PHE:HD1	1:A:472:LYS:HD2	1	1.47
(1,634)	1:A:397:PHE:HD1	1:A:472:LYS:HD3	1	1.47
(3,144)	1:A:431:ARG:N	1:A:427:TYR:O	4	1.38
(3,144)	1:A:431:ARG:N	1:A:427:TYR:O	15	1.38
(3,144)	1:A:431:ARG:N	1:A:427:TYR:O	18	1.34
(3,144)	1:A:431:ARG:N	1:A:427:TYR:O	6	1.31
(1,634)	1:A:397:PHE:HD1	1:A:472:LYS:HD2	3	1.31
(1,634)	1:A:397:PHE:HD1	1:A:472:LYS:HD3	3	1.31
(3,144)	1:A:431:ARG:N	1:A:427:TYR:O	16	1.3
(1,634)	1:A:397:PHE:HD1	1:A:472:LYS:HD2	4	1.26
(1,634)	1:A:397:PHE:HD1	1:A:472:LYS:HD3	4	1.26
(1,634)	1:A:397:PHE:HD1	1:A:472:LYS:HD2	2	1.24
(1,634)	1:A:397:PHE:HD1	1:A:472:LYS:HD3	2	1.24
(3,144)	1:A:431:ARG:N	1:A:427:TYR:O	20	1.23
(3,144)	1:A:431:ARG:N	1:A:427:TYR:O	13	1.21
(1,635)	1:A:397:PHE:HD1	1:A:472:LYS:HE2	19	1.21
(1,635)	1:A:397:PHE:HD1	1:A:472:LYS:HE3	19	1.21
(3,144)	1:A:431:ARG:N	1:A:427:TYR:O	2	1.19
(1,635)	1:A:397:PHE:HD1	1:A:472:LYS:HE2	8	1.18
(1,635)	1:A:397:PHE:HD1	1:A:472:LYS:HE3	8	1.18
(1,634)	1:A:397:PHE:HD1	1:A:472:LYS:HD2	9	1.18
(1,634)	1:A:397:PHE:HD1	1:A:472:LYS:HD3	9	1.18
(1,634)	1:A:397:PHE:HD1	1:A:472:LYS:HD2	14	1.18
(1,634)	1:A:397:PHE:HD1	1:A:472:LYS:HD3	14	1.18
(3,144)	1:A:431:ARG:N	1:A:427:TYR:O	19	1.14
(1,634)	1:A:397:PHE:HD1	1:A:472:LYS:HD2	11	1.14

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,634)	1:A:397:PHE:HD1	1:A:472:LYS:HD3	11	1.14
(3,144)	1:A:431:ARG:N	1:A:427:TYR:O	1	1.13
(3,144)	1:A:431:ARG:N	1:A:427:TYR:O	3	1.09
(3,144)	1:A:431:ARG:N	1:A:427:TYR:O	12	1.09
(1,634)	1:A:397:PHE:HD1	1:A:472:LYS:HD2	10	1.06
(1,634)	1:A:397:PHE:HD1	1:A:472:LYS:HD3	10	1.06
(3,180)	1:A:560:ASN:N	1:A:556:LEU:O	18	1.05
(3,180)	1:A:560:ASN:N	1:A:556:LEU:O	19	1.05
(3,173)	1:A:553:LEU:N	1:A:549:LYS:O	2	1.03
(3,173)	1:A:553:LEU:N	1:A:549:LYS:O	10	1.03
(3,173)	1:A:553:LEU:N	1:A:549:LYS:O	16	1.03
(3,163)	1:A:580:SER:N	1:A:499:VAL:O	11	1.03
(3,163)	1:A:580:SER:N	1:A:499:VAL:O	17	1.03
(3,144)	1:A:431:ARG:N	1:A:427:TYR:O	14	1.03
(3,180)	1:A:560:ASN:N	1:A:556:LEU:O	6	1.02
(3,180)	1:A:560:ASN:N	1:A:556:LEU:O	20	1.02
(3,173)	1:A:553:LEU:N	1:A:549:LYS:O	6	1.02
(3,173)	1:A:553:LEU:N	1:A:549:LYS:O	7	1.02
(3,173)	1:A:553:LEU:N	1:A:549:LYS:O	9	1.02
(1,634)	1:A:397:PHE:HD1	1:A:472:LYS:HD2	6	1.02
(1,634)	1:A:397:PHE:HD1	1:A:472:LYS:HD3	6	1.02
(3,180)	1:A:560:ASN:N	1:A:556:LEU:O	5	1.01
(3,180)	1:A:560:ASN:N	1:A:556:LEU:O	9	1.01
(3,180)	1:A:560:ASN:N	1:A:556:LEU:O	17	1.01
(3,175)	1:A:555:THR:N	1:A:551:ASP:O	3	1.01
(3,173)	1:A:553:LEU:N	1:A:549:LYS:O	8	1.01
(3,173)	1:A:553:LEU:N	1:A:549:LYS:O	15	1.01
(3,173)	1:A:553:LEU:N	1:A:549:LYS:O	19	1.01
(3,163)	1:A:580:SER:N	1:A:499:VAL:O	3	1.01
(3,163)	1:A:580:SER:N	1:A:499:VAL:O	15	1.01
(1,635)	1:A:397:PHE:HD1	1:A:472:LYS:HE2	3	1.01
(1,635)	1:A:397:PHE:HD1	1:A:472:LYS:HE3	3	1.01
(1,634)	1:A:397:PHE:HD1	1:A:472:LYS:HD2	20	1.01
(1,634)	1:A:397:PHE:HD1	1:A:472:LYS:HD3	20	1.01
(3,176)	1:A:556:LEU:N	1:A:552:ALA:O	2	1.0
(3,176)	1:A:556:LEU:N	1:A:552:ALA:O	8	1.0
(3,173)	1:A:553:LEU:N	1:A:549:LYS:O	3	1.0
(3,173)	1:A:553:LEU:N	1:A:549:LYS:O	5	1.0
(3,173)	1:A:553:LEU:N	1:A:549:LYS:O	12	1.0
(3,173)	1:A:553:LEU:N	1:A:549:LYS:O	13	1.0
(3,168)	1:A:518:CYS:N	1:A:514:PHE:O	4	1.0
(3,163)	1:A:580:SER:N	1:A:499:VAL:O	20	1.0

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,162)	1:A:578:CYS:N	1:A:501:HIS:O	10	1.0
(3,161)	1:A:576:LYS:N	1:A:503:PHE:O	13	1.0
(3,133)	1:A:423:MET:N	1:A:379:PRO:O	10	1.0
(3,180)	1:A:560:ASN:N	1:A:556:LEU:O	10	0.99
(3,180)	1:A:560:ASN:N	1:A:556:LEU:O	15	0.99
(3,173)	1:A:553:LEU:N	1:A:549:LYS:O	11	0.99
(3,173)	1:A:553:LEU:N	1:A:549:LYS:O	18	0.99
(3,173)	1:A:553:LEU:N	1:A:549:LYS:O	20	0.99
(3,164)	1:A:514:PHE:N	1:A:510:THR:O	16	0.99
(3,162)	1:A:578:CYS:N	1:A:501:HIS:O	8	0.99
(3,162)	1:A:578:CYS:N	1:A:501:HIS:O	13	0.99
(3,161)	1:A:576:LYS:N	1:A:503:PHE:O	18	0.99
(3,136)	1:A:397:PHE:N	1:A:393:CYS:O	4	0.99
(3,136)	1:A:397:PHE:N	1:A:393:CYS:O	7	0.99
(1,635)	1:A:397:PHE:HD1	1:A:472:LYS:HE2	12	0.99
(1,635)	1:A:397:PHE:HD1	1:A:472:LYS:HE3	12	0.99
(3,180)	1:A:560:ASN:N	1:A:556:LEU:O	14	0.98
(3,177)	1:A:557:GLY:N	1:A:553:LEU:O	15	0.98
(3,173)	1:A:553:LEU:N	1:A:549:LYS:O	4	0.98
(3,173)	1:A:553:LEU:N	1:A:549:LYS:O	14	0.98
(3,164)	1:A:514:PHE:N	1:A:510:THR:O	6	0.98
(3,162)	1:A:578:CYS:N	1:A:501:HIS:O	18	0.98
(3,161)	1:A:576:LYS:N	1:A:503:PHE:O	6	0.98
(3,145)	1:A:432:ALA:N	1:A:428:ALA:O	1	0.98
(3,127)	1:A:410:LYS:N	1:A:420:MET:O	15	0.98
(3,180)	1:A:560:ASN:N	1:A:556:LEU:O	11	0.97
(3,178)	1:A:558:PHE:N	1:A:554:GLU:O	20	0.97
(3,173)	1:A:553:LEU:N	1:A:549:LYS:O	17	0.97
(3,166)	1:A:516:GLU:N	1:A:512:GLU:O	17	0.97
(3,166)	1:A:516:GLU:N	1:A:512:GLU:O	19	0.97
(3,164)	1:A:514:PHE:N	1:A:510:THR:O	8	0.97
(3,164)	1:A:514:PHE:N	1:A:510:THR:O	18	0.97
(3,162)	1:A:578:CYS:N	1:A:501:HIS:O	4	0.97
(3,162)	1:A:578:CYS:N	1:A:501:HIS:O	9	0.97
(3,162)	1:A:578:CYS:N	1:A:501:HIS:O	16	0.97
(3,162)	1:A:578:CYS:N	1:A:501:HIS:O	17	0.97
(3,145)	1:A:432:ALA:N	1:A:428:ALA:O	15	0.97
(3,136)	1:A:397:PHE:N	1:A:393:CYS:O	9	0.97
(3,180)	1:A:560:ASN:N	1:A:556:LEU:O	1	0.96
(3,180)	1:A:560:ASN:N	1:A:556:LEU:O	12	0.96
(3,175)	1:A:555:THR:N	1:A:551:ASP:O	4	0.96
(3,175)	1:A:555:THR:N	1:A:551:ASP:O	5	0.96

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,166)	1:A:516:GLU:N	1:A:512:GLU:O	14	0.96
(3,166)	1:A:516:GLU:N	1:A:512:GLU:O	15	0.96
(3,164)	1:A:514:PHE:N	1:A:510:THR:O	2	0.96
(3,164)	1:A:514:PHE:N	1:A:510:THR:O	4	0.96
(3,164)	1:A:514:PHE:N	1:A:510:THR:O	5	0.96
(3,164)	1:A:514:PHE:N	1:A:510:THR:O	13	0.96
(3,164)	1:A:514:PHE:N	1:A:510:THR:O	20	0.96
(3,162)	1:A:578:CYS:N	1:A:501:HIS:O	12	0.96
(3,136)	1:A:397:PHE:N	1:A:393:CYS:O	2	0.96
(3,136)	1:A:397:PHE:N	1:A:393:CYS:O	11	0.96
(3,136)	1:A:397:PHE:N	1:A:393:CYS:O	18	0.96
(3,175)	1:A:555:THR:N	1:A:551:ASP:O	1	0.95
(3,175)	1:A:555:THR:N	1:A:551:ASP:O	9	0.95
(3,175)	1:A:555:THR:N	1:A:551:ASP:O	11	0.95
(3,175)	1:A:555:THR:N	1:A:551:ASP:O	15	0.95
(3,173)	1:A:553:LEU:N	1:A:549:LYS:O	1	0.95
(3,168)	1:A:518:CYS:N	1:A:514:PHE:O	5	0.95
(3,168)	1:A:518:CYS:N	1:A:514:PHE:O	7	0.95
(3,168)	1:A:518:CYS:N	1:A:514:PHE:O	8	0.95
(3,168)	1:A:518:CYS:N	1:A:514:PHE:O	14	0.95
(3,166)	1:A:516:GLU:N	1:A:512:GLU:O	3	0.95
(3,166)	1:A:516:GLU:N	1:A:512:GLU:O	7	0.95
(3,166)	1:A:516:GLU:N	1:A:512:GLU:O	9	0.95
(3,164)	1:A:514:PHE:N	1:A:510:THR:O	3	0.95
(3,164)	1:A:514:PHE:N	1:A:510:THR:O	7	0.95
(3,164)	1:A:514:PHE:N	1:A:510:THR:O	17	0.95
(3,163)	1:A:580:SER:N	1:A:499:VAL:O	14	0.95
(3,162)	1:A:578:CYS:N	1:A:501:HIS:O	14	0.95
(3,143)	1:A:430:ASP:N	1:A:426:GLY:O	7	0.95
(3,143)	1:A:430:ASP:N	1:A:426:GLY:O	11	0.95
(3,136)	1:A:397:PHE:N	1:A:393:CYS:O	3	0.95
(3,136)	1:A:397:PHE:N	1:A:393:CYS:O	6	0.95
(3,136)	1:A:397:PHE:N	1:A:393:CYS:O	8	0.95
(3,127)	1:A:410:LYS:N	1:A:420:MET:O	12	0.95
(3,180)	1:A:560:ASN:N	1:A:556:LEU:O	16	0.94
(3,177)	1:A:557:GLY:N	1:A:553:LEU:O	20	0.94
(3,175)	1:A:555:THR:N	1:A:551:ASP:O	7	0.94
(3,175)	1:A:555:THR:N	1:A:551:ASP:O	13	0.94
(3,175)	1:A:555:THR:N	1:A:551:ASP:O	14	0.94
(3,168)	1:A:518:CYS:N	1:A:514:PHE:O	2	0.94
(3,168)	1:A:518:CYS:N	1:A:514:PHE:O	13	0.94
(3,168)	1:A:518:CYS:N	1:A:514:PHE:O	15	0.94

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,166)	1:A:516:GLU:N	1:A:512:GLU:O	10	0.94
(3,166)	1:A:516:GLU:N	1:A:512:GLU:O	11	0.94
(3,166)	1:A:516:GLU:N	1:A:512:GLU:O	12	0.94
(3,166)	1:A:516:GLU:N	1:A:512:GLU:O	13	0.94
(3,166)	1:A:516:GLU:N	1:A:512:GLU:O	16	0.94
(3,164)	1:A:514:PHE:N	1:A:510:THR:O	14	0.94
(3,164)	1:A:514:PHE:N	1:A:510:THR:O	15	0.94
(3,164)	1:A:514:PHE:N	1:A:510:THR:O	19	0.94
(3,162)	1:A:578:CYS:N	1:A:501:HIS:O	5	0.94
(3,162)	1:A:578:CYS:N	1:A:501:HIS:O	19	0.94
(3,161)	1:A:576:LYS:N	1:A:503:PHE:O	11	0.94
(3,136)	1:A:397:PHE:N	1:A:393:CYS:O	5	0.94
(3,136)	1:A:397:PHE:N	1:A:393:CYS:O	14	0.94
(1,635)	1:A:397:PHE:HD1	1:A:472:LYS:HE2	1	0.94
(1,635)	1:A:397:PHE:HD1	1:A:472:LYS:HE3	1	0.94
(1,635)	1:A:397:PHE:HD1	1:A:472:LYS:HE2	4	0.94
(1,635)	1:A:397:PHE:HD1	1:A:472:LYS:HE3	4	0.94
(3,180)	1:A:560:ASN:N	1:A:556:LEU:O	3	0.93
(3,178)	1:A:558:PHE:N	1:A:554:GLU:O	3	0.93
(3,175)	1:A:555:THR:N	1:A:551:ASP:O	2	0.93
(3,175)	1:A:555:THR:N	1:A:551:ASP:O	17	0.93
(3,174)	1:A:554:GLU:N	1:A:550:SER:O	11	0.93
(3,168)	1:A:518:CYS:N	1:A:514:PHE:O	12	0.93
(3,168)	1:A:518:CYS:N	1:A:514:PHE:O	20	0.93
(3,167)	1:A:517:ILE:N	1:A:513:ASN:O	4	0.93
(3,167)	1:A:517:ILE:N	1:A:513:ASN:O	18	0.93
(3,166)	1:A:516:GLU:N	1:A:512:GLU:O	4	0.93
(3,166)	1:A:516:GLU:N	1:A:512:GLU:O	8	0.93
(3,166)	1:A:516:GLU:N	1:A:512:GLU:O	18	0.93
(3,162)	1:A:578:CYS:N	1:A:501:HIS:O	6	0.93
(3,161)	1:A:576:LYS:N	1:A:503:PHE:O	1	0.93
(3,161)	1:A:576:LYS:N	1:A:503:PHE:O	14	0.93
(3,161)	1:A:576:LYS:N	1:A:503:PHE:O	20	0.93
(3,139)	1:A:400:PHE:N	1:A:396:VAL:O	8	0.93
(3,136)	1:A:397:PHE:N	1:A:393:CYS:O	16	0.93
(3,131)	1:A:421:VAL:N	1:A:381:LEU:O	16	0.93
(3,127)	1:A:410:LYS:N	1:A:420:MET:O	8	0.93
(3,127)	1:A:410:LYS:N	1:A:420:MET:O	20	0.93
(1,634)	1:A:397:PHE:HD1	1:A:472:LYS:HD2	15	0.93
(1,634)	1:A:397:PHE:HD1	1:A:472:LYS:HD3	15	0.93
(3,175)	1:A:555:THR:N	1:A:551:ASP:O	10	0.92
(3,169)	1:A:519:ASP:N	1:A:515:PHE:O	8	0.92

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,168)	1:A:518:CYS:N	1:A:514:PHE:O	3	0.92
(3,168)	1:A:518:CYS:N	1:A:514:PHE:O	18	0.92
(3,167)	1:A:517:ILE:N	1:A:513:ASN:O	7	0.92
(3,167)	1:A:517:ILE:N	1:A:513:ASN:O	13	0.92
(3,167)	1:A:517:ILE:N	1:A:513:ASN:O	14	0.92
(3,167)	1:A:517:ILE:N	1:A:513:ASN:O	20	0.92
(3,166)	1:A:516:GLU:N	1:A:512:GLU:O	1	0.92
(3,166)	1:A:516:GLU:N	1:A:512:GLU:O	2	0.92
(3,161)	1:A:576:LYS:N	1:A:503:PHE:O	2	0.92
(3,161)	1:A:576:LYS:N	1:A:503:PHE:O	7	0.92
(3,161)	1:A:576:LYS:N	1:A:503:PHE:O	16	0.92
(3,151)	1:A:501:HIS:N	1:A:578:CYS:O	18	0.92
(3,144)	1:A:431:ARG:N	1:A:427:TYR:O	7	0.92
(3,143)	1:A:430:ASP:N	1:A:426:GLY:O	2	0.92
(3,143)	1:A:430:ASP:N	1:A:426:GLY:O	12	0.92
(3,139)	1:A:400:PHE:N	1:A:396:VAL:O	16	0.92
(3,136)	1:A:397:PHE:N	1:A:393:CYS:O	12	0.92
(3,136)	1:A:397:PHE:N	1:A:393:CYS:O	15	0.92
(3,127)	1:A:410:LYS:N	1:A:420:MET:O	2	0.92
(1,635)	1:A:397:PHE:HD1	1:A:472:LYS:HE2	14	0.92
(1,635)	1:A:397:PHE:HD1	1:A:472:LYS:HE3	14	0.92
(3,178)	1:A:558:PHE:N	1:A:554:GLU:O	2	0.91
(3,178)	1:A:558:PHE:N	1:A:554:GLU:O	8	0.91
(3,177)	1:A:557:GLY:N	1:A:553:LEU:O	7	0.91
(3,174)	1:A:554:GLU:N	1:A:550:SER:O	14	0.91
(3,168)	1:A:518:CYS:N	1:A:514:PHE:O	9	0.91
(3,167)	1:A:517:ILE:N	1:A:513:ASN:O	6	0.91
(3,166)	1:A:516:GLU:N	1:A:512:GLU:O	20	0.91
(3,164)	1:A:514:PHE:N	1:A:510:THR:O	1	0.91
(3,164)	1:A:514:PHE:N	1:A:510:THR:O	9	0.91
(3,164)	1:A:514:PHE:N	1:A:510:THR:O	11	0.91
(3,145)	1:A:432:ALA:N	1:A:428:ALA:O	9	0.91
(3,145)	1:A:432:ALA:N	1:A:428:ALA:O	11	0.91
(3,143)	1:A:430:ASP:N	1:A:426:GLY:O	9	0.91
(3,139)	1:A:400:PHE:N	1:A:396:VAL:O	6	0.91
(3,139)	1:A:400:PHE:N	1:A:396:VAL:O	17	0.91
(3,138)	1:A:399:VAL:N	1:A:395:ARG:O	14	0.91
(3,136)	1:A:397:PHE:N	1:A:393:CYS:O	20	0.91
(3,127)	1:A:410:LYS:N	1:A:420:MET:O	10	0.91
(3,177)	1:A:557:GLY:N	1:A:553:LEU:O	1	0.9
(3,174)	1:A:554:GLU:N	1:A:550:SER:O	17	0.9
(3,169)	1:A:519:ASP:N	1:A:515:PHE:O	10	0.9

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,169)	1:A:519:ASP:N	1:A:515:PHE:O	13	0.9
(3,167)	1:A:517:ILE:N	1:A:513:ASN:O	2	0.9
(3,167)	1:A:517:ILE:N	1:A:513:ASN:O	5	0.9
(3,167)	1:A:517:ILE:N	1:A:513:ASN:O	12	0.9
(3,167)	1:A:517:ILE:N	1:A:513:ASN:O	19	0.9
(3,166)	1:A:516:GLU:N	1:A:512:GLU:O	5	0.9
(3,166)	1:A:516:GLU:N	1:A:512:GLU:O	6	0.9
(3,164)	1:A:514:PHE:N	1:A:510:THR:O	12	0.9
(3,162)	1:A:578:CYS:N	1:A:501:HIS:O	15	0.9
(3,161)	1:A:576:LYS:N	1:A:503:PHE:O	4	0.9
(3,161)	1:A:576:LYS:N	1:A:503:PHE:O	8	0.9
(3,156)	1:A:530:LYS:N	1:A:543:LEU:O	13	0.9
(3,147)	1:A:434:THR:N	1:A:430:ASP:O	8	0.9
(3,145)	1:A:432:ALA:N	1:A:428:ALA:O	19	0.9
(3,140)	1:A:401:CYS:N	1:A:397:PHE:O	2	0.9
(3,139)	1:A:400:PHE:N	1:A:396:VAL:O	10	0.9
(3,139)	1:A:400:PHE:N	1:A:396:VAL:O	19	0.9
(3,136)	1:A:397:PHE:N	1:A:393:CYS:O	10	0.9
(3,121)	1:A:381:LEU:N	1:A:421:VAL:O	16	0.9
(3,178)	1:A:558:PHE:N	1:A:554:GLU:O	1	0.89
(3,177)	1:A:557:GLY:N	1:A:553:LEU:O	14	0.89
(3,176)	1:A:556:LEU:N	1:A:552:ALA:O	14	0.89
(3,174)	1:A:554:GLU:N	1:A:550:SER:O	2	0.89
(3,174)	1:A:554:GLU:N	1:A:550:SER:O	5	0.89
(3,174)	1:A:554:GLU:N	1:A:550:SER:O	6	0.89
(3,174)	1:A:554:GLU:N	1:A:550:SER:O	10	0.89
(3,174)	1:A:554:GLU:N	1:A:550:SER:O	15	0.89
(3,172)	1:A:552:ALA:N	1:A:548:SER:O	9	0.89
(3,171)	1:A:521:LEU:N	1:A:517:ILE:O	10	0.89
(3,169)	1:A:519:ASP:N	1:A:515:PHE:O	6	0.89
(3,168)	1:A:518:CYS:N	1:A:514:PHE:O	16	0.89
(3,168)	1:A:518:CYS:N	1:A:514:PHE:O	17	0.89
(3,167)	1:A:517:ILE:N	1:A:513:ASN:O	8	0.89
(3,164)	1:A:514:PHE:N	1:A:510:THR:O	10	0.89
(3,163)	1:A:580:SER:N	1:A:499:VAL:O	7	0.89
(3,151)	1:A:501:HIS:N	1:A:578:CYS:O	14	0.89
(3,145)	1:A:432:ALA:N	1:A:428:ALA:O	10	0.89
(3,145)	1:A:432:ALA:N	1:A:428:ALA:O	12	0.89
(3,145)	1:A:432:ALA:N	1:A:428:ALA:O	16	0.89
(3,142)	1:A:404:GLY:N	1:A:401:CYS:O	5	0.89
(3,138)	1:A:399:VAL:N	1:A:395:ARG:O	6	0.89
(3,136)	1:A:397:PHE:N	1:A:393:CYS:O	1	0.89

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,136)	1:A:397:PHE:N	1:A:393:CYS:O	17	0.89
(3,127)	1:A:410:LYS:N	1:A:420:MET:O	11	0.89
(3,174)	1:A:554:GLU:N	1:A:550:SER:O	1	0.88
(3,174)	1:A:554:GLU:N	1:A:550:SER:O	4	0.88
(3,174)	1:A:554:GLU:N	1:A:550:SER:O	9	0.88
(3,169)	1:A:519:ASP:N	1:A:515:PHE:O	5	0.88
(3,168)	1:A:518:CYS:N	1:A:514:PHE:O	6	0.88
(3,167)	1:A:517:ILE:N	1:A:513:ASN:O	1	0.88
(3,167)	1:A:517:ILE:N	1:A:513:ASN:O	3	0.88
(3,167)	1:A:517:ILE:N	1:A:513:ASN:O	9	0.88
(3,167)	1:A:517:ILE:N	1:A:513:ASN:O	11	0.88
(3,167)	1:A:517:ILE:N	1:A:513:ASN:O	15	0.88
(3,162)	1:A:578:CYS:N	1:A:501:HIS:O	7	0.88
(3,156)	1:A:530:LYS:N	1:A:543:LEU:O	4	0.88
(3,150)	1:A:500:LEU:N	1:A:544:LEU:O	16	0.88
(3,149)	1:A:436:LEU:N	1:A:432:ALA:O	4	0.88
(3,142)	1:A:404:GLY:N	1:A:401:CYS:O	7	0.88
(3,137)	1:A:398:ASN:N	1:A:394:ASP:O	11	0.88
(3,137)	1:A:398:ASN:N	1:A:394:ASP:O	17	0.88
(3,136)	1:A:397:PHE:N	1:A:393:CYS:O	19	0.88
(3,178)	1:A:558:PHE:N	1:A:554:GLU:O	10	0.87
(3,178)	1:A:558:PHE:N	1:A:554:GLU:O	15	0.87
(3,176)	1:A:556:LEU:N	1:A:552:ALA:O	18	0.87
(3,174)	1:A:554:GLU:N	1:A:550:SER:O	19	0.87
(3,165)	1:A:515:PHE:N	1:A:511:GLU:O	10	0.87
(3,165)	1:A:515:PHE:N	1:A:511:GLU:O	11	0.87
(3,165)	1:A:515:PHE:N	1:A:511:GLU:O	12	0.87
(3,163)	1:A:580:SER:N	1:A:499:VAL:O	1	0.87
(3,163)	1:A:580:SER:N	1:A:499:VAL:O	8	0.87
(3,162)	1:A:578:CYS:N	1:A:501:HIS:O	11	0.87
(3,162)	1:A:578:CYS:N	1:A:501:HIS:O	20	0.87
(3,161)	1:A:576:LYS:N	1:A:503:PHE:O	15	0.87
(3,151)	1:A:501:HIS:N	1:A:578:CYS:O	8	0.87
(3,149)	1:A:436:LEU:N	1:A:432:ALA:O	6	0.87
(3,149)	1:A:436:LEU:N	1:A:432:ALA:O	17	0.87
(3,149)	1:A:436:LEU:N	1:A:432:ALA:O	20	0.87
(3,147)	1:A:434:THR:N	1:A:430:ASP:O	14	0.87
(3,145)	1:A:432:ALA:N	1:A:428:ALA:O	6	0.87
(3,145)	1:A:432:ALA:N	1:A:428:ALA:O	17	0.87
(3,140)	1:A:401:CYS:N	1:A:397:PHE:O	1	0.87
(3,128)	1:A:411:PHE:N	1:A:470:SER:O	14	0.87
(3,180)	1:A:560:ASN:N	1:A:556:LEU:O	13	0.86

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,176)	1:A:556:LEU:N	1:A:552:ALA:O	1	0.86
(3,174)	1:A:554:GLU:N	1:A:550:SER:O	8	0.86
(3,170)	1:A:520:GLU:N	1:A:517:ILE:O	20	0.86
(3,169)	1:A:519:ASP:N	1:A:515:PHE:O	3	0.86
(3,169)	1:A:519:ASP:N	1:A:515:PHE:O	4	0.86
(3,169)	1:A:519:ASP:N	1:A:515:PHE:O	11	0.86
(3,169)	1:A:519:ASP:N	1:A:515:PHE:O	15	0.86
(3,169)	1:A:519:ASP:N	1:A:515:PHE:O	16	0.86
(3,169)	1:A:519:ASP:N	1:A:515:PHE:O	17	0.86
(3,165)	1:A:515:PHE:N	1:A:511:GLU:O	17	0.86
(3,162)	1:A:578:CYS:N	1:A:501:HIS:O	3	0.86
(3,153)	1:A:505:ALA:N	1:A:540:SER:O	10	0.86
(3,149)	1:A:436:LEU:N	1:A:432:ALA:O	7	0.86
(3,149)	1:A:436:LEU:N	1:A:432:ALA:O	9	0.86
(3,149)	1:A:436:LEU:N	1:A:432:ALA:O	13	0.86
(3,149)	1:A:436:LEU:N	1:A:432:ALA:O	16	0.86
(3,149)	1:A:436:LEU:N	1:A:432:ALA:O	18	0.86
(3,145)	1:A:432:ALA:N	1:A:428:ALA:O	3	0.86
(3,145)	1:A:432:ALA:N	1:A:428:ALA:O	13	0.86
(3,138)	1:A:399:VAL:N	1:A:395:ARG:O	20	0.86
(3,136)	1:A:397:PHE:N	1:A:393:CYS:O	13	0.86
(3,178)	1:A:558:PHE:N	1:A:554:GLU:O	5	0.85
(3,178)	1:A:558:PHE:N	1:A:554:GLU:O	9	0.85
(3,178)	1:A:558:PHE:N	1:A:554:GLU:O	13	0.85
(3,176)	1:A:556:LEU:N	1:A:552:ALA:O	4	0.85
(3,176)	1:A:556:LEU:N	1:A:552:ALA:O	7	0.85
(3,174)	1:A:554:GLU:N	1:A:550:SER:O	7	0.85
(3,174)	1:A:554:GLU:N	1:A:550:SER:O	16	0.85
(3,174)	1:A:554:GLU:N	1:A:550:SER:O	18	0.85
(3,171)	1:A:521:LEU:N	1:A:517:ILE:O	20	0.85
(3,170)	1:A:520:GLU:N	1:A:517:ILE:O	1	0.85
(3,170)	1:A:520:GLU:N	1:A:517:ILE:O	4	0.85
(3,170)	1:A:520:GLU:N	1:A:517:ILE:O	5	0.85
(3,170)	1:A:520:GLU:N	1:A:517:ILE:O	8	0.85
(3,170)	1:A:520:GLU:N	1:A:517:ILE:O	11	0.85
(3,169)	1:A:519:ASP:N	1:A:515:PHE:O	7	0.85
(3,169)	1:A:519:ASP:N	1:A:515:PHE:O	12	0.85
(3,165)	1:A:515:PHE:N	1:A:511:GLU:O	4	0.85
(3,165)	1:A:515:PHE:N	1:A:511:GLU:O	9	0.85
(3,163)	1:A:580:SER:N	1:A:499:VAL:O	5	0.85
(3,163)	1:A:580:SER:N	1:A:499:VAL:O	19	0.85
(3,162)	1:A:578:CYS:N	1:A:501:HIS:O	1	0.85

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,162)	1:A:578:CYS:N	1:A:501:HIS:O	2	0.85
(3,161)	1:A:576:LYS:N	1:A:503:PHE:O	19	0.85
(3,160)	1:A:543:LEU:N	1:A:530:LYS:O	4	0.85
(3,151)	1:A:501:HIS:N	1:A:578:CYS:O	10	0.85
(3,151)	1:A:501:HIS:N	1:A:578:CYS:O	19	0.85
(3,149)	1:A:436:LEU:N	1:A:432:ALA:O	2	0.85
(3,149)	1:A:436:LEU:N	1:A:432:ALA:O	12	0.85
(3,147)	1:A:434:THR:N	1:A:430:ASP:O	5	0.85
(3,145)	1:A:432:ALA:N	1:A:428:ALA:O	2	0.85
(3,145)	1:A:432:ALA:N	1:A:428:ALA:O	4	0.85
(3,145)	1:A:432:ALA:N	1:A:428:ALA:O	14	0.85
(3,144)	1:A:431:ARG:N	1:A:427:TYR:O	9	0.85
(3,144)	1:A:431:ARG:N	1:A:427:TYR:O	10	0.85
(3,143)	1:A:430:ASP:N	1:A:426:GLY:O	20	0.85
(3,142)	1:A:404:GLY:N	1:A:401:CYS:O	4	0.85
(3,142)	1:A:404:GLY:N	1:A:401:CYS:O	18	0.85
(3,137)	1:A:398:ASN:N	1:A:394:ASP:O	19	0.85
(3,132)	1:A:422:GLU:N	1:A:408:LYS:O	10	0.85
(3,128)	1:A:411:PHE:N	1:A:470:SER:O	8	0.85
(3,127)	1:A:410:LYS:N	1:A:420:MET:O	17	0.85
(3,178)	1:A:558:PHE:N	1:A:554:GLU:O	4	0.84
(3,177)	1:A:557:GLY:N	1:A:553:LEU:O	17	0.84
(3,171)	1:A:521:LEU:N	1:A:517:ILE:O	17	0.84
(3,170)	1:A:520:GLU:N	1:A:517:ILE:O	3	0.84
(3,170)	1:A:520:GLU:N	1:A:517:ILE:O	9	0.84
(3,170)	1:A:520:GLU:N	1:A:517:ILE:O	13	0.84
(3,170)	1:A:520:GLU:N	1:A:517:ILE:O	16	0.84
(3,170)	1:A:520:GLU:N	1:A:517:ILE:O	17	0.84
(3,170)	1:A:520:GLU:N	1:A:517:ILE:O	18	0.84
(3,170)	1:A:520:GLU:N	1:A:517:ILE:O	19	0.84
(3,169)	1:A:519:ASP:N	1:A:515:PHE:O	14	0.84
(3,169)	1:A:519:ASP:N	1:A:515:PHE:O	18	0.84
(3,168)	1:A:518:CYS:N	1:A:514:PHE:O	1	0.84
(3,167)	1:A:517:ILE:N	1:A:513:ASN:O	16	0.84
(3,165)	1:A:515:PHE:N	1:A:511:GLU:O	7	0.84
(3,161)	1:A:576:LYS:N	1:A:503:PHE:O	9	0.84
(3,160)	1:A:543:LEU:N	1:A:530:LYS:O	6	0.84
(3,149)	1:A:436:LEU:N	1:A:432:ALA:O	3	0.84
(3,149)	1:A:436:LEU:N	1:A:432:ALA:O	5	0.84
(3,149)	1:A:436:LEU:N	1:A:432:ALA:O	10	0.84
(3,149)	1:A:436:LEU:N	1:A:432:ALA:O	14	0.84
(3,149)	1:A:436:LEU:N	1:A:432:ALA:O	19	0.84

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,145)	1:A:432:ALA:N	1:A:428:ALA:O	7	0.84
(3,145)	1:A:432:ALA:N	1:A:428:ALA:O	18	0.84
(3,143)	1:A:430:ASP:N	1:A:426:GLY:O	10	0.84
(3,140)	1:A:401:CYS:N	1:A:397:PHE:O	16	0.84
(3,138)	1:A:399:VAL:N	1:A:395:ARG:O	12	0.84
(3,137)	1:A:398:ASN:N	1:A:394:ASP:O	9	0.84
(3,178)	1:A:558:PHE:N	1:A:554:GLU:O	7	0.83
(3,177)	1:A:557:GLY:N	1:A:553:LEU:O	3	0.83
(3,176)	1:A:556:LEU:N	1:A:552:ALA:O	15	0.83
(3,174)	1:A:554:GLU:N	1:A:550:SER:O	3	0.83
(3,170)	1:A:520:GLU:N	1:A:517:ILE:O	2	0.83
(3,170)	1:A:520:GLU:N	1:A:517:ILE:O	12	0.83
(3,170)	1:A:520:GLU:N	1:A:517:ILE:O	14	0.83
(3,170)	1:A:520:GLU:N	1:A:517:ILE:O	15	0.83
(3,169)	1:A:519:ASP:N	1:A:515:PHE:O	2	0.83
(3,165)	1:A:515:PHE:N	1:A:511:GLU:O	15	0.83
(3,165)	1:A:515:PHE:N	1:A:511:GLU:O	20	0.83
(3,159)	1:A:545:GLU:N	1:A:528:SER:O	9	0.83
(3,156)	1:A:530:LYS:N	1:A:543:LEU:O	8	0.83
(3,155)	1:A:528:SER:N	1:A:545:GLU:O	2	0.83
(3,154)	1:A:527:THR:N	1:A:545:GLU:O	13	0.83
(3,151)	1:A:501:HIS:N	1:A:578:CYS:O	15	0.83
(3,145)	1:A:432:ALA:N	1:A:428:ALA:O	5	0.83
(3,145)	1:A:432:ALA:N	1:A:428:ALA:O	8	0.83
(3,143)	1:A:430:ASP:N	1:A:426:GLY:O	17	0.83
(3,142)	1:A:404:GLY:N	1:A:401:CYS:O	20	0.83
(3,137)	1:A:398:ASN:N	1:A:394:ASP:O	20	0.83
(3,180)	1:A:560:ASN:N	1:A:556:LEU:O	8	0.82
(3,176)	1:A:556:LEU:N	1:A:552:ALA:O	16	0.82
(3,171)	1:A:521:LEU:N	1:A:517:ILE:O	18	0.82
(3,171)	1:A:521:LEU:N	1:A:517:ILE:O	19	0.82
(3,170)	1:A:520:GLU:N	1:A:517:ILE:O	7	0.82
(3,170)	1:A:520:GLU:N	1:A:517:ILE:O	10	0.82
(3,169)	1:A:519:ASP:N	1:A:515:PHE:O	19	0.82
(3,167)	1:A:517:ILE:N	1:A:513:ASN:O	10	0.82
(3,165)	1:A:515:PHE:N	1:A:511:GLU:O	3	0.82
(3,165)	1:A:515:PHE:N	1:A:511:GLU:O	8	0.82
(3,165)	1:A:515:PHE:N	1:A:511:GLU:O	19	0.82
(3,155)	1:A:528:SER:N	1:A:545:GLU:O	9	0.82
(3,155)	1:A:528:SER:N	1:A:545:GLU:O	10	0.82
(3,155)	1:A:528:SER:N	1:A:545:GLU:O	13	0.82
(3,153)	1:A:505:ALA:N	1:A:540:SER:O	1	0.82

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,148)	1:A:435:HIS:N	1:A:431:ARG:O	1	0.82
(3,147)	1:A:434:THR:N	1:A:430:ASP:O	20	0.82
(3,142)	1:A:404:GLY:N	1:A:401:CYS:O	3	0.82
(3,142)	1:A:404:GLY:N	1:A:401:CYS:O	12	0.82
(3,140)	1:A:401:CYS:N	1:A:397:PHE:O	13	0.82
(3,139)	1:A:400:PHE:N	1:A:396:VAL:O	13	0.82
(3,139)	1:A:400:PHE:N	1:A:396:VAL:O	20	0.82
(3,137)	1:A:398:ASN:N	1:A:394:ASP:O	15	0.82
(3,128)	1:A:411:PHE:N	1:A:470:SER:O	7	0.82
(3,127)	1:A:410:LYS:N	1:A:420:MET:O	5	0.82
(3,127)	1:A:410:LYS:N	1:A:420:MET:O	14	0.82
(3,171)	1:A:521:LEU:N	1:A:517:ILE:O	5	0.81
(3,171)	1:A:521:LEU:N	1:A:517:ILE:O	8	0.81
(3,171)	1:A:521:LEU:N	1:A:517:ILE:O	16	0.81
(3,169)	1:A:519:ASP:N	1:A:515:PHE:O	9	0.81
(3,167)	1:A:517:ILE:N	1:A:513:ASN:O	17	0.81
(3,165)	1:A:515:PHE:N	1:A:511:GLU:O	1	0.81
(3,155)	1:A:528:SER:N	1:A:545:GLU:O	11	0.81
(3,155)	1:A:528:SER:N	1:A:545:GLU:O	17	0.81
(3,144)	1:A:431:ARG:N	1:A:427:TYR:O	17	0.81
(3,143)	1:A:430:ASP:N	1:A:426:GLY:O	15	0.81
(3,138)	1:A:399:VAL:N	1:A:395:ARG:O	16	0.81
(3,138)	1:A:399:VAL:N	1:A:395:ARG:O	17	0.81
(3,137)	1:A:398:ASN:N	1:A:394:ASP:O	12	0.81
(3,127)	1:A:410:LYS:N	1:A:420:MET:O	18	0.81
(3,177)	1:A:557:GLY:N	1:A:553:LEU:O	16	0.8
(3,171)	1:A:521:LEU:N	1:A:517:ILE:O	1	0.8
(3,171)	1:A:521:LEU:N	1:A:517:ILE:O	9	0.8
(3,169)	1:A:519:ASP:N	1:A:515:PHE:O	20	0.8
(3,165)	1:A:515:PHE:N	1:A:511:GLU:O	2	0.8
(3,165)	1:A:515:PHE:N	1:A:511:GLU:O	5	0.8
(3,165)	1:A:515:PHE:N	1:A:511:GLU:O	14	0.8
(3,161)	1:A:576:LYS:N	1:A:503:PHE:O	5	0.8
(3,157)	1:A:544:LEU:N	1:A:500:LEU:O	16	0.8
(3,155)	1:A:528:SER:N	1:A:545:GLU:O	3	0.8
(3,155)	1:A:528:SER:N	1:A:545:GLU:O	5	0.8
(3,155)	1:A:528:SER:N	1:A:545:GLU:O	18	0.8
(3,155)	1:A:528:SER:N	1:A:545:GLU:O	19	0.8
(3,154)	1:A:527:THR:N	1:A:545:GLU:O	3	0.8
(3,153)	1:A:505:ALA:N	1:A:540:SER:O	2	0.8
(3,151)	1:A:501:HIS:N	1:A:578:CYS:O	13	0.8
(3,145)	1:A:432:ALA:N	1:A:428:ALA:O	20	0.8

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,144)	1:A:431:ARG:N	1:A:427:TYR:O	5	0.8
(3,143)	1:A:430:ASP:N	1:A:426:GLY:O	18	0.8
(3,140)	1:A:401:CYS:N	1:A:397:PHE:O	4	0.8
(3,139)	1:A:400:PHE:N	1:A:396:VAL:O	15	0.8
(3,137)	1:A:398:ASN:N	1:A:394:ASP:O	18	0.8
(3,178)	1:A:558:PHE:N	1:A:554:GLU:O	11	0.79
(3,178)	1:A:558:PHE:N	1:A:554:GLU:O	14	0.79
(3,178)	1:A:558:PHE:N	1:A:554:GLU:O	17	0.79
(3,171)	1:A:521:LEU:N	1:A:517:ILE:O	12	0.79
(3,171)	1:A:521:LEU:N	1:A:517:ILE:O	13	0.79
(3,171)	1:A:521:LEU:N	1:A:517:ILE:O	15	0.79
(3,165)	1:A:515:PHE:N	1:A:511:GLU:O	13	0.79
(3,165)	1:A:515:PHE:N	1:A:511:GLU:O	16	0.79
(3,161)	1:A:576:LYS:N	1:A:503:PHE:O	10	0.79
(3,159)	1:A:545:GLU:N	1:A:528:SER:O	15	0.79
(3,159)	1:A:545:GLU:N	1:A:528:SER:O	20	0.79
(3,155)	1:A:528:SER:N	1:A:545:GLU:O	15	0.79
(3,151)	1:A:501:HIS:N	1:A:578:CYS:O	5	0.79
(3,150)	1:A:500:LEU:N	1:A:544:LEU:O	20	0.79
(3,149)	1:A:436:LEU:N	1:A:432:ALA:O	15	0.79
(3,148)	1:A:435:HIS:N	1:A:431:ARG:O	11	0.79
(3,148)	1:A:435:HIS:N	1:A:431:ARG:O	20	0.79
(3,140)	1:A:401:CYS:N	1:A:397:PHE:O	5	0.79
(3,139)	1:A:400:PHE:N	1:A:396:VAL:O	18	0.79
(3,138)	1:A:399:VAL:N	1:A:395:ARG:O	10	0.79
(3,137)	1:A:398:ASN:N	1:A:394:ASP:O	5	0.79
(3,128)	1:A:411:PHE:N	1:A:470:SER:O	12	0.79
(3,127)	1:A:410:LYS:N	1:A:420:MET:O	7	0.79
(3,175)	1:A:555:THR:N	1:A:551:ASP:O	19	0.78
(3,175)	1:A:555:THR:N	1:A:551:ASP:O	20	0.78
(3,171)	1:A:521:LEU:N	1:A:517:ILE:O	14	0.78
(3,169)	1:A:519:ASP:N	1:A:515:PHE:O	1	0.78
(3,156)	1:A:530:LYS:N	1:A:543:LEU:O	18	0.78
(3,155)	1:A:528:SER:N	1:A:545:GLU:O	14	0.78
(3,153)	1:A:505:ALA:N	1:A:540:SER:O	9	0.78
(3,151)	1:A:501:HIS:N	1:A:578:CYS:O	3	0.78
(3,151)	1:A:501:HIS:N	1:A:578:CYS:O	17	0.78
(3,148)	1:A:435:HIS:N	1:A:431:ARG:O	3	0.78
(3,148)	1:A:435:HIS:N	1:A:431:ARG:O	10	0.78
(3,148)	1:A:435:HIS:N	1:A:431:ARG:O	14	0.78
(3,148)	1:A:435:HIS:N	1:A:431:ARG:O	15	0.78
(3,138)	1:A:399:VAL:N	1:A:395:ARG:O	4	0.78

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,138)	1:A:399:VAL:N	1:A:395:ARG:O	7	0.78
(3,137)	1:A:398:ASN:N	1:A:394:ASP:O	1	0.78
(3,137)	1:A:398:ASN:N	1:A:394:ASP:O	13	0.78
(3,134)	1:A:472:LYS:N	1:A:409:VAL:O	6	0.78
(3,171)	1:A:521:LEU:N	1:A:517:ILE:O	2	0.77
(3,171)	1:A:521:LEU:N	1:A:517:ILE:O	3	0.77
(3,171)	1:A:521:LEU:N	1:A:517:ILE:O	7	0.77
(3,165)	1:A:515:PHE:N	1:A:511:GLU:O	6	0.77
(3,165)	1:A:515:PHE:N	1:A:511:GLU:O	18	0.77
(3,160)	1:A:543:LEU:N	1:A:530:LYS:O	2	0.77
(3,158)	1:A:542:GLY:N	1:A:502:PHE:O	4	0.77
(3,155)	1:A:528:SER:N	1:A:545:GLU:O	1	0.77
(3,154)	1:A:527:THR:N	1:A:545:GLU:O	12	0.77
(3,154)	1:A:527:THR:N	1:A:545:GLU:O	17	0.77
(3,150)	1:A:500:LEU:N	1:A:544:LEU:O	8	0.77
(3,148)	1:A:435:HIS:N	1:A:431:ARG:O	2	0.77
(3,148)	1:A:435:HIS:N	1:A:431:ARG:O	8	0.77
(3,148)	1:A:435:HIS:N	1:A:431:ARG:O	12	0.77
(3,148)	1:A:435:HIS:N	1:A:431:ARG:O	18	0.77
(3,142)	1:A:404:GLY:N	1:A:401:CYS:O	13	0.77
(3,140)	1:A:401:CYS:N	1:A:397:PHE:O	3	0.77
(3,140)	1:A:401:CYS:N	1:A:397:PHE:O	9	0.77
(3,138)	1:A:399:VAL:N	1:A:395:ARG:O	5	0.77
(3,138)	1:A:399:VAL:N	1:A:395:ARG:O	9	0.77
(3,138)	1:A:399:VAL:N	1:A:395:ARG:O	11	0.77
(3,138)	1:A:399:VAL:N	1:A:395:ARG:O	18	0.77
(3,137)	1:A:398:ASN:N	1:A:394:ASP:O	8	0.77
(3,132)	1:A:422:GLU:N	1:A:408:LYS:O	15	0.77
(3,130)	1:A:420:MET:N	1:A:410:LYS:O	2	0.77
(3,128)	1:A:411:PHE:N	1:A:470:SER:O	13	0.77
(3,177)	1:A:557:GLY:N	1:A:553:LEU:O	8	0.76
(3,176)	1:A:556:LEU:N	1:A:552:ALA:O	11	0.76
(3,175)	1:A:555:THR:N	1:A:551:ASP:O	6	0.76
(3,175)	1:A:555:THR:N	1:A:551:ASP:O	12	0.76
(3,175)	1:A:555:THR:N	1:A:551:ASP:O	18	0.76
(3,171)	1:A:521:LEU:N	1:A:517:ILE:O	4	0.76
(3,171)	1:A:521:LEU:N	1:A:517:ILE:O	11	0.76
(3,156)	1:A:530:LYS:N	1:A:543:LEU:O	19	0.76
(3,154)	1:A:527:THR:N	1:A:545:GLU:O	10	0.76
(3,153)	1:A:505:ALA:N	1:A:540:SER:O	14	0.76
(3,149)	1:A:436:LEU:N	1:A:432:ALA:O	1	0.76
(3,140)	1:A:401:CYS:N	1:A:397:PHE:O	7	0.76

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,139)	1:A:400:PHE:N	1:A:396:VAL:O	1	0.76
(3,138)	1:A:399:VAL:N	1:A:395:ARG:O	3	0.76
(3,138)	1:A:399:VAL:N	1:A:395:ARG:O	13	0.76
(3,137)	1:A:398:ASN:N	1:A:394:ASP:O	3	0.76
(3,134)	1:A:472:LYS:N	1:A:409:VAL:O	7	0.76
(3,130)	1:A:420:MET:N	1:A:410:LYS:O	11	0.76
(3,127)	1:A:410:LYS:N	1:A:420:MET:O	3	0.76
(3,121)	1:A:381:LEU:N	1:A:421:VAL:O	4	0.76
(3,121)	1:A:381:LEU:N	1:A:421:VAL:O	17	0.76
(3,180)	1:A:560:ASN:N	1:A:556:LEU:O	2	0.75
(3,178)	1:A:558:PHE:N	1:A:554:GLU:O	12	0.75
(3,178)	1:A:558:PHE:N	1:A:554:GLU:O	16	0.75
(3,176)	1:A:556:LEU:N	1:A:552:ALA:O	6	0.75
(3,168)	1:A:518:CYS:N	1:A:514:PHE:O	11	0.75
(3,147)	1:A:434:THR:N	1:A:430:ASP:O	16	0.75
(3,134)	1:A:472:LYS:N	1:A:409:VAL:O	3	0.75
(3,134)	1:A:472:LYS:N	1:A:409:VAL:O	19	0.75
(3,130)	1:A:420:MET:N	1:A:410:LYS:O	8	0.75
(3,130)	1:A:420:MET:N	1:A:410:LYS:O	20	0.75
(3,127)	1:A:410:LYS:N	1:A:420:MET:O	13	0.75
(3,180)	1:A:560:ASN:N	1:A:556:LEU:O	7	0.74
(3,161)	1:A:576:LYS:N	1:A:503:PHE:O	17	0.74
(3,159)	1:A:545:GLU:N	1:A:528:SER:O	8	0.74
(3,159)	1:A:545:GLU:N	1:A:528:SER:O	17	0.74
(3,158)	1:A:542:GLY:N	1:A:502:PHE:O	14	0.74
(3,156)	1:A:530:LYS:N	1:A:543:LEU:O	11	0.74
(3,155)	1:A:528:SER:N	1:A:545:GLU:O	7	0.74
(3,155)	1:A:528:SER:N	1:A:545:GLU:O	8	0.74
(3,155)	1:A:528:SER:N	1:A:545:GLU:O	20	0.74
(3,153)	1:A:505:ALA:N	1:A:540:SER:O	3	0.74
(3,151)	1:A:501:HIS:N	1:A:578:CYS:O	11	0.74
(3,150)	1:A:500:LEU:N	1:A:544:LEU:O	3	0.74
(3,144)	1:A:431:ARG:N	1:A:427:TYR:O	8	0.74
(3,143)	1:A:430:ASP:N	1:A:426:GLY:O	8	0.74
(3,142)	1:A:404:GLY:N	1:A:401:CYS:O	8	0.74
(3,137)	1:A:398:ASN:N	1:A:394:ASP:O	14	0.74
(3,134)	1:A:472:LYS:N	1:A:409:VAL:O	15	0.74
(3,132)	1:A:422:GLU:N	1:A:408:LYS:O	19	0.74
(3,130)	1:A:420:MET:N	1:A:410:LYS:O	12	0.74
(3,121)	1:A:381:LEU:N	1:A:421:VAL:O	18	0.74
(3,180)	1:A:560:ASN:N	1:A:556:LEU:O	4	0.73
(3,177)	1:A:557:GLY:N	1:A:553:LEU:O	2	0.73

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,177)	1:A:557:GLY:N	1:A:553:LEU:O	5	0.73
(3,177)	1:A:557:GLY:N	1:A:553:LEU:O	9	0.73
(3,177)	1:A:557:GLY:N	1:A:553:LEU:O	13	0.73
(3,176)	1:A:556:LEU:N	1:A:552:ALA:O	17	0.73
(3,163)	1:A:580:SER:N	1:A:499:VAL:O	16	0.73
(3,160)	1:A:543:LEU:N	1:A:530:LYS:O	5	0.73
(3,159)	1:A:545:GLU:N	1:A:528:SER:O	10	0.73
(3,159)	1:A:545:GLU:N	1:A:528:SER:O	11	0.73
(3,156)	1:A:530:LYS:N	1:A:543:LEU:O	14	0.73
(3,155)	1:A:528:SER:N	1:A:545:GLU:O	12	0.73
(3,154)	1:A:527:THR:N	1:A:545:GLU:O	11	0.73
(3,148)	1:A:435:HIS:N	1:A:431:ARG:O	4	0.73
(3,142)	1:A:404:GLY:N	1:A:401:CYS:O	9	0.73
(3,139)	1:A:400:PHE:N	1:A:396:VAL:O	3	0.73
(3,139)	1:A:400:PHE:N	1:A:396:VAL:O	4	0.73
(3,134)	1:A:472:LYS:N	1:A:409:VAL:O	2	0.73
(3,134)	1:A:472:LYS:N	1:A:409:VAL:O	17	0.73
(3,128)	1:A:411:PHE:N	1:A:470:SER:O	20	0.73
(3,127)	1:A:410:LYS:N	1:A:420:MET:O	1	0.73
(3,176)	1:A:556:LEU:N	1:A:552:ALA:O	20	0.72
(3,168)	1:A:518:CYS:N	1:A:514:PHE:O	19	0.72
(3,161)	1:A:576:LYS:N	1:A:503:PHE:O	3	0.72
(3,158)	1:A:542:GLY:N	1:A:502:PHE:O	8	0.72
(3,154)	1:A:527:THR:N	1:A:545:GLU:O	16	0.72
(3,148)	1:A:435:HIS:N	1:A:431:ARG:O	5	0.72
(3,148)	1:A:435:HIS:N	1:A:431:ARG:O	19	0.72
(3,144)	1:A:431:ARG:N	1:A:427:TYR:O	11	0.72
(3,143)	1:A:430:ASP:N	1:A:426:GLY:O	16	0.72
(3,142)	1:A:404:GLY:N	1:A:401:CYS:O	1	0.72
(3,142)	1:A:404:GLY:N	1:A:401:CYS:O	10	0.72
(3,142)	1:A:404:GLY:N	1:A:401:CYS:O	11	0.72
(3,142)	1:A:404:GLY:N	1:A:401:CYS:O	14	0.72
(3,142)	1:A:404:GLY:N	1:A:401:CYS:O	17	0.72
(3,137)	1:A:398:ASN:N	1:A:394:ASP:O	2	0.72
(3,137)	1:A:398:ASN:N	1:A:394:ASP:O	10	0.72
(3,134)	1:A:472:LYS:N	1:A:409:VAL:O	13	0.72
(3,131)	1:A:421:VAL:N	1:A:381:LEU:O	3	0.72
(3,128)	1:A:411:PHE:N	1:A:470:SER:O	4	0.72
(3,128)	1:A:411:PHE:N	1:A:470:SER:O	11	0.72
(3,127)	1:A:410:LYS:N	1:A:420:MET:O	4	0.72
(1,635)	1:A:397:PHE:HD1	1:A:472:LYS:HE2	15	0.72
(1,635)	1:A:397:PHE:HD1	1:A:472:LYS:HE3	15	0.72

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,177)	1:A:557:GLY:N	1:A:553:LEU:O	4	0.71
(3,177)	1:A:557:GLY:N	1:A:553:LEU:O	10	0.71
(3,177)	1:A:557:GLY:N	1:A:553:LEU:O	11	0.71
(3,174)	1:A:554:GLU:N	1:A:550:SER:O	12	0.71
(3,172)	1:A:552:ALA:N	1:A:548:SER:O	2	0.71
(3,160)	1:A:543:LEU:N	1:A:530:LYS:O	1	0.71
(3,159)	1:A:545:GLU:N	1:A:528:SER:O	12	0.71
(3,158)	1:A:542:GLY:N	1:A:502:PHE:O	6	0.71
(3,158)	1:A:542:GLY:N	1:A:502:PHE:O	19	0.71
(3,155)	1:A:528:SER:N	1:A:545:GLU:O	4	0.71
(3,146)	1:A:433:ILE:N	1:A:429:VAL:O	7	0.71
(3,143)	1:A:430:ASP:N	1:A:426:GLY:O	13	0.71
(3,143)	1:A:430:ASP:N	1:A:426:GLY:O	19	0.71
(3,138)	1:A:399:VAL:N	1:A:395:ARG:O	8	0.71
(3,134)	1:A:472:LYS:N	1:A:409:VAL:O	1	0.71
(3,134)	1:A:472:LYS:N	1:A:409:VAL:O	5	0.71
(3,134)	1:A:472:LYS:N	1:A:409:VAL:O	8	0.71
(3,134)	1:A:472:LYS:N	1:A:409:VAL:O	10	0.71
(3,134)	1:A:472:LYS:N	1:A:409:VAL:O	11	0.71
(3,134)	1:A:472:LYS:N	1:A:409:VAL:O	12	0.71
(3,130)	1:A:420:MET:N	1:A:410:LYS:O	15	0.71
(3,128)	1:A:411:PHE:N	1:A:470:SER:O	5	0.71
(3,127)	1:A:410:LYS:N	1:A:420:MET:O	9	0.71
(3,121)	1:A:381:LEU:N	1:A:421:VAL:O	10	0.71
(3,178)	1:A:558:PHE:N	1:A:554:GLU:O	6	0.7
(3,178)	1:A:558:PHE:N	1:A:554:GLU:O	19	0.7
(3,172)	1:A:552:ALA:N	1:A:548:SER:O	20	0.7
(3,159)	1:A:545:GLU:N	1:A:528:SER:O	5	0.7
(3,153)	1:A:505:ALA:N	1:A:540:SER:O	4	0.7
(3,150)	1:A:500:LEU:N	1:A:544:LEU:O	13	0.7
(3,146)	1:A:433:ILE:N	1:A:429:VAL:O	2	0.7
(3,142)	1:A:404:GLY:N	1:A:401:CYS:O	2	0.7
(3,140)	1:A:401:CYS:N	1:A:397:PHE:O	11	0.7
(3,134)	1:A:472:LYS:N	1:A:409:VAL:O	4	0.7
(3,134)	1:A:472:LYS:N	1:A:409:VAL:O	18	0.7
(3,132)	1:A:422:GLU:N	1:A:408:LYS:O	3	0.7
(3,132)	1:A:422:GLU:N	1:A:408:LYS:O	17	0.7
(3,132)	1:A:422:GLU:N	1:A:408:LYS:O	20	0.7
(3,131)	1:A:421:VAL:N	1:A:381:LEU:O	4	0.7
(1,635)	1:A:397:PHE:HD1	1:A:472:LYS:HE2	9	0.7
(1,635)	1:A:397:PHE:HD1	1:A:472:LYS:HE3	9	0.7
(3,176)	1:A:556:LEU:N	1:A:552:ALA:O	19	0.69

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,171)	1:A:521:LEU:N	1:A:517:ILE:O	6	0.69
(3,160)	1:A:543:LEU:N	1:A:530:LYS:O	7	0.69
(3,159)	1:A:545:GLU:N	1:A:528:SER:O	1	0.69
(3,159)	1:A:545:GLU:N	1:A:528:SER:O	14	0.69
(3,159)	1:A:545:GLU:N	1:A:528:SER:O	19	0.69
(3,156)	1:A:530:LYS:N	1:A:543:LEU:O	2	0.69
(3,156)	1:A:530:LYS:N	1:A:543:LEU:O	9	0.69
(3,156)	1:A:530:LYS:N	1:A:543:LEU:O	10	0.69
(3,154)	1:A:527:THR:N	1:A:545:GLU:O	2	0.69
(3,153)	1:A:505:ALA:N	1:A:540:SER:O	7	0.69
(3,151)	1:A:501:HIS:N	1:A:578:CYS:O	16	0.69
(3,143)	1:A:430:ASP:N	1:A:426:GLY:O	6	0.69
(3,143)	1:A:430:ASP:N	1:A:426:GLY:O	14	0.69
(3,133)	1:A:423:MET:N	1:A:379:PRO:O	15	0.69
(3,132)	1:A:422:GLU:N	1:A:408:LYS:O	16	0.69
(3,127)	1:A:410:LYS:N	1:A:420:MET:O	16	0.69
(3,177)	1:A:557:GLY:N	1:A:553:LEU:O	12	0.68
(3,159)	1:A:545:GLU:N	1:A:528:SER:O	7	0.68
(3,158)	1:A:542:GLY:N	1:A:502:PHE:O	9	0.68
(3,158)	1:A:542:GLY:N	1:A:502:PHE:O	10	0.68
(3,158)	1:A:542:GLY:N	1:A:502:PHE:O	13	0.68
(3,158)	1:A:542:GLY:N	1:A:502:PHE:O	18	0.68
(3,155)	1:A:528:SER:N	1:A:545:GLU:O	16	0.68
(3,154)	1:A:527:THR:N	1:A:545:GLU:O	15	0.68
(3,151)	1:A:501:HIS:N	1:A:578:CYS:O	4	0.68
(3,150)	1:A:500:LEU:N	1:A:544:LEU:O	19	0.68
(3,148)	1:A:435:HIS:N	1:A:431:ARG:O	17	0.68
(3,142)	1:A:404:GLY:N	1:A:401:CYS:O	16	0.68
(3,140)	1:A:401:CYS:N	1:A:397:PHE:O	6	0.68
(3,139)	1:A:400:PHE:N	1:A:396:VAL:O	11	0.68
(3,138)	1:A:399:VAL:N	1:A:395:ARG:O	1	0.68
(3,138)	1:A:399:VAL:N	1:A:395:ARG:O	15	0.68
(3,134)	1:A:472:LYS:N	1:A:409:VAL:O	9	0.68
(3,134)	1:A:472:LYS:N	1:A:409:VAL:O	14	0.68
(3,133)	1:A:423:MET:N	1:A:379:PRO:O	12	0.68
(3,132)	1:A:422:GLU:N	1:A:408:LYS:O	2	0.68
(3,132)	1:A:422:GLU:N	1:A:408:LYS:O	7	0.68
(3,128)	1:A:411:PHE:N	1:A:470:SER:O	17	0.68
(3,128)	1:A:411:PHE:N	1:A:470:SER:O	18	0.68
(3,121)	1:A:381:LEU:N	1:A:421:VAL:O	8	0.68
(3,178)	1:A:558:PHE:N	1:A:554:GLU:O	18	0.67
(3,172)	1:A:552:ALA:N	1:A:548:SER:O	8	0.67

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,170)	1:A:520:GLU:N	1:A:517:ILE:O	6	0.67
(3,163)	1:A:580:SER:N	1:A:499:VAL:O	12	0.67
(3,158)	1:A:542:GLY:N	1:A:502:PHE:O	2	0.67
(3,158)	1:A:542:GLY:N	1:A:502:PHE:O	11	0.67
(3,158)	1:A:542:GLY:N	1:A:502:PHE:O	17	0.67
(3,156)	1:A:530:LYS:N	1:A:543:LEU:O	3	0.67
(3,154)	1:A:527:THR:N	1:A:545:GLU:O	5	0.67
(3,153)	1:A:505:ALA:N	1:A:540:SER:O	11	0.67
(3,152)	1:A:502:PHE:N	1:A:542:GLY:O	7	0.67
(3,151)	1:A:501:HIS:N	1:A:578:CYS:O	9	0.67
(3,143)	1:A:430:ASP:N	1:A:426:GLY:O	4	0.67
(3,142)	1:A:404:GLY:N	1:A:401:CYS:O	6	0.67
(3,140)	1:A:401:CYS:N	1:A:397:PHE:O	12	0.67
(3,137)	1:A:398:ASN:N	1:A:394:ASP:O	6	0.67
(3,134)	1:A:472:LYS:N	1:A:409:VAL:O	16	0.67
(3,130)	1:A:420:MET:N	1:A:410:LYS:O	4	0.67
(3,127)	1:A:410:LYS:N	1:A:420:MET:O	19	0.67
(3,176)	1:A:556:LEU:N	1:A:552:ALA:O	3	0.66
(3,172)	1:A:552:ALA:N	1:A:548:SER:O	1	0.66
(3,172)	1:A:552:ALA:N	1:A:548:SER:O	3	0.66
(3,160)	1:A:543:LEU:N	1:A:530:LYS:O	13	0.66
(3,159)	1:A:545:GLU:N	1:A:528:SER:O	13	0.66
(3,154)	1:A:527:THR:N	1:A:545:GLU:O	9	0.66
(3,154)	1:A:527:THR:N	1:A:545:GLU:O	18	0.66
(3,153)	1:A:505:ALA:N	1:A:540:SER:O	8	0.66
(3,151)	1:A:501:HIS:N	1:A:578:CYS:O	12	0.66
(3,151)	1:A:501:HIS:N	1:A:578:CYS:O	20	0.66
(3,150)	1:A:500:LEU:N	1:A:544:LEU:O	14	0.66
(3,147)	1:A:434:THR:N	1:A:430:ASP:O	3	0.66
(3,146)	1:A:433:ILE:N	1:A:429:VAL:O	1	0.66
(3,141)	1:A:403:TYR:N	1:A:401:CYS:O	9	0.66
(3,131)	1:A:421:VAL:N	1:A:381:LEU:O	19	0.66
(3,130)	1:A:420:MET:N	1:A:410:LYS:O	17	0.66
(3,121)	1:A:381:LEU:N	1:A:421:VAL:O	2	0.66
(3,121)	1:A:381:LEU:N	1:A:421:VAL:O	19	0.66
(1,635)	1:A:397:PHE:HD1	1:A:472:LYS:HE2	2	0.66
(1,635)	1:A:397:PHE:HD1	1:A:472:LYS:HE3	2	0.66
(3,179)	1:A:559:LEU:N	1:A:555:THR:O	4	0.65
(3,172)	1:A:552:ALA:N	1:A:548:SER:O	4	0.65
(3,172)	1:A:552:ALA:N	1:A:548:SER:O	11	0.65
(3,172)	1:A:552:ALA:N	1:A:548:SER:O	13	0.65
(3,159)	1:A:545:GLU:N	1:A:528:SER:O	2	0.65

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,159)	1:A:545:GLU:N	1:A:528:SER:O	18	0.65
(3,158)	1:A:542:GLY:N	1:A:502:PHE:O	1	0.65
(3,158)	1:A:542:GLY:N	1:A:502:PHE:O	7	0.65
(3,158)	1:A:542:GLY:N	1:A:502:PHE:O	16	0.65
(3,153)	1:A:505:ALA:N	1:A:540:SER:O	12	0.65
(3,150)	1:A:500:LEU:N	1:A:544:LEU:O	18	0.65
(3,149)	1:A:436:LEU:N	1:A:432:ALA:O	8	0.65
(3,142)	1:A:404:GLY:N	1:A:401:CYS:O	19	0.65
(3,141)	1:A:403:TYR:N	1:A:401:CYS:O	5	0.65
(3,134)	1:A:472:LYS:N	1:A:409:VAL:O	20	0.65
(3,131)	1:A:421:VAL:N	1:A:381:LEU:O	18	0.65
(3,130)	1:A:420:MET:N	1:A:410:LYS:O	9	0.65
(3,129)	1:A:419:ALA:N	1:A:383:VAL:O	2	0.65
(3,125)	1:A:385:GLY:N	1:A:417:GLY:O	18	0.65
(3,123)	1:A:383:VAL:N	1:A:419:ALA:O	2	0.65
(1,635)	1:A:397:PHE:HD1	1:A:472:LYS:HE2	10	0.65
(1,635)	1:A:397:PHE:HD1	1:A:472:LYS:HE3	10	0.65
(3,177)	1:A:557:GLY:N	1:A:553:LEU:O	18	0.64
(3,163)	1:A:580:SER:N	1:A:499:VAL:O	10	0.64
(3,159)	1:A:545:GLU:N	1:A:528:SER:O	3	0.64
(3,159)	1:A:545:GLU:N	1:A:528:SER:O	6	0.64
(3,159)	1:A:545:GLU:N	1:A:528:SER:O	16	0.64
(3,158)	1:A:542:GLY:N	1:A:502:PHE:O	3	0.64
(3,156)	1:A:530:LYS:N	1:A:543:LEU:O	7	0.64
(3,155)	1:A:528:SER:N	1:A:545:GLU:O	6	0.64
(3,153)	1:A:505:ALA:N	1:A:540:SER:O	17	0.64
(3,148)	1:A:435:HIS:N	1:A:431:ARG:O	13	0.64
(3,141)	1:A:403:TYR:N	1:A:401:CYS:O	11	0.64
(3,141)	1:A:403:TYR:N	1:A:401:CYS:O	20	0.64
(3,138)	1:A:399:VAL:N	1:A:395:ARG:O	2	0.64
(3,132)	1:A:422:GLU:N	1:A:408:LYS:O	1	0.64
(3,132)	1:A:422:GLU:N	1:A:408:LYS:O	12	0.64
(3,131)	1:A:421:VAL:N	1:A:381:LEU:O	9	0.64
(3,130)	1:A:420:MET:N	1:A:410:LYS:O	10	0.64
(3,129)	1:A:419:ALA:N	1:A:383:VAL:O	9	0.64
(3,128)	1:A:411:PHE:N	1:A:470:SER:O	9	0.64
(3,128)	1:A:411:PHE:N	1:A:470:SER:O	10	0.64
(3,154)	1:A:527:THR:N	1:A:545:GLU:O	14	0.63
(3,154)	1:A:527:THR:N	1:A:545:GLU:O	19	0.63
(3,152)	1:A:502:PHE:N	1:A:542:GLY:O	3	0.63
(3,152)	1:A:502:PHE:N	1:A:542:GLY:O	4	0.63
(3,142)	1:A:404:GLY:N	1:A:401:CYS:O	15	0.63

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,141)	1:A:403:TYR:N	1:A:401:CYS:O	18	0.63
(3,139)	1:A:400:PHE:N	1:A:396:VAL:O	14	0.63
(3,133)	1:A:423:MET:N	1:A:379:PRO:O	2	0.63
(3,133)	1:A:423:MET:N	1:A:379:PRO:O	8	0.63
(3,132)	1:A:422:GLU:N	1:A:408:LYS:O	5	0.63
(3,131)	1:A:421:VAL:N	1:A:381:LEU:O	6	0.63
(3,131)	1:A:421:VAL:N	1:A:381:LEU:O	17	0.63
(3,131)	1:A:421:VAL:N	1:A:381:LEU:O	20	0.63
(3,128)	1:A:411:PHE:N	1:A:470:SER:O	15	0.63
(3,121)	1:A:381:LEU:N	1:A:421:VAL:O	5	0.63
(3,172)	1:A:552:ALA:N	1:A:548:SER:O	17	0.62
(3,161)	1:A:576:LYS:N	1:A:503:PHE:O	12	0.62
(3,157)	1:A:544:LEU:N	1:A:500:LEU:O	1	0.62
(3,156)	1:A:530:LYS:N	1:A:543:LEU:O	20	0.62
(3,154)	1:A:527:THR:N	1:A:545:GLU:O	4	0.62
(3,148)	1:A:435:HIS:N	1:A:431:ARG:O	6	0.62
(3,147)	1:A:434:THR:N	1:A:430:ASP:O	7	0.62
(3,139)	1:A:400:PHE:N	1:A:396:VAL:O	12	0.62
(3,133)	1:A:423:MET:N	1:A:379:PRO:O	1	0.62
(3,130)	1:A:420:MET:N	1:A:410:LYS:O	14	0.62
(3,129)	1:A:419:ALA:N	1:A:383:VAL:O	13	0.62
(3,128)	1:A:411:PHE:N	1:A:470:SER:O	3	0.62
(3,123)	1:A:383:VAL:N	1:A:419:ALA:O	13	0.62
(3,121)	1:A:381:LEU:N	1:A:421:VAL:O	14	0.62
(3,176)	1:A:556:LEU:N	1:A:552:ALA:O	5	0.61
(3,176)	1:A:556:LEU:N	1:A:552:ALA:O	10	0.61
(3,172)	1:A:552:ALA:N	1:A:548:SER:O	5	0.61
(3,172)	1:A:552:ALA:N	1:A:548:SER:O	10	0.61
(3,172)	1:A:552:ALA:N	1:A:548:SER:O	15	0.61
(3,157)	1:A:544:LEU:N	1:A:500:LEU:O	13	0.61
(3,154)	1:A:527:THR:N	1:A:545:GLU:O	20	0.61
(3,153)	1:A:505:ALA:N	1:A:540:SER:O	18	0.61
(3,147)	1:A:434:THR:N	1:A:430:ASP:O	15	0.61
(3,146)	1:A:433:ILE:N	1:A:429:VAL:O	12	0.61
(3,146)	1:A:433:ILE:N	1:A:429:VAL:O	14	0.61
(3,146)	1:A:433:ILE:N	1:A:429:VAL:O	17	0.61
(3,141)	1:A:403:TYR:N	1:A:401:CYS:O	4	0.61
(3,141)	1:A:403:TYR:N	1:A:401:CYS:O	10	0.61
(3,141)	1:A:403:TYR:N	1:A:401:CYS:O	12	0.61
(3,141)	1:A:403:TYR:N	1:A:401:CYS:O	13	0.61
(3,130)	1:A:420:MET:N	1:A:410:LYS:O	18	0.61
(3,129)	1:A:419:ALA:N	1:A:383:VAL:O	8	0.61

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,128)	1:A:411:PHE:N	1:A:470:SER:O	1	0.61
(3,124)	1:A:384:TYR:N	1:A:447:ASN:O	18	0.61
(3,172)	1:A:552:ALA:N	1:A:548:SER:O	6	0.6
(3,172)	1:A:552:ALA:N	1:A:548:SER:O	18	0.6
(3,160)	1:A:543:LEU:N	1:A:530:LYS:O	12	0.6
(3,158)	1:A:542:GLY:N	1:A:502:PHE:O	5	0.6
(3,157)	1:A:544:LEU:N	1:A:500:LEU:O	20	0.6
(3,153)	1:A:505:ALA:N	1:A:540:SER:O	6	0.6
(3,153)	1:A:505:ALA:N	1:A:540:SER:O	13	0.6
(3,153)	1:A:505:ALA:N	1:A:540:SER:O	15	0.6
(3,151)	1:A:501:HIS:N	1:A:578:CYS:O	6	0.6
(3,148)	1:A:435:HIS:N	1:A:431:ARG:O	7	0.6
(3,147)	1:A:434:THR:N	1:A:430:ASP:O	9	0.6
(3,147)	1:A:434:THR:N	1:A:430:ASP:O	19	0.6
(3,143)	1:A:430:ASP:N	1:A:426:GLY:O	5	0.6
(3,141)	1:A:403:TYR:N	1:A:401:CYS:O	17	0.6
(3,133)	1:A:423:MET:N	1:A:379:PRO:O	7	0.6
(3,131)	1:A:421:VAL:N	1:A:381:LEU:O	7	0.6
(3,130)	1:A:420:MET:N	1:A:410:LYS:O	7	0.6
(3,129)	1:A:419:ALA:N	1:A:383:VAL:O	7	0.6
(3,129)	1:A:419:ALA:N	1:A:383:VAL:O	11	0.6
(3,128)	1:A:411:PHE:N	1:A:470:SER:O	16	0.6
(3,128)	1:A:411:PHE:N	1:A:470:SER:O	19	0.6
(3,124)	1:A:384:TYR:N	1:A:447:ASN:O	3	0.6
(3,121)	1:A:381:LEU:N	1:A:421:VAL:O	6	0.6
(3,121)	1:A:381:LEU:N	1:A:421:VAL:O	20	0.6
(3,175)	1:A:555:THR:N	1:A:551:ASP:O	16	0.59
(3,168)	1:A:518:CYS:N	1:A:514:PHE:O	10	0.59
(3,160)	1:A:543:LEU:N	1:A:530:LYS:O	15	0.59
(3,158)	1:A:542:GLY:N	1:A:502:PHE:O	15	0.59
(3,157)	1:A:544:LEU:N	1:A:500:LEU:O	3	0.59
(3,156)	1:A:530:LYS:N	1:A:543:LEU:O	15	0.59
(3,152)	1:A:502:PHE:N	1:A:542:GLY:O	19	0.59
(3,151)	1:A:501:HIS:N	1:A:578:CYS:O	1	0.59
(3,151)	1:A:501:HIS:N	1:A:578:CYS:O	7	0.59
(3,150)	1:A:500:LEU:N	1:A:544:LEU:O	4	0.59
(3,146)	1:A:433:ILE:N	1:A:429:VAL:O	13	0.59
(3,141)	1:A:403:TYR:N	1:A:401:CYS:O	1	0.59
(3,141)	1:A:403:TYR:N	1:A:401:CYS:O	2	0.59
(3,141)	1:A:403:TYR:N	1:A:401:CYS:O	3	0.59
(3,141)	1:A:403:TYR:N	1:A:401:CYS:O	8	0.59
(3,141)	1:A:403:TYR:N	1:A:401:CYS:O	14	0.59

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,133)	1:A:423:MET:N	1:A:379:PRO:O	14	0.59
(3,132)	1:A:422:GLU:N	1:A:408:LYS:O	4	0.59
(3,130)	1:A:420:MET:N	1:A:410:LYS:O	1	0.59
(3,130)	1:A:420:MET:N	1:A:410:LYS:O	5	0.59
(3,129)	1:A:419:ALA:N	1:A:383:VAL:O	12	0.59
(3,127)	1:A:410:LYS:N	1:A:420:MET:O	6	0.59
(3,126)	1:A:409:VAL:N	1:A:472:LYS:O	12	0.59
(3,124)	1:A:384:TYR:N	1:A:447:ASN:O	13	0.59
(3,174)	1:A:554:GLU:N	1:A:550:SER:O	20	0.58
(3,172)	1:A:552:ALA:N	1:A:548:SER:O	19	0.58
(3,158)	1:A:542:GLY:N	1:A:502:PHE:O	20	0.58
(3,157)	1:A:544:LEU:N	1:A:500:LEU:O	4	0.58
(3,156)	1:A:530:LYS:N	1:A:543:LEU:O	5	0.58
(3,150)	1:A:500:LEU:N	1:A:544:LEU:O	1	0.58
(3,147)	1:A:434:THR:N	1:A:430:ASP:O	18	0.58
(3,139)	1:A:400:PHE:N	1:A:396:VAL:O	5	0.58
(3,138)	1:A:399:VAL:N	1:A:395:ARG:O	19	0.58
(3,132)	1:A:422:GLU:N	1:A:408:LYS:O	8	0.58
(3,132)	1:A:422:GLU:N	1:A:408:LYS:O	9	0.58
(3,132)	1:A:422:GLU:N	1:A:408:LYS:O	14	0.58
(3,131)	1:A:421:VAL:N	1:A:381:LEU:O	1	0.58
(3,131)	1:A:421:VAL:N	1:A:381:LEU:O	10	0.58
(3,129)	1:A:419:ALA:N	1:A:383:VAL:O	17	0.58
(3,126)	1:A:409:VAL:N	1:A:472:LYS:O	6	0.58
(3,123)	1:A:383:VAL:N	1:A:419:ALA:O	14	0.58
(3,121)	1:A:381:LEU:N	1:A:421:VAL:O	3	0.58
(3,121)	1:A:381:LEU:N	1:A:421:VAL:O	7	0.58
(3,121)	1:A:381:LEU:N	1:A:421:VAL:O	12	0.58
(3,172)	1:A:552:ALA:N	1:A:548:SER:O	7	0.57
(3,163)	1:A:580:SER:N	1:A:499:VAL:O	18	0.57
(3,160)	1:A:543:LEU:N	1:A:530:LYS:O	8	0.57
(3,156)	1:A:530:LYS:N	1:A:543:LEU:O	1	0.57
(3,156)	1:A:530:LYS:N	1:A:543:LEU:O	6	0.57
(3,156)	1:A:530:LYS:N	1:A:543:LEU:O	17	0.57
(3,154)	1:A:527:THR:N	1:A:545:GLU:O	1	0.57
(3,154)	1:A:527:THR:N	1:A:545:GLU:O	7	0.57
(3,153)	1:A:505:ALA:N	1:A:540:SER:O	20	0.57
(3,152)	1:A:502:PHE:N	1:A:542:GLY:O	6	0.57
(3,150)	1:A:500:LEU:N	1:A:544:LEU:O	10	0.57
(3,147)	1:A:434:THR:N	1:A:430:ASP:O	6	0.57
(3,147)	1:A:434:THR:N	1:A:430:ASP:O	17	0.57
(3,139)	1:A:400:PHE:N	1:A:396:VAL:O	9	0.57

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,137)	1:A:398:ASN:N	1:A:394:ASP:O	4	0.57
(3,137)	1:A:398:ASN:N	1:A:394:ASP:O	7	0.57
(3,133)	1:A:423:MET:N	1:A:379:PRO:O	11	0.57
(3,131)	1:A:421:VAL:N	1:A:381:LEU:O	14	0.57
(3,129)	1:A:419:ALA:N	1:A:383:VAL:O	10	0.57
(3,129)	1:A:419:ALA:N	1:A:383:VAL:O	20	0.57
(3,126)	1:A:409:VAL:N	1:A:472:LYS:O	4	0.57
(3,123)	1:A:383:VAL:N	1:A:419:ALA:O	4	0.57
(3,176)	1:A:556:LEU:N	1:A:552:ALA:O	9	0.56
(3,176)	1:A:556:LEU:N	1:A:552:ALA:O	12	0.56
(3,163)	1:A:580:SER:N	1:A:499:VAL:O	2	0.56
(3,160)	1:A:543:LEU:N	1:A:530:LYS:O	20	0.56
(3,159)	1:A:545:GLU:N	1:A:528:SER:O	4	0.56
(3,153)	1:A:505:ALA:N	1:A:540:SER:O	16	0.56
(3,152)	1:A:502:PHE:N	1:A:542:GLY:O	16	0.56
(3,151)	1:A:501:HIS:N	1:A:578:CYS:O	2	0.56
(3,150)	1:A:500:LEU:N	1:A:544:LEU:O	5	0.56
(3,150)	1:A:500:LEU:N	1:A:544:LEU:O	12	0.56
(3,141)	1:A:403:TYR:N	1:A:401:CYS:O	16	0.56
(3,133)	1:A:423:MET:N	1:A:379:PRO:O	4	0.56
(3,132)	1:A:422:GLU:N	1:A:408:LYS:O	11	0.56
(3,132)	1:A:422:GLU:N	1:A:408:LYS:O	13	0.56
(3,131)	1:A:421:VAL:N	1:A:381:LEU:O	15	0.56
(3,130)	1:A:420:MET:N	1:A:410:LYS:O	3	0.56
(3,130)	1:A:420:MET:N	1:A:410:LYS:O	13	0.56
(3,130)	1:A:420:MET:N	1:A:410:LYS:O	16	0.56
(3,129)	1:A:419:ALA:N	1:A:383:VAL:O	4	0.56
(3,129)	1:A:419:ALA:N	1:A:383:VAL:O	14	0.56
(3,123)	1:A:383:VAL:N	1:A:419:ALA:O	18	0.56
(3,121)	1:A:381:LEU:N	1:A:421:VAL:O	15	0.56
(1,635)	1:A:397:PHE:HD1	1:A:472:LYS:HE2	20	0.56
(1,635)	1:A:397:PHE:HD1	1:A:472:LYS:HE3	20	0.56
(3,177)	1:A:557:GLY:N	1:A:553:LEU:O	6	0.55
(3,172)	1:A:552:ALA:N	1:A:548:SER:O	14	0.55
(3,172)	1:A:552:ALA:N	1:A:548:SER:O	16	0.55
(3,163)	1:A:580:SER:N	1:A:499:VAL:O	13	0.55
(3,160)	1:A:543:LEU:N	1:A:530:LYS:O	18	0.55
(3,157)	1:A:544:LEU:N	1:A:500:LEU:O	6	0.55
(3,156)	1:A:530:LYS:N	1:A:543:LEU:O	12	0.55
(3,149)	1:A:436:LEU:N	1:A:432:ALA:O	11	0.55
(3,147)	1:A:434:THR:N	1:A:430:ASP:O	2	0.55
(3,143)	1:A:430:ASP:N	1:A:426:GLY:O	1	0.55

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,141)	1:A:403:TYR:N	1:A:401:CYS:O	6	0.55
(3,141)	1:A:403:TYR:N	1:A:401:CYS:O	15	0.55
(3,135)	1:A:474:PHE:N	1:A:407:GLU:O	11	0.55
(3,129)	1:A:419:ALA:N	1:A:383:VAL:O	1	0.55
(3,129)	1:A:419:ALA:N	1:A:383:VAL:O	3	0.55
(3,129)	1:A:419:ALA:N	1:A:383:VAL:O	5	0.55
(3,128)	1:A:411:PHE:N	1:A:470:SER:O	6	0.55
(3,126)	1:A:409:VAL:N	1:A:472:LYS:O	15	0.55
(3,125)	1:A:385:GLY:N	1:A:417:GLY:O	11	0.55
(3,123)	1:A:383:VAL:N	1:A:419:ALA:O	3	0.55
(3,123)	1:A:383:VAL:N	1:A:419:ALA:O	5	0.55
(3,121)	1:A:381:LEU:N	1:A:421:VAL:O	9	0.55
(3,154)	1:A:527:THR:N	1:A:545:GLU:O	6	0.54
(3,153)	1:A:505:ALA:N	1:A:540:SER:O	19	0.54
(3,152)	1:A:502:PHE:N	1:A:542:GLY:O	11	0.54
(3,150)	1:A:500:LEU:N	1:A:544:LEU:O	7	0.54
(3,150)	1:A:500:LEU:N	1:A:544:LEU:O	15	0.54
(3,146)	1:A:433:ILE:N	1:A:429:VAL:O	11	0.54
(3,146)	1:A:433:ILE:N	1:A:429:VAL:O	15	0.54
(3,141)	1:A:403:TYR:N	1:A:401:CYS:O	7	0.54
(3,140)	1:A:401:CYS:N	1:A:397:PHE:O	8	0.54
(3,140)	1:A:401:CYS:N	1:A:397:PHE:O	14	0.54
(3,132)	1:A:422:GLU:N	1:A:408:LYS:O	6	0.54
(3,128)	1:A:411:PHE:N	1:A:470:SER:O	2	0.54
(3,126)	1:A:409:VAL:N	1:A:472:LYS:O	16	0.54
(3,125)	1:A:385:GLY:N	1:A:417:GLY:O	15	0.54
(3,175)	1:A:555:THR:N	1:A:551:ASP:O	8	0.53
(3,174)	1:A:554:GLU:N	1:A:550:SER:O	13	0.53
(3,163)	1:A:580:SER:N	1:A:499:VAL:O	4	0.53
(3,160)	1:A:543:LEU:N	1:A:530:LYS:O	16	0.53
(3,157)	1:A:544:LEU:N	1:A:500:LEU:O	12	0.53
(3,157)	1:A:544:LEU:N	1:A:500:LEU:O	19	0.53
(3,153)	1:A:505:ALA:N	1:A:540:SER:O	5	0.53
(3,152)	1:A:502:PHE:N	1:A:542:GLY:O	13	0.53
(3,147)	1:A:434:THR:N	1:A:430:ASP:O	10	0.53
(3,141)	1:A:403:TYR:N	1:A:401:CYS:O	19	0.53
(3,139)	1:A:400:PHE:N	1:A:396:VAL:O	7	0.53
(3,133)	1:A:423:MET:N	1:A:379:PRO:O	5	0.53
(3,131)	1:A:421:VAL:N	1:A:381:LEU:O	5	0.53
(3,131)	1:A:421:VAL:N	1:A:381:LEU:O	13	0.53
(3,130)	1:A:420:MET:N	1:A:410:LYS:O	19	0.53
(3,129)	1:A:419:ALA:N	1:A:383:VAL:O	18	0.53

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,126)	1:A:409:VAL:N	1:A:472:LYS:O	8	0.53
(3,126)	1:A:409:VAL:N	1:A:472:LYS:O	19	0.53
(3,123)	1:A:383:VAL:N	1:A:419:ALA:O	9	0.53
(3,121)	1:A:381:LEU:N	1:A:421:VAL:O	11	0.53
(3,179)	1:A:559:LEU:N	1:A:555:THR:O	2	0.52
(3,160)	1:A:543:LEU:N	1:A:530:LYS:O	10	0.52
(3,156)	1:A:530:LYS:N	1:A:543:LEU:O	16	0.52
(3,152)	1:A:502:PHE:N	1:A:542:GLY:O	5	0.52
(3,152)	1:A:502:PHE:N	1:A:542:GLY:O	15	0.52
(3,152)	1:A:502:PHE:N	1:A:542:GLY:O	17	0.52
(3,150)	1:A:500:LEU:N	1:A:544:LEU:O	2	0.52
(3,150)	1:A:500:LEU:N	1:A:544:LEU:O	6	0.52
(3,150)	1:A:500:LEU:N	1:A:544:LEU:O	11	0.52
(3,150)	1:A:500:LEU:N	1:A:544:LEU:O	17	0.52
(3,140)	1:A:401:CYS:N	1:A:397:PHE:O	17	0.52
(3,140)	1:A:401:CYS:N	1:A:397:PHE:O	18	0.52
(3,133)	1:A:423:MET:N	1:A:379:PRO:O	13	0.52
(3,132)	1:A:422:GLU:N	1:A:408:LYS:O	18	0.52
(3,131)	1:A:421:VAL:N	1:A:381:LEU:O	11	0.52
(3,129)	1:A:419:ALA:N	1:A:383:VAL:O	15	0.52
(3,126)	1:A:409:VAL:N	1:A:472:LYS:O	1	0.52
(3,126)	1:A:409:VAL:N	1:A:472:LYS:O	2	0.52
(3,126)	1:A:409:VAL:N	1:A:472:LYS:O	3	0.52
(3,126)	1:A:409:VAL:N	1:A:472:LYS:O	13	0.52
(3,123)	1:A:383:VAL:N	1:A:419:ALA:O	10	0.52
(3,123)	1:A:383:VAL:N	1:A:419:ALA:O	19	0.52
(1,635)	1:A:397:PHE:HD1	1:A:472:LYS:HE2	11	0.52
(1,635)	1:A:397:PHE:HD1	1:A:472:LYS:HE3	11	0.52
(3,160)	1:A:543:LEU:N	1:A:530:LYS:O	3	0.51
(3,160)	1:A:543:LEU:N	1:A:530:LYS:O	19	0.51
(3,157)	1:A:544:LEU:N	1:A:500:LEU:O	5	0.51
(3,148)	1:A:435:HIS:N	1:A:431:ARG:O	16	0.51
(3,140)	1:A:401:CYS:N	1:A:397:PHE:O	19	0.51
(3,133)	1:A:423:MET:N	1:A:379:PRO:O	20	0.51
(3,131)	1:A:421:VAL:N	1:A:381:LEU:O	8	0.51
(3,131)	1:A:421:VAL:N	1:A:381:LEU:O	12	0.51
(3,129)	1:A:419:ALA:N	1:A:383:VAL:O	19	0.51
(3,126)	1:A:409:VAL:N	1:A:472:LYS:O	17	0.51
(3,126)	1:A:409:VAL:N	1:A:472:LYS:O	20	0.51
(3,125)	1:A:385:GLY:N	1:A:417:GLY:O	17	0.51
(3,124)	1:A:384:TYR:N	1:A:447:ASN:O	7	0.51
(3,124)	1:A:384:TYR:N	1:A:447:ASN:O	9	0.51

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,124)	1:A:384:TYR:N	1:A:447:ASN:O	11	0.51
(3,124)	1:A:384:TYR:N	1:A:447:ASN:O	20	0.51
(3,123)	1:A:383:VAL:N	1:A:419:ALA:O	11	0.51
(3,123)	1:A:383:VAL:N	1:A:419:ALA:O	16	0.51
(3,121)	1:A:381:LEU:N	1:A:421:VAL:O	13	0.51
(3,172)	1:A:552:ALA:N	1:A:548:SER:O	12	0.5
(3,160)	1:A:543:LEU:N	1:A:530:LYS:O	11	0.5
(3,157)	1:A:544:LEU:N	1:A:500:LEU:O	8	0.5
(3,157)	1:A:544:LEU:N	1:A:500:LEU:O	15	0.5
(3,157)	1:A:544:LEU:N	1:A:500:LEU:O	18	0.5
(3,152)	1:A:502:PHE:N	1:A:542:GLY:O	14	0.5
(3,146)	1:A:433:ILE:N	1:A:429:VAL:O	6	0.5
(3,140)	1:A:401:CYS:N	1:A:397:PHE:O	15	0.5
(3,139)	1:A:400:PHE:N	1:A:396:VAL:O	2	0.5
(3,135)	1:A:474:PHE:N	1:A:407:GLU:O	14	0.5
(3,133)	1:A:423:MET:N	1:A:379:PRO:O	6	0.5
(3,131)	1:A:421:VAL:N	1:A:381:LEU:O	2	0.5
(3,130)	1:A:420:MET:N	1:A:410:LYS:O	6	0.5
(3,129)	1:A:419:ALA:N	1:A:383:VAL:O	6	0.5
(3,126)	1:A:409:VAL:N	1:A:472:LYS:O	5	0.5
(3,126)	1:A:409:VAL:N	1:A:472:LYS:O	10	0.5
(3,125)	1:A:385:GLY:N	1:A:417:GLY:O	1	0.5
(3,125)	1:A:385:GLY:N	1:A:417:GLY:O	6	0.5
(3,124)	1:A:384:TYR:N	1:A:447:ASN:O	8	0.5
(3,123)	1:A:383:VAL:N	1:A:419:ALA:O	1	0.5
(3,123)	1:A:383:VAL:N	1:A:419:ALA:O	8	0.5
(3,123)	1:A:383:VAL:N	1:A:419:ALA:O	15	0.5
(3,122)	1:A:382:MET:N	1:A:449:CYS:O	7	0.5
(3,122)	1:A:382:MET:N	1:A:449:CYS:O	13	0.5
(3,160)	1:A:543:LEU:N	1:A:530:LYS:O	9	0.49
(3,157)	1:A:544:LEU:N	1:A:500:LEU:O	7	0.49
(3,157)	1:A:544:LEU:N	1:A:500:LEU:O	10	0.49
(3,154)	1:A:527:THR:N	1:A:545:GLU:O	8	0.49
(3,152)	1:A:502:PHE:N	1:A:542:GLY:O	8	0.49
(3,152)	1:A:502:PHE:N	1:A:542:GLY:O	12	0.49
(3,152)	1:A:502:PHE:N	1:A:542:GLY:O	18	0.49
(3,147)	1:A:434:THR:N	1:A:430:ASP:O	4	0.49
(3,146)	1:A:433:ILE:N	1:A:429:VAL:O	3	0.49
(3,143)	1:A:430:ASP:N	1:A:426:GLY:O	3	0.49
(3,126)	1:A:409:VAL:N	1:A:472:LYS:O	14	0.49
(3,125)	1:A:385:GLY:N	1:A:417:GLY:O	8	0.49
(3,123)	1:A:383:VAL:N	1:A:419:ALA:O	12	0.49

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,123)	1:A:383:VAL:N	1:A:419:ALA:O	17	0.49
(3,177)	1:A:557:GLY:N	1:A:553:LEU:O	19	0.48
(3,160)	1:A:543:LEU:N	1:A:530:LYS:O	14	0.48
(3,158)	1:A:542:GLY:N	1:A:502:PHE:O	12	0.48
(3,157)	1:A:544:LEU:N	1:A:500:LEU:O	2	0.48
(3,150)	1:A:500:LEU:N	1:A:544:LEU:O	9	0.48
(3,148)	1:A:435:HIS:N	1:A:431:ARG:O	9	0.48
(3,147)	1:A:434:THR:N	1:A:430:ASP:O	11	0.48
(3,147)	1:A:434:THR:N	1:A:430:ASP:O	12	0.48
(3,147)	1:A:434:THR:N	1:A:430:ASP:O	13	0.48
(3,146)	1:A:433:ILE:N	1:A:429:VAL:O	4	0.48
(3,135)	1:A:474:PHE:N	1:A:407:GLU:O	9	0.48
(3,135)	1:A:474:PHE:N	1:A:407:GLU:O	15	0.48
(3,135)	1:A:474:PHE:N	1:A:407:GLU:O	18	0.48
(3,126)	1:A:409:VAL:N	1:A:472:LYS:O	7	0.48
(3,126)	1:A:409:VAL:N	1:A:472:LYS:O	11	0.48
(3,126)	1:A:409:VAL:N	1:A:472:LYS:O	18	0.48
(3,125)	1:A:385:GLY:N	1:A:417:GLY:O	9	0.48
(3,125)	1:A:385:GLY:N	1:A:417:GLY:O	12	0.48
(3,125)	1:A:385:GLY:N	1:A:417:GLY:O	19	0.48
(3,124)	1:A:384:TYR:N	1:A:447:ASN:O	14	0.48
(3,122)	1:A:382:MET:N	1:A:449:CYS:O	1	0.48
(3,122)	1:A:382:MET:N	1:A:449:CYS:O	3	0.48
(3,160)	1:A:543:LEU:N	1:A:530:LYS:O	17	0.47
(3,157)	1:A:544:LEU:N	1:A:500:LEU:O	9	0.47
(3,157)	1:A:544:LEU:N	1:A:500:LEU:O	11	0.47
(3,152)	1:A:502:PHE:N	1:A:542:GLY:O	2	0.47
(3,152)	1:A:502:PHE:N	1:A:542:GLY:O	20	0.47
(3,140)	1:A:401:CYS:N	1:A:397:PHE:O	20	0.47
(3,135)	1:A:474:PHE:N	1:A:407:GLU:O	20	0.47
(3,126)	1:A:409:VAL:N	1:A:472:LYS:O	9	0.47
(3,125)	1:A:385:GLY:N	1:A:417:GLY:O	10	0.47
(3,125)	1:A:385:GLY:N	1:A:417:GLY:O	20	0.47
(3,124)	1:A:384:TYR:N	1:A:447:ASN:O	12	0.47
(3,123)	1:A:383:VAL:N	1:A:419:ALA:O	6	0.47
(3,122)	1:A:382:MET:N	1:A:449:CYS:O	11	0.47
(3,122)	1:A:382:MET:N	1:A:449:CYS:O	14	0.47
(3,122)	1:A:382:MET:N	1:A:449:CYS:O	20	0.47
(3,121)	1:A:381:LEU:N	1:A:421:VAL:O	1	0.47
(3,179)	1:A:559:LEU:N	1:A:555:THR:O	9	0.46
(3,176)	1:A:556:LEU:N	1:A:552:ALA:O	13	0.46
(3,163)	1:A:580:SER:N	1:A:499:VAL:O	6	0.46

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,163)	1:A:580:SER:N	1:A:499:VAL:O	9	0.46
(3,146)	1:A:433:ILE:N	1:A:429:VAL:O	5	0.46
(3,146)	1:A:433:ILE:N	1:A:429:VAL:O	10	0.46
(3,146)	1:A:433:ILE:N	1:A:429:VAL:O	16	0.46
(3,146)	1:A:433:ILE:N	1:A:429:VAL:O	18	0.46
(3,146)	1:A:433:ILE:N	1:A:429:VAL:O	20	0.46
(3,135)	1:A:474:PHE:N	1:A:407:GLU:O	1	0.46
(3,135)	1:A:474:PHE:N	1:A:407:GLU:O	2	0.46
(3,135)	1:A:474:PHE:N	1:A:407:GLU:O	6	0.46
(3,133)	1:A:423:MET:N	1:A:379:PRO:O	3	0.46
(3,133)	1:A:423:MET:N	1:A:379:PRO:O	18	0.46
(3,129)	1:A:419:ALA:N	1:A:383:VAL:O	16	0.46
(3,124)	1:A:384:TYR:N	1:A:447:ASN:O	1	0.46
(3,124)	1:A:384:TYR:N	1:A:447:ASN:O	16	0.46
(3,122)	1:A:382:MET:N	1:A:449:CYS:O	15	0.46
(3,179)	1:A:559:LEU:N	1:A:555:THR:O	1	0.45
(3,146)	1:A:433:ILE:N	1:A:429:VAL:O	8	0.45
(3,135)	1:A:474:PHE:N	1:A:407:GLU:O	10	0.45
(3,133)	1:A:423:MET:N	1:A:379:PRO:O	16	0.45
(3,124)	1:A:384:TYR:N	1:A:447:ASN:O	2	0.45
(3,124)	1:A:384:TYR:N	1:A:447:ASN:O	5	0.45
(3,124)	1:A:384:TYR:N	1:A:447:ASN:O	6	0.45
(3,124)	1:A:384:TYR:N	1:A:447:ASN:O	17	0.45
(3,122)	1:A:382:MET:N	1:A:449:CYS:O	19	0.45
(3,179)	1:A:559:LEU:N	1:A:555:THR:O	11	0.44
(3,152)	1:A:502:PHE:N	1:A:542:GLY:O	9	0.44
(3,152)	1:A:502:PHE:N	1:A:542:GLY:O	10	0.44
(3,135)	1:A:474:PHE:N	1:A:407:GLU:O	3	0.44
(3,135)	1:A:474:PHE:N	1:A:407:GLU:O	5	0.44
(3,135)	1:A:474:PHE:N	1:A:407:GLU:O	8	0.44
(3,133)	1:A:423:MET:N	1:A:379:PRO:O	17	0.44
(3,125)	1:A:385:GLY:N	1:A:417:GLY:O	3	0.44
(3,124)	1:A:384:TYR:N	1:A:447:ASN:O	4	0.44
(3,123)	1:A:383:VAL:N	1:A:419:ALA:O	20	0.44
(3,122)	1:A:382:MET:N	1:A:449:CYS:O	9	0.44
(3,122)	1:A:382:MET:N	1:A:449:CYS:O	12	0.44
(3,179)	1:A:559:LEU:N	1:A:555:THR:O	16	0.43
(3,179)	1:A:559:LEU:N	1:A:555:THR:O	20	0.43
(3,157)	1:A:544:LEU:N	1:A:500:LEU:O	17	0.43
(3,146)	1:A:433:ILE:N	1:A:429:VAL:O	19	0.43
(3,125)	1:A:385:GLY:N	1:A:417:GLY:O	7	0.43
(3,124)	1:A:384:TYR:N	1:A:447:ASN:O	10	0.43

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,124)	1:A:384:TYR:N	1:A:447:ASN:O	15	0.43
(3,122)	1:A:382:MET:N	1:A:449:CYS:O	5	0.43
(3,122)	1:A:382:MET:N	1:A:449:CYS:O	10	0.43
(3,179)	1:A:559:LEU:N	1:A:555:THR:O	3	0.42
(3,179)	1:A:559:LEU:N	1:A:555:THR:O	10	0.42
(3,179)	1:A:559:LEU:N	1:A:555:THR:O	12	0.42
(3,157)	1:A:544:LEU:N	1:A:500:LEU:O	14	0.42
(3,147)	1:A:434:THR:N	1:A:430:ASP:O	1	0.42
(3,146)	1:A:433:ILE:N	1:A:429:VAL:O	9	0.42
(3,137)	1:A:398:ASN:N	1:A:394:ASP:O	16	0.42
(3,123)	1:A:383:VAL:N	1:A:419:ALA:O	7	0.42
(3,122)	1:A:382:MET:N	1:A:449:CYS:O	4	0.42
(3,122)	1:A:382:MET:N	1:A:449:CYS:O	6	0.42
(3,122)	1:A:382:MET:N	1:A:449:CYS:O	8	0.42
(3,179)	1:A:559:LEU:N	1:A:555:THR:O	15	0.41
(3,140)	1:A:401:CYS:N	1:A:397:PHE:O	10	0.41
(3,135)	1:A:474:PHE:N	1:A:407:GLU:O	7	0.41
(3,135)	1:A:474:PHE:N	1:A:407:GLU:O	13	0.41
(3,125)	1:A:385:GLY:N	1:A:417:GLY:O	16	0.41
(3,124)	1:A:384:TYR:N	1:A:447:ASN:O	19	0.41
(3,122)	1:A:382:MET:N	1:A:449:CYS:O	2	0.41
(3,122)	1:A:382:MET:N	1:A:449:CYS:O	18	0.41
(3,179)	1:A:559:LEU:N	1:A:555:THR:O	8	0.4
(3,135)	1:A:474:PHE:N	1:A:407:GLU:O	17	0.4
(3,133)	1:A:423:MET:N	1:A:379:PRO:O	9	0.4
(3,133)	1:A:423:MET:N	1:A:379:PRO:O	19	0.4
(3,125)	1:A:385:GLY:N	1:A:417:GLY:O	5	0.4
(3,125)	1:A:385:GLY:N	1:A:417:GLY:O	13	0.4
(3,122)	1:A:382:MET:N	1:A:449:CYS:O	17	0.4
(3,179)	1:A:559:LEU:N	1:A:555:THR:O	7	0.39
(3,179)	1:A:559:LEU:N	1:A:555:THR:O	18	0.39
(3,152)	1:A:502:PHE:N	1:A:542:GLY:O	1	0.39
(3,135)	1:A:474:PHE:N	1:A:407:GLU:O	12	0.39
(3,125)	1:A:385:GLY:N	1:A:417:GLY:O	2	0.39
(3,122)	1:A:382:MET:N	1:A:449:CYS:O	16	0.39
(3,135)	1:A:474:PHE:N	1:A:407:GLU:O	4	0.38
(3,179)	1:A:559:LEU:N	1:A:555:THR:O	6	0.37
(3,135)	1:A:474:PHE:N	1:A:407:GLU:O	16	0.37
(3,135)	1:A:474:PHE:N	1:A:407:GLU:O	19	0.37
(3,125)	1:A:385:GLY:N	1:A:417:GLY:O	4	0.37
(3,179)	1:A:559:LEU:N	1:A:555:THR:O	19	0.35
(3,125)	1:A:385:GLY:N	1:A:417:GLY:O	14	0.35

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,179)	1:A:559:LEU:N	1:A:555:THR:O	17	0.34
(1,2148)	1:A:500:LEU:HG	1:A:546:TRP:HZ2	9	0.32
(1,1899)	1:A:480:ASN:HA	1:A:481:ARG:HG2	10	0.32
(1,1899)	1:A:480:ASN:HA	1:A:481:ARG:HG3	10	0.32
(3,179)	1:A:559:LEU:N	1:A:555:THR:O	5	0.31
(3,179)	1:A:559:LEU:N	1:A:555:THR:O	14	0.31
(1,1899)	1:A:480:ASN:HA	1:A:481:ARG:HG2	1	0.3
(1,1899)	1:A:480:ASN:HA	1:A:481:ARG:HG3	1	0.3
(3,179)	1:A:559:LEU:N	1:A:555:THR:O	13	0.28
(2,88)	1:A:573:TYR:HD1	1:A:574:THR:HB	20	0.28
(2,88)	1:A:573:TYR:HD2	1:A:574:THR:HB	20	0.28
(1,1310)	1:A:431:ARG:H	1:A:433:ILE:HG21	9	0.27
(1,1310)	1:A:431:ARG:H	1:A:433:ILE:HG22	9	0.27
(1,1310)	1:A:431:ARG:H	1:A:433:ILE:HG23	9	0.27
(1,1090)	1:A:412:MET:HE1	1:A:419:ALA:HB1	2	0.25
(1,1090)	1:A:412:MET:HE1	1:A:419:ALA:HB2	2	0.25
(1,1090)	1:A:412:MET:HE1	1:A:419:ALA:HB3	2	0.25
(1,1090)	1:A:412:MET:HE2	1:A:419:ALA:HB1	2	0.25
(1,1090)	1:A:412:MET:HE2	1:A:419:ALA:HB2	2	0.25
(1,1090)	1:A:412:MET:HE2	1:A:419:ALA:HB3	2	0.25
(1,1090)	1:A:412:MET:HE3	1:A:419:ALA:HB1	2	0.25
(1,1090)	1:A:412:MET:HE3	1:A:419:ALA:HB2	2	0.25
(1,1090)	1:A:412:MET:HE3	1:A:419:ALA:HB3	2	0.25
(1,3185)	1:A:562:TYR:H	1:A:563:GLN:HG2	14	0.24
(1,3185)	1:A:562:TYR:H	1:A:563:GLN:HG3	14	0.24
(1,2146)	1:A:500:LEU:HG	1:A:546:TRP:H	12	0.24
(1,3185)	1:A:562:TYR:H	1:A:563:GLN:HG2	2	0.22
(1,3185)	1:A:562:TYR:H	1:A:563:GLN:HG3	2	0.22
(1,2146)	1:A:500:LEU:HG	1:A:546:TRP:H	9	0.22
(1,1899)	1:A:480:ASN:HA	1:A:481:ARG:HG2	5	0.22
(1,1899)	1:A:480:ASN:HA	1:A:481:ARG:HG3	5	0.22
(1,1310)	1:A:431:ARG:H	1:A:433:ILE:HG21	1	0.22
(1,1310)	1:A:431:ARG:H	1:A:433:ILE:HG22	1	0.22
(1,1310)	1:A:431:ARG:H	1:A:433:ILE:HG23	1	0.22
(2,88)	1:A:573:TYR:HD1	1:A:574:THR:HB	4	0.21
(2,88)	1:A:573:TYR:HD2	1:A:574:THR:HB	4	0.21
(1,3173)	1:A:560:ASN:H	1:A:577:LEU:HG	19	0.21
(1,2019)	1:A:489:ALA:H	1:A:491:ASN:HB2	11	0.21
(1,2019)	1:A:489:ALA:H	1:A:491:ASN:HB3	11	0.21
(1,682)	1:A:399:VAL:HG21	1:A:440:PHE:HD1	17	0.2
(1,682)	1:A:399:VAL:HG21	1:A:440:PHE:HD2	17	0.2
(1,682)	1:A:399:VAL:HG22	1:A:440:PHE:HD1	17	0.2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,682)	1:A:399:VAL:HG22	1:A:440:PHE:HD2	17	0.2
(1,682)	1:A:399:VAL:HG23	1:A:440:PHE:HD1	17	0.2
(1,682)	1:A:399:VAL:HG23	1:A:440:PHE:HD2	17	0.2
(1,497)	1:A:391:MET:HG2	1:A:411:PHE:HZ	20	0.2
(1,497)	1:A:391:MET:HG3	1:A:411:PHE:HZ	20	0.2
(1,2653)	1:A:519:ASP:H	1:A:520:GLU:HG2	6	0.2
(1,2653)	1:A:519:ASP:H	1:A:520:GLU:HG3	6	0.2
(1,2994)	1:A:546:TRP:HD1	1:A:551:ASP:HA	10	0.19
(2,1)	1:A:373:GLY:H	1:A:374:PRO:HG2	12	0.18
(2,1)	1:A:373:GLY:H	1:A:374:PRO:HG3	12	0.18
(1,682)	1:A:399:VAL:HG21	1:A:440:PHE:HD1	15	0.18
(1,682)	1:A:399:VAL:HG21	1:A:440:PHE:HD2	15	0.18
(1,682)	1:A:399:VAL:HG22	1:A:440:PHE:HD1	15	0.18
(1,682)	1:A:399:VAL:HG22	1:A:440:PHE:HD2	15	0.18
(1,682)	1:A:399:VAL:HG23	1:A:440:PHE:HD1	15	0.18
(1,682)	1:A:399:VAL:HG23	1:A:440:PHE:HD2	15	0.18
(1,2869)	1:A:530:LYS:HB2	1:A:530:LYS:HE2	12	0.18
(1,2869)	1:A:530:LYS:HB2	1:A:530:LYS:HE3	12	0.18
(1,2869)	1:A:530:LYS:HB3	1:A:530:LYS:HE2	12	0.18
(1,2869)	1:A:530:LYS:HB3	1:A:530:LYS:HE3	12	0.18
(1,2357)	1:A:508:GLU:H	1:A:540:SER:HB2	20	0.18
(1,2357)	1:A:508:GLU:H	1:A:540:SER:HB3	20	0.18
(1,1014)	1:A:410:LYS:H	1:A:410:LYS:HE2	3	0.18
(1,1014)	1:A:410:LYS:H	1:A:410:LYS:HE3	3	0.18
(2,24)	1:A:387:ASP:HB2	1:A:391:MET:HA	20	0.17
(2,24)	1:A:387:ASP:HB3	1:A:391:MET:HA	20	0.17
(1,682)	1:A:399:VAL:HG21	1:A:440:PHE:HD1	19	0.17
(1,682)	1:A:399:VAL:HG21	1:A:440:PHE:HD2	19	0.17
(1,682)	1:A:399:VAL:HG22	1:A:440:PHE:HD1	19	0.17
(1,682)	1:A:399:VAL:HG22	1:A:440:PHE:HD2	19	0.17
(1,682)	1:A:399:VAL:HG23	1:A:440:PHE:HD1	19	0.17
(1,682)	1:A:399:VAL:HG23	1:A:440:PHE:HD2	19	0.17
(1,2157)	1:A:500:LEU:HD11	1:A:580:SER:H	1	0.17
(1,2157)	1:A:500:LEU:HD12	1:A:580:SER:H	1	0.17
(1,2157)	1:A:500:LEU:HD13	1:A:580:SER:H	1	0.17
(1,1899)	1:A:480:ASN:HA	1:A:481:ARG:HG2	13	0.17
(1,1899)	1:A:480:ASN:HA	1:A:481:ARG:HG3	13	0.17
(1,18)	1:A:375:HIS:HA	1:A:430:ASP:HB2	3	0.17
(1,18)	1:A:375:HIS:HA	1:A:430:ASP:HB3	3	0.17
(1,1086)	1:A:412:MET:HE1	1:A:413:LYS:HB2	15	0.17
(1,1086)	1:A:412:MET:HE1	1:A:413:LYS:HB3	15	0.17
(1,1086)	1:A:412:MET:HE2	1:A:413:LYS:HB2	15	0.17

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1086)	1:A:412:MET:HE2	1:A:413:LYS:HB3	15	0.17
(1,1086)	1:A:412:MET:HE3	1:A:413:LYS:HB2	15	0.17
(1,1086)	1:A:412:MET:HE3	1:A:413:LYS:HB3	15	0.17
(1,1033)	1:A:410:LYS:HA	1:A:461:SER:HB2	20	0.17
(1,1033)	1:A:410:LYS:HA	1:A:461:SER:HB3	20	0.17
(2,88)	1:A:573:TYR:HD1	1:A:574:THR:HB	6	0.16
(2,88)	1:A:573:TYR:HD2	1:A:574:THR:HB	6	0.16
(2,82)	1:A:530:LYS:HD2	1:A:586:SER:H	16	0.16
(2,82)	1:A:530:LYS:HD3	1:A:586:SER:H	16	0.16
(2,80)	1:A:527:THR:HB	1:A:546:TRP:HD1	9	0.16
(2,73)	1:A:505:ALA:HA	1:A:575:LEU:H	16	0.16
(1,641)	1:A:397:PHE:HB2	1:A:406:VAL:HB	12	0.16
(1,641)	1:A:397:PHE:HB3	1:A:406:VAL:HB	12	0.16
(1,641)	1:A:397:PHE:HB2	1:A:406:VAL:HB	19	0.16
(1,641)	1:A:397:PHE:HB3	1:A:406:VAL:HB	19	0.16
(1,457)	1:A:389:SER:HA	1:A:465:GLU:HB2	10	0.16
(1,457)	1:A:389:SER:HA	1:A:465:GLU:HB3	10	0.16
(1,430)	1:A:388:GLN:H	1:A:390:LYS:HD2	16	0.16
(1,430)	1:A:388:GLN:H	1:A:390:LYS:HD3	16	0.16
(1,368)	1:A:386:LEU:HG	1:A:419:ALA:H	2	0.16
(1,3122)	1:A:556:LEU:HA	1:A:559:LEU:HG	14	0.16
(1,2607)	1:A:517:ILE:HB	1:A:520:GLU:HG2	6	0.16
(1,2607)	1:A:517:ILE:HB	1:A:520:GLU:HG3	6	0.16
(1,1726)	1:A:464:LEU:H	1:A:470:SER:HB2	16	0.16
(1,1726)	1:A:464:LEU:H	1:A:470:SER:HB3	16	0.16
(1,110)	1:A:380:VAL:HG11	1:A:451:SER:H	16	0.16
(1,110)	1:A:380:VAL:HG12	1:A:451:SER:H	16	0.16
(1,110)	1:A:380:VAL:HG13	1:A:451:SER:H	16	0.16
(2,80)	1:A:527:THR:HB	1:A:546:TRP:HD1	7	0.15
(2,3)	1:A:376:ALA:HA	1:A:433:ILE:HB	2	0.15
(1,924)	1:A:407:GLU:HG2	1:A:408:LYS:HD2	10	0.15
(1,924)	1:A:407:GLU:HG2	1:A:408:LYS:HD3	10	0.15
(1,924)	1:A:407:GLU:HG3	1:A:408:LYS:HD2	10	0.15
(1,924)	1:A:407:GLU:HG3	1:A:408:LYS:HD3	10	0.15
(1,668)	1:A:399:VAL:HB	1:A:556:LEU:HD11	15	0.15
(1,668)	1:A:399:VAL:HB	1:A:556:LEU:HD12	15	0.15
(1,668)	1:A:399:VAL:HB	1:A:556:LEU:HD13	15	0.15
(1,2994)	1:A:546:TRP:HD1	1:A:551:ASP:HA	2	0.15
(1,2994)	1:A:546:TRP:HD1	1:A:551:ASP:HA	3	0.15
(1,242)	1:A:382:MET:HE1	1:A:413:LYS:HG2	15	0.15
(1,242)	1:A:382:MET:HE1	1:A:413:LYS:HG3	15	0.15
(1,242)	1:A:382:MET:HE2	1:A:413:LYS:HG2	15	0.15

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,242)	1:A:382:MET:HE2	1:A:413:LYS:HG3	15	0.15
(1,242)	1:A:382:MET:HE3	1:A:413:LYS:HG2	15	0.15
(1,242)	1:A:382:MET:HE3	1:A:413:LYS:HG3	15	0.15
(1,2357)	1:A:508:GLU:H	1:A:540:SER:HB2	13	0.15
(1,2357)	1:A:508:GLU:H	1:A:540:SER:HB3	13	0.15
(1,2157)	1:A:500:LEU:HD11	1:A:580:SER:H	16	0.15
(1,2157)	1:A:500:LEU:HD12	1:A:580:SER:H	16	0.15
(1,2157)	1:A:500:LEU:HD13	1:A:580:SER:H	16	0.15
(1,2109)	1:A:499:VAL:HG21	1:A:581:THR:HA	17	0.15
(1,2109)	1:A:499:VAL:HG22	1:A:581:THR:HA	17	0.15
(1,2109)	1:A:499:VAL:HG23	1:A:581:THR:HA	17	0.15
(2,73)	1:A:505:ALA:HA	1:A:575:LEU:H	18	0.14
(2,57)	1:A:456:ILE:H	1:A:471:TYR:HE1	11	0.14
(2,57)	1:A:456:ILE:H	1:A:471:TYR:HE2	11	0.14
(2,56)	1:A:455:ALA:HA	1:A:457:MET:HG2	3	0.14
(2,56)	1:A:455:ALA:HA	1:A:457:MET:HG3	3	0.14
(2,24)	1:A:387:ASP:HB2	1:A:391:MET:HA	13	0.14
(2,24)	1:A:387:ASP:HB3	1:A:391:MET:HA	13	0.14
(1,351)	1:A:385:GLY:H	1:A:417:GLY:H	7	0.14
(1,3211)	1:A:563:GLN:HA	1:A:574:THR:HB	12	0.14
(1,2994)	1:A:546:TRP:HD1	1:A:551:ASP:HA	13	0.14
(1,2882)	1:A:530:LYS:HE2	1:A:543:LEU:HB2	20	0.14
(1,2882)	1:A:530:LYS:HE2	1:A:543:LEU:HB3	20	0.14
(1,2882)	1:A:530:LYS:HE3	1:A:543:LEU:HB2	20	0.14
(1,2882)	1:A:530:LYS:HE3	1:A:543:LEU:HB3	20	0.14
(1,2869)	1:A:530:LYS:HB2	1:A:530:LYS:HE2	1	0.14
(1,2869)	1:A:530:LYS:HB2	1:A:530:LYS:HE3	1	0.14
(1,2869)	1:A:530:LYS:HB3	1:A:530:LYS:HE2	1	0.14
(1,2869)	1:A:530:LYS:HB3	1:A:530:LYS:HE3	1	0.14
(1,2773)	1:A:526:PRO:HB2	1:A:546:TRP:HE1	11	0.14
(1,2773)	1:A:526:PRO:HB3	1:A:546:TRP:HE1	11	0.14
(1,2744)	1:A:524:LYS:HE2	1:A:546:TRP:HD1	18	0.14
(1,2744)	1:A:524:LYS:HE3	1:A:546:TRP:HD1	18	0.14
(1,2358)	1:A:508:GLU:H	1:A:564:MET:HE1	6	0.14
(1,2358)	1:A:508:GLU:H	1:A:564:MET:HE2	6	0.14
(1,2358)	1:A:508:GLU:H	1:A:564:MET:HE3	6	0.14
(1,2246)	1:A:503:PHE:HE1	1:A:541:SER:HA	16	0.14
(1,2246)	1:A:503:PHE:HE2	1:A:541:SER:HA	16	0.14
(1,2019)	1:A:489:ALA:H	1:A:491:ASN:HB2	10	0.14
(1,2019)	1:A:489:ALA:H	1:A:491:ASN:HB3	10	0.14
(1,1298)	1:A:430:ASP:HA	1:A:433:ILE:HD11	16	0.14
(1,1298)	1:A:430:ASP:HA	1:A:433:ILE:HD12	16	0.14

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1298)	1:A:430:ASP:HA	1:A:433:ILE:HD13	16	0.14
(1,1088)	1:A:412:MET:HE1	1:A:418:ALA:HB1	15	0.14
(1,1088)	1:A:412:MET:HE1	1:A:418:ALA:HB2	15	0.14
(1,1088)	1:A:412:MET:HE1	1:A:418:ALA:HB3	15	0.14
(1,1088)	1:A:412:MET:HE2	1:A:418:ALA:HB1	15	0.14
(1,1088)	1:A:412:MET:HE2	1:A:418:ALA:HB2	15	0.14
(1,1088)	1:A:412:MET:HE2	1:A:418:ALA:HB3	15	0.14
(1,1088)	1:A:412:MET:HE3	1:A:418:ALA:HB1	15	0.14
(1,1088)	1:A:412:MET:HE3	1:A:418:ALA:HB2	15	0.14
(1,1088)	1:A:412:MET:HE3	1:A:418:ALA:HB3	15	0.14
(1,1086)	1:A:412:MET:HE1	1:A:413:LYS:HB2	5	0.14
(1,1086)	1:A:412:MET:HE1	1:A:413:LYS:HB3	5	0.14
(1,1086)	1:A:412:MET:HE2	1:A:413:LYS:HB2	5	0.14
(1,1086)	1:A:412:MET:HE2	1:A:413:LYS:HB3	5	0.14
(1,1086)	1:A:412:MET:HE3	1:A:413:LYS:HB2	5	0.14
(1,1086)	1:A:412:MET:HE3	1:A:413:LYS:HB3	5	0.14
(3,82)	1:A:553:LEU:H	1:A:549:LYS:O	7	0.13
(3,82)	1:A:553:LEU:H	1:A:549:LYS:O	9	0.13
(3,82)	1:A:553:LEU:H	1:A:549:LYS:O	15	0.13
(2,68)	1:A:499:VAL:H	1:A:546:TRP:H	16	0.13
(2,56)	1:A:455:ALA:HA	1:A:457:MET:HG2	15	0.13
(2,56)	1:A:455:ALA:HA	1:A:457:MET:HG3	15	0.13
(2,56)	1:A:455:ALA:HA	1:A:457:MET:HG2	18	0.13
(2,56)	1:A:455:ALA:HA	1:A:457:MET:HG3	18	0.13
(2,1)	1:A:373:GLY:H	1:A:374:PRO:HG2	13	0.13
(2,1)	1:A:373:GLY:H	1:A:374:PRO:HG3	13	0.13
(1,719)	1:A:400:PHE:HZ	1:A:433:ILE:HD11	16	0.13
(1,719)	1:A:400:PHE:HZ	1:A:433:ILE:HD12	16	0.13
(1,719)	1:A:400:PHE:HZ	1:A:433:ILE:HD13	16	0.13
(1,682)	1:A:399:VAL:HG21	1:A:440:PHE:HD1	10	0.13
(1,682)	1:A:399:VAL:HG21	1:A:440:PHE:HD2	10	0.13
(1,682)	1:A:399:VAL:HG22	1:A:440:PHE:HD1	10	0.13
(1,682)	1:A:399:VAL:HG22	1:A:440:PHE:HD2	10	0.13
(1,682)	1:A:399:VAL:HG23	1:A:440:PHE:HD1	10	0.13
(1,682)	1:A:399:VAL:HG23	1:A:440:PHE:HD2	10	0.13
(1,641)	1:A:397:PHE:HB2	1:A:406:VAL:HB	5	0.13
(1,641)	1:A:397:PHE:HB3	1:A:406:VAL:HB	5	0.13
(1,419)	1:A:387:ASP:HB2	1:A:390:LYS:HA	1	0.13
(1,419)	1:A:387:ASP:HB3	1:A:390:LYS:HA	1	0.13
(1,368)	1:A:386:LEU:HG	1:A:419:ALA:H	15	0.13
(1,33)	1:A:376:ALA:HB1	1:A:427:TYR:H	18	0.13
(1,33)	1:A:376:ALA:HB2	1:A:427:TYR:H	18	0.13

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,33)	1:A:376:ALA:HB3	1:A:427:TYR:H	18	0.13
(1,3190)	1:A:562:TYR:H	1:A:577:LEU:HD11	13	0.13
(1,3190)	1:A:562:TYR:H	1:A:577:LEU:HD12	13	0.13
(1,3190)	1:A:562:TYR:H	1:A:577:LEU:HD13	13	0.13
(1,3190)	1:A:562:TYR:H	1:A:577:LEU:HD21	13	0.13
(1,3190)	1:A:562:TYR:H	1:A:577:LEU:HD22	13	0.13
(1,3190)	1:A:562:TYR:H	1:A:577:LEU:HD23	13	0.13
(1,3127)	1:A:556:LEU:HG	1:A:560:ASN:HB2	19	0.13
(1,3127)	1:A:556:LEU:HG	1:A:560:ASN:HB3	19	0.13
(1,3019)	1:A:547:ASP:HA	1:A:552:ALA:H	8	0.13
(1,2869)	1:A:530:LYS:HB2	1:A:530:LYS:HE2	5	0.13
(1,2869)	1:A:530:LYS:HB2	1:A:530:LYS:HE3	5	0.13
(1,2869)	1:A:530:LYS:HB3	1:A:530:LYS:HE2	5	0.13
(1,2869)	1:A:530:LYS:HB3	1:A:530:LYS:HE3	5	0.13
(1,2869)	1:A:530:LYS:HB2	1:A:530:LYS:HE2	17	0.13
(1,2869)	1:A:530:LYS:HB2	1:A:530:LYS:HE3	17	0.13
(1,2869)	1:A:530:LYS:HB3	1:A:530:LYS:HE2	17	0.13
(1,2869)	1:A:530:LYS:HB3	1:A:530:LYS:HE3	17	0.13
(1,2731)	1:A:524:LYS:H	1:A:551:ASP:HA	3	0.13
(1,2684)	1:A:521:LEU:HB2	1:A:559:LEU:H	11	0.13
(1,2684)	1:A:521:LEU:HB3	1:A:559:LEU:H	11	0.13
(1,243)	1:A:382:MET:HE1	1:A:418:ALA:HA	3	0.13
(1,243)	1:A:382:MET:HE2	1:A:418:ALA:HA	3	0.13
(1,243)	1:A:382:MET:HE3	1:A:418:ALA:HA	3	0.13
(1,242)	1:A:382:MET:HE1	1:A:413:LYS:HG2	19	0.13
(1,242)	1:A:382:MET:HE1	1:A:413:LYS:HG3	19	0.13
(1,242)	1:A:382:MET:HE2	1:A:413:LYS:HG2	19	0.13
(1,242)	1:A:382:MET:HE2	1:A:413:LYS:HG3	19	0.13
(1,242)	1:A:382:MET:HE3	1:A:413:LYS:HG2	19	0.13
(1,242)	1:A:382:MET:HE3	1:A:413:LYS:HG3	19	0.13
(1,2357)	1:A:508:GLU:H	1:A:540:SER:HB2	16	0.13
(1,2357)	1:A:508:GLU:H	1:A:540:SER:HB3	16	0.13
(1,2255)	1:A:504:ASN:H	1:A:541:SER:H	12	0.13
(1,2255)	1:A:504:ASN:H	1:A:541:SER:H	18	0.13
(1,2240)	1:A:503:PHE:HD1	1:A:541:SER:H	5	0.13
(1,2240)	1:A:503:PHE:HD2	1:A:541:SER:H	5	0.13
(1,2231)	1:A:503:PHE:HB3	1:A:542:GLY:H	10	0.13
(1,2157)	1:A:500:LEU:HD11	1:A:580:SER:H	7	0.13
(1,2157)	1:A:500:LEU:HD12	1:A:580:SER:H	7	0.13
(1,2157)	1:A:500:LEU:HD13	1:A:580:SER:H	7	0.13
(1,18)	1:A:375:HIS:HA	1:A:430:ASP:HB2	17	0.13
(1,18)	1:A:375:HIS:HA	1:A:430:ASP:HB3	17	0.13

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1726)	1:A:464:LEU:H	1:A:470:SER:HB2	2	0.13
(1,1726)	1:A:464:LEU:H	1:A:470:SER:HB3	2	0.13
(1,1725)	1:A:464:LEU:H	1:A:470:SER:HA	9	0.13
(1,1628)	1:A:452:LYS:H	1:A:452:LYS:HD2	15	0.13
(1,1628)	1:A:452:LYS:H	1:A:452:LYS:HD3	15	0.13
(1,1298)	1:A:430:ASP:HA	1:A:433:ILE:HD11	18	0.13
(1,1298)	1:A:430:ASP:HA	1:A:433:ILE:HD12	18	0.13
(1,1298)	1:A:430:ASP:HA	1:A:433:ILE:HD13	18	0.13
(3,82)	1:A:553:LEU:H	1:A:549:LYS:O	5	0.12
(3,82)	1:A:553:LEU:H	1:A:549:LYS:O	10	0.12
(3,82)	1:A:553:LEU:H	1:A:549:LYS:O	12	0.12
(3,82)	1:A:553:LEU:H	1:A:549:LYS:O	16	0.12
(3,82)	1:A:553:LEU:H	1:A:549:LYS:O	20	0.12
(3,16)	1:A:397:PHE:H	1:A:393:CYS:O	4	0.12
(2,88)	1:A:573:TYR:HD1	1:A:574:THR:HB	18	0.12
(2,88)	1:A:573:TYR:HD2	1:A:574:THR:HB	18	0.12
(2,80)	1:A:527:THR:HB	1:A:546:TRP:HD1	8	0.12
(2,76)	1:A:509:VAL:H	1:A:540:SER:H	12	0.12
(2,69)	1:A:499:VAL:HB	1:A:583:GLN:H	10	0.12
(2,35)	1:A:407:GLU:HB2	1:A:474:PHE:HE1	9	0.12
(2,35)	1:A:407:GLU:HB2	1:A:474:PHE:HE2	9	0.12
(2,35)	1:A:407:GLU:HB3	1:A:474:PHE:HE1	9	0.12
(2,35)	1:A:407:GLU:HB3	1:A:474:PHE:HE2	9	0.12
(2,35)	1:A:407:GLU:HB2	1:A:474:PHE:HE1	16	0.12
(2,35)	1:A:407:GLU:HB2	1:A:474:PHE:HE2	16	0.12
(2,35)	1:A:407:GLU:HB3	1:A:474:PHE:HE1	16	0.12
(2,35)	1:A:407:GLU:HB3	1:A:474:PHE:HE2	16	0.12
(2,24)	1:A:387:ASP:HB2	1:A:391:MET:HA	4	0.12
(2,24)	1:A:387:ASP:HB3	1:A:391:MET:HA	4	0.12
(2,11)	1:A:382:MET:HE1	1:A:412:MET:H	15	0.12
(2,11)	1:A:382:MET:HE2	1:A:412:MET:H	15	0.12
(2,11)	1:A:382:MET:HE3	1:A:412:MET:H	15	0.12
(1,682)	1:A:399:VAL:HG21	1:A:440:PHE:HD1	7	0.12
(1,682)	1:A:399:VAL:HG21	1:A:440:PHE:HD2	7	0.12
(1,682)	1:A:399:VAL:HG22	1:A:440:PHE:HD1	7	0.12
(1,682)	1:A:399:VAL:HG22	1:A:440:PHE:HD2	7	0.12
(1,682)	1:A:399:VAL:HG23	1:A:440:PHE:HD1	7	0.12
(1,682)	1:A:399:VAL:HG23	1:A:440:PHE:HD2	7	0.12
(1,668)	1:A:399:VAL:HB	1:A:556:LEU:HD11	18	0.12
(1,668)	1:A:399:VAL:HB	1:A:556:LEU:HD12	18	0.12
(1,668)	1:A:399:VAL:HB	1:A:556:LEU:HD13	18	0.12
(1,576)	1:A:395:ARG:HA	1:A:556:LEU:HD11	20	0.12

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,576)	1:A:395:ARG:HA	1:A:556:LEU:HD12	20	0.12
(1,576)	1:A:395:ARG:HA	1:A:556:LEU:HD13	20	0.12
(1,576)	1:A:395:ARG:HA	1:A:556:LEU:HD21	20	0.12
(1,576)	1:A:395:ARG:HA	1:A:556:LEU:HD22	20	0.12
(1,576)	1:A:395:ARG:HA	1:A:556:LEU:HD23	20	0.12
(1,334)	1:A:384:TYR:HD1	1:A:415:LYS:HE2	3	0.12
(1,334)	1:A:384:TYR:HD1	1:A:415:LYS:HE3	3	0.12
(1,334)	1:A:384:TYR:HD2	1:A:415:LYS:HE2	3	0.12
(1,334)	1:A:384:TYR:HD2	1:A:415:LYS:HE3	3	0.12
(1,3137)	1:A:556:LEU:HD11	1:A:577:LEU:HA	18	0.12
(1,3137)	1:A:556:LEU:HD12	1:A:577:LEU:HA	18	0.12
(1,3137)	1:A:556:LEU:HD13	1:A:577:LEU:HA	18	0.12
(1,3137)	1:A:556:LEU:HD21	1:A:577:LEU:HA	18	0.12
(1,3137)	1:A:556:LEU:HD22	1:A:577:LEU:HA	18	0.12
(1,3137)	1:A:556:LEU:HD23	1:A:577:LEU:HA	18	0.12
(1,3122)	1:A:556:LEU:HA	1:A:559:LEU:HG	15	0.12
(1,3019)	1:A:547:ASP:HA	1:A:552:ALA:H	4	0.12
(1,2927)	1:A:532:PHE:HB2	1:A:534:GLY:HA2	19	0.12
(1,2927)	1:A:532:PHE:HB2	1:A:534:GLY:HA3	19	0.12
(1,2927)	1:A:532:PHE:HB3	1:A:534:GLY:HA2	19	0.12
(1,2927)	1:A:532:PHE:HB3	1:A:534:GLY:HA3	19	0.12
(1,2879)	1:A:530:LYS:HD2	1:A:586:SER:HA	6	0.12
(1,2879)	1:A:530:LYS:HD3	1:A:586:SER:HA	6	0.12
(1,2869)	1:A:530:LYS:HB2	1:A:530:LYS:HE2	15	0.12
(1,2869)	1:A:530:LYS:HB2	1:A:530:LYS:HE3	15	0.12
(1,2869)	1:A:530:LYS:HB3	1:A:530:LYS:HE2	15	0.12
(1,2869)	1:A:530:LYS:HB3	1:A:530:LYS:HE3	15	0.12
(1,2869)	1:A:530:LYS:HB2	1:A:530:LYS:HE2	20	0.12
(1,2869)	1:A:530:LYS:HB2	1:A:530:LYS:HE3	20	0.12
(1,2869)	1:A:530:LYS:HB3	1:A:530:LYS:HE2	20	0.12
(1,2869)	1:A:530:LYS:HB3	1:A:530:LYS:HE3	20	0.12
(1,242)	1:A:382:MET:HE1	1:A:413:LYS:HG2	2	0.12
(1,242)	1:A:382:MET:HE1	1:A:413:LYS:HG3	2	0.12
(1,242)	1:A:382:MET:HE2	1:A:413:LYS:HG2	2	0.12
(1,242)	1:A:382:MET:HE2	1:A:413:LYS:HG3	2	0.12
(1,242)	1:A:382:MET:HE3	1:A:413:LYS:HG2	2	0.12
(1,242)	1:A:382:MET:HE3	1:A:413:LYS:HG3	2	0.12
(1,2357)	1:A:508:GLU:H	1:A:540:SER:HB2	8	0.12
(1,2357)	1:A:508:GLU:H	1:A:540:SER:HB3	8	0.12
(1,2255)	1:A:504:ASN:H	1:A:541:SER:H	6	0.12
(1,2255)	1:A:504:ASN:H	1:A:541:SER:H	20	0.12
(1,2240)	1:A:503:PHE:HD1	1:A:541:SER:H	16	0.12

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2240)	1:A:503:PHE:HD2	1:A:541:SER:H	16	0.12
(1,2148)	1:A:500:LEU:HG	1:A:546:TRP:HZ2	12	0.12
(1,1047)	1:A:411:PHE:H	1:A:472:LYS:H	9	0.12
(1,1047)	1:A:411:PHE:H	1:A:472:LYS:H	15	0.12
(3,87)	1:A:558:PHE:H	1:A:554:GLU:O	8	0.11
(3,82)	1:A:553:LEU:H	1:A:549:LYS:O	2	0.11
(3,82)	1:A:553:LEU:H	1:A:549:LYS:O	6	0.11
(3,82)	1:A:553:LEU:H	1:A:549:LYS:O	11	0.11
(3,82)	1:A:553:LEU:H	1:A:549:LYS:O	13	0.11
(3,82)	1:A:553:LEU:H	1:A:549:LYS:O	14	0.11
(3,21)	1:A:403:TYR:H	1:A:401:CYS:O	7	0.11
(3,21)	1:A:403:TYR:H	1:A:401:CYS:O	9	0.11
(2,69)	1:A:499:VAL:HB	1:A:583:GLN:H	2	0.11
(2,66)	1:A:496:PRO:HA	1:A:580:SER:H	11	0.11
(2,35)	1:A:407:GLU:HB2	1:A:474:PHE:HE1	19	0.11
(2,35)	1:A:407:GLU:HB2	1:A:474:PHE:HE2	19	0.11
(2,35)	1:A:407:GLU:HB3	1:A:474:PHE:HE1	19	0.11
(2,35)	1:A:407:GLU:HB3	1:A:474:PHE:HE2	19	0.11
(2,24)	1:A:387:ASP:HB2	1:A:391:MET:HA	7	0.11
(2,24)	1:A:387:ASP:HB3	1:A:391:MET:HA	7	0.11
(2,1)	1:A:373:GLY:H	1:A:374:PRO:HG2	1	0.11
(2,1)	1:A:373:GLY:H	1:A:374:PRO:HG3	1	0.11
(2,1)	1:A:373:GLY:H	1:A:374:PRO:HG2	18	0.11
(2,1)	1:A:373:GLY:H	1:A:374:PRO:HG3	18	0.11
(2,1)	1:A:373:GLY:H	1:A:374:PRO:HG2	19	0.11
(2,1)	1:A:373:GLY:H	1:A:374:PRO:HG3	19	0.11
(1,71)	1:A:378:SER:HB2	1:A:451:SER:H	16	0.11
(1,598)	1:A:396:VAL:HB	1:A:411:PHE:HZ	5	0.11
(1,598)	1:A:396:VAL:HB	1:A:411:PHE:HZ	13	0.11
(1,580)	1:A:395:ARG:HE	1:A:558:PHE:HD1	9	0.11
(1,579)	1:A:395:ARG:HE	1:A:558:PHE:HA	9	0.11
(1,457)	1:A:389:SER:HA	1:A:465:GLU:HB2	18	0.11
(1,457)	1:A:389:SER:HA	1:A:465:GLU:HB3	18	0.11
(1,429)	1:A:388:GLN:H	1:A:390:LYS:H	1	0.11
(1,3359)	1:A:573:TYR:HD1	1:A:575:LEU:HB2	18	0.11
(1,3359)	1:A:573:TYR:HD1	1:A:575:LEU:HB3	18	0.11
(1,3359)	1:A:573:TYR:HD2	1:A:575:LEU:HB2	18	0.11
(1,3359)	1:A:573:TYR:HD2	1:A:575:LEU:HB3	18	0.11
(1,3211)	1:A:563:GLN:HA	1:A:574:THR:HB	6	0.11
(1,3211)	1:A:563:GLN:HA	1:A:574:THR:HB	16	0.11
(1,3188)	1:A:562:TYR:H	1:A:574:THR:HG21	3	0.11
(1,3188)	1:A:562:TYR:H	1:A:574:THR:HG22	3	0.11

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,3188)	1:A:562:TYR:H	1:A:574:THR:HG23	3	0.11
(1,3135)	1:A:556:LEU:HD11	1:A:560:ASN:HA	2	0.11
(1,3135)	1:A:556:LEU:HD12	1:A:560:ASN:HA	2	0.11
(1,3135)	1:A:556:LEU:HD13	1:A:560:ASN:HA	2	0.11
(1,3135)	1:A:556:LEU:HD21	1:A:560:ASN:HA	2	0.11
(1,3135)	1:A:556:LEU:HD22	1:A:560:ASN:HA	2	0.11
(1,3135)	1:A:556:LEU:HD23	1:A:560:ASN:HA	2	0.11
(1,2968)	1:A:543:LEU:HD11	1:A:585:ALA:H	6	0.11
(1,2968)	1:A:543:LEU:HD12	1:A:585:ALA:H	6	0.11
(1,2968)	1:A:543:LEU:HD13	1:A:585:ALA:H	6	0.11
(1,2968)	1:A:543:LEU:HD21	1:A:585:ALA:H	6	0.11
(1,2968)	1:A:543:LEU:HD22	1:A:585:ALA:H	6	0.11
(1,2968)	1:A:543:LEU:HD23	1:A:585:ALA:H	6	0.11
(1,2866)	1:A:530:LYS:HB3	1:A:543:LEU:H	4	0.11
(1,2799)	1:A:527:THR:HG21	1:A:545:GLU:H	11	0.11
(1,2799)	1:A:527:THR:HG22	1:A:545:GLU:H	11	0.11
(1,2799)	1:A:527:THR:HG23	1:A:545:GLU:H	11	0.11
(1,2799)	1:A:527:THR:HG21	1:A:545:GLU:H	13	0.11
(1,2799)	1:A:527:THR:HG22	1:A:545:GLU:H	13	0.11
(1,2799)	1:A:527:THR:HG23	1:A:545:GLU:H	13	0.11
(1,2799)	1:A:527:THR:HG21	1:A:545:GLU:H	20	0.11
(1,2799)	1:A:527:THR:HG22	1:A:545:GLU:H	20	0.11
(1,2799)	1:A:527:THR:HG23	1:A:545:GLU:H	20	0.11
(1,2749)	1:A:524:LYS:HG2	1:A:546:TRP:HZ2	10	0.11
(1,2749)	1:A:524:LYS:HG3	1:A:546:TRP:HZ2	10	0.11
(1,2731)	1:A:524:LYS:H	1:A:551:ASP:HA	13	0.11
(1,2727)	1:A:524:LYS:H	1:A:524:LYS:HE2	3	0.11
(1,2727)	1:A:524:LYS:H	1:A:524:LYS:HE3	3	0.11
(1,2684)	1:A:521:LEU:HB2	1:A:559:LEU:H	12	0.11
(1,2684)	1:A:521:LEU:HB3	1:A:559:LEU:H	12	0.11
(1,2542)	1:A:514:PHE:HE1	1:A:531:VAL:HB	6	0.11
(1,2542)	1:A:514:PHE:HE2	1:A:531:VAL:HB	6	0.11
(1,2542)	1:A:514:PHE:HE1	1:A:531:VAL:HB	17	0.11
(1,2542)	1:A:514:PHE:HE2	1:A:531:VAL:HB	17	0.11
(1,243)	1:A:382:MET:HE1	1:A:418:ALA:HA	18	0.11
(1,243)	1:A:382:MET:HE2	1:A:418:ALA:HA	18	0.11
(1,243)	1:A:382:MET:HE3	1:A:418:ALA:HA	18	0.11
(1,242)	1:A:382:MET:HE1	1:A:413:LYS:HG2	3	0.11
(1,242)	1:A:382:MET:HE1	1:A:413:LYS:HG3	3	0.11
(1,242)	1:A:382:MET:HE2	1:A:413:LYS:HG2	3	0.11
(1,242)	1:A:382:MET:HE2	1:A:413:LYS:HG3	3	0.11
(1,242)	1:A:382:MET:HE3	1:A:413:LYS:HG2	3	0.11

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,242)	1:A:382:MET:HE3	1:A:413:LYS:HG3	3	0.11
(1,242)	1:A:382:MET:HE1	1:A:413:LYS:HG2	13	0.11
(1,242)	1:A:382:MET:HE1	1:A:413:LYS:HG3	13	0.11
(1,242)	1:A:382:MET:HE2	1:A:413:LYS:HG2	13	0.11
(1,242)	1:A:382:MET:HE2	1:A:413:LYS:HG3	13	0.11
(1,242)	1:A:382:MET:HE3	1:A:413:LYS:HG2	13	0.11
(1,242)	1:A:382:MET:HE3	1:A:413:LYS:HG3	13	0.11
(1,2379)	1:A:509:VAL:HG11	1:A:513:ASN:H	11	0.11
(1,2379)	1:A:509:VAL:HG12	1:A:513:ASN:H	11	0.11
(1,2379)	1:A:509:VAL:HG13	1:A:513:ASN:H	11	0.11
(1,2358)	1:A:508:GLU:H	1:A:564:MET:HE1	5	0.11
(1,2358)	1:A:508:GLU:H	1:A:564:MET:HE2	5	0.11
(1,2358)	1:A:508:GLU:H	1:A:564:MET:HE3	5	0.11
(1,2249)	1:A:503:PHE:HE1	1:A:542:GLY:HA2	1	0.11
(1,2249)	1:A:503:PHE:HE1	1:A:542:GLY:HA3	1	0.11
(1,2249)	1:A:503:PHE:HE2	1:A:542:GLY:HA2	1	0.11
(1,2249)	1:A:503:PHE:HE2	1:A:542:GLY:HA3	1	0.11
(1,2249)	1:A:503:PHE:HE1	1:A:542:GLY:HA2	3	0.11
(1,2249)	1:A:503:PHE:HE1	1:A:542:GLY:HA3	3	0.11
(1,2249)	1:A:503:PHE:HE2	1:A:542:GLY:HA2	3	0.11
(1,2249)	1:A:503:PHE:HE2	1:A:542:GLY:HA3	3	0.11
(1,2249)	1:A:503:PHE:HE1	1:A:542:GLY:HA2	6	0.11
(1,2249)	1:A:503:PHE:HE1	1:A:542:GLY:HA3	6	0.11
(1,2249)	1:A:503:PHE:HE2	1:A:542:GLY:HA2	6	0.11
(1,2249)	1:A:503:PHE:HE2	1:A:542:GLY:HA3	6	0.11
(1,2240)	1:A:503:PHE:HD1	1:A:541:SER:H	7	0.11
(1,2240)	1:A:503:PHE:HD2	1:A:541:SER:H	7	0.11
(1,2231)	1:A:503:PHE:HB3	1:A:542:GLY:H	9	0.11
(1,2079)	1:A:497:SER:HB2	1:A:579:PHE:HD1	6	0.11
(1,2079)	1:A:497:SER:HB2	1:A:579:PHE:HD2	6	0.11
(1,2079)	1:A:497:SER:HB3	1:A:579:PHE:HD1	6	0.11
(1,2079)	1:A:497:SER:HB3	1:A:579:PHE:HD2	6	0.11
(1,1937)	1:A:483:SER:H	1:A:488:ALA:HA	8	0.11
(1,1937)	1:A:483:SER:H	1:A:488:ALA:HA	9	0.11
(1,1900)	1:A:480:ASN:HB2	1:A:482:PHE:H	12	0.11
(1,1900)	1:A:480:ASN:HB3	1:A:482:PHE:H	12	0.11
(1,1899)	1:A:480:ASN:HA	1:A:481:ARG:HG2	15	0.11
(1,1899)	1:A:480:ASN:HA	1:A:481:ARG:HG3	15	0.11
(1,18)	1:A:375:HIS:HA	1:A:430:ASP:HB2	8	0.11
(1,18)	1:A:375:HIS:HA	1:A:430:ASP:HB3	8	0.11
(1,1725)	1:A:464:LEU:H	1:A:470:SER:HA	11	0.11
(1,1462)	1:A:440:PHE:HE1	1:A:445:LYS:HE2	3	0.11

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1462)	1:A:440:PHE:HE1	1:A:445:LYS:HE3	3	0.11
(1,1462)	1:A:440:PHE:HE2	1:A:445:LYS:HE2	3	0.11
(1,1462)	1:A:440:PHE:HE2	1:A:445:LYS:HE3	3	0.11
(1,117)	1:A:380:VAL:HG21	1:A:451:SER:H	11	0.11
(1,117)	1:A:380:VAL:HG22	1:A:451:SER:H	11	0.11
(1,117)	1:A:380:VAL:HG23	1:A:451:SER:H	11	0.11
(1,1090)	1:A:412:MET:HE1	1:A:419:ALA:HB1	15	0.11
(1,1090)	1:A:412:MET:HE1	1:A:419:ALA:HB2	15	0.11
(1,1090)	1:A:412:MET:HE1	1:A:419:ALA:HB3	15	0.11
(1,1090)	1:A:412:MET:HE2	1:A:419:ALA:HB1	15	0.11
(1,1090)	1:A:412:MET:HE2	1:A:419:ALA:HB2	15	0.11
(1,1090)	1:A:412:MET:HE2	1:A:419:ALA:HB3	15	0.11
(1,1090)	1:A:412:MET:HE3	1:A:419:ALA:HB1	15	0.11
(1,1090)	1:A:412:MET:HE3	1:A:419:ALA:HB2	15	0.11
(1,1090)	1:A:412:MET:HE3	1:A:419:ALA:HB3	15	0.11
(1,1047)	1:A:411:PHE:H	1:A:472:LYS:H	11	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