



wwPDB NMR Structure Validation Summary Report ⓘ

Jul 2, 2020 – 12:54 AM CDT

PDB ID : 2LUZ
Title : Solution NMR Structure of CalU16 from *Micromonospora echinospora*, Northeast Structural Genomics Consortium (NESG) Target MiR12
Authors : Ramelot, T.A.; Yang, Y.; Lee, H.; Pederson, K.; Lee, D.; Kohan, E.; Janjua, H.; Xiao, R.; Acton, T.B.; Everett, J.K.; Wrobel, R.L.; Bingman, C.A.; Singh, S.; Thorson, J.S.; Prestegard, J.H.; Montelione, G.T.; Phillips Jr., G.N.; Kennedy, M.A.; Enzyme Discovery for Natural Product Biosynthesis (NatPro); Northeast Structural Genomics Consortium (NESG)
Deposited on : 2012-06-22

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

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

A user guide is available at

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

with specific help available everywhere you see the ⓘ symbol.

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

Cyrange : Kirchner and Güntert (2011)
NmrClust : Kelley et al. (1996)
MolProbity : 4.02b-467
Percentile statistics : 20171227.v01 (using entries in the PDB archive December 27th 2017)
RCI : v_1n_11_5_13_A (Berjanski et al., 2005)
PANAV : Wang et al. (2010)
ShiftChecker : 2.6.dev1
BMRB Restraints Analysis : v1.2
Ideal geometry (proteins) : Engh & Huber (2001)
Ideal geometry (DNA, RNA) : Parkinson et al. (1996)
Validation Pipeline (wwPDB-VP) : 2.6.dev1

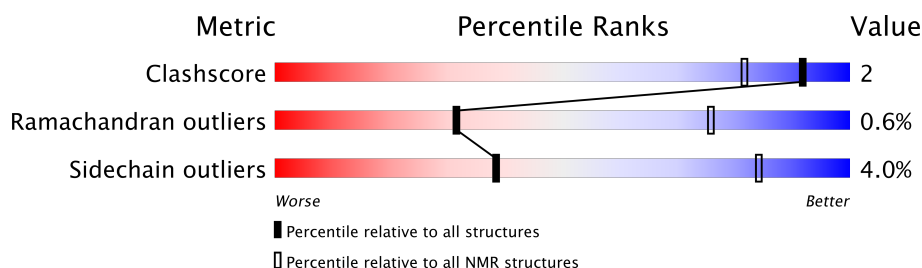
1 Overall quality at a glance

The following experimental techniques were used to determine the structure:

SOLUTION NMR

The overall completeness of chemical shifts assignment is 65%.

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	136327	12091
Ramachandran outliers	132723	10835
Sidechain outliers	132532	10811

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

Mol	Chain	Length	Quality of chain
1	A	192	

2 Ensemble composition and analysis

This entry contains 20 models. Model 16 is the overall representative, medoid model (most similar to other models). The authors have identified model 1 as representative, based on the following criterion: *lowest energy*.

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

Well-defined (core) protein residues			
Well-defined core	Residue range (total)	Backbone RMSD (Å)	Medoid model
1	A:6-A:141, A:166-A:180 (151)	0.53	16

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

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

The models can be grouped into 3 clusters and 1 single-model cluster was found.

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

3 Entry composition

There is only 1 type of molecule in this entry. The entry contains 2765 atoms, of which 1353 are hydrogens and 0 are deuteriums.

- Molecule 1 is a protein called CalU16.

Mol	Chain	Residues	Atoms						Trace
1	A	182	Total	C	H	N	O	S	0
			2765	875	1353	250	279	8	

There are 10 discrepancies between the modelled and reference sequences:

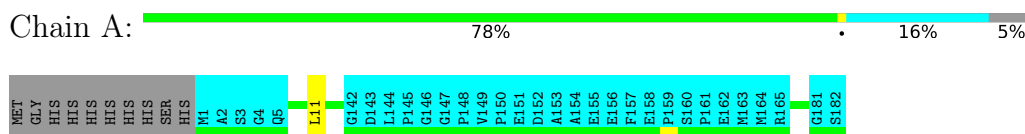
Chain	Residue	Modelled	Actual	Comment	Reference
A	-9	MET	-	EXPRESSION TAG	UNP Q8KNE9
A	-8	GLY	-	EXPRESSION TAG	UNP Q8KNE9
A	-7	HIS	-	EXPRESSION TAG	UNP Q8KNE9
A	-6	HIS	-	EXPRESSION TAG	UNP Q8KNE9
A	-5	HIS	-	EXPRESSION TAG	UNP Q8KNE9
A	-4	HIS	-	EXPRESSION TAG	UNP Q8KNE9
A	-3	HIS	-	EXPRESSION TAG	UNP Q8KNE9
A	-2	HIS	-	EXPRESSION TAG	UNP Q8KNE9
A	-1	SER	-	EXPRESSION TAG	UNP Q8KNE9
A	0	HIS	-	EXPRESSION TAG	UNP Q8KNE9

4 Residue-property plots [i](#)

4.1 Average score per residue in the NMR ensemble

These plots are provided for all protein, RNA and DNA 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.

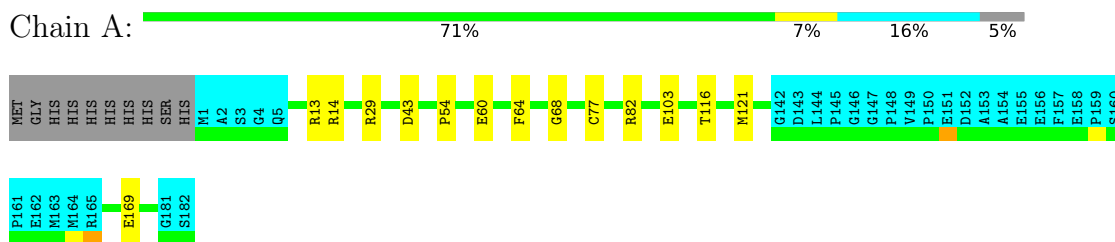
- Molecule 1: CalU16



4.2 Residue scores for the representative (medoid) model from the NMR ensemble

The representative model is number 16. Colouring as in section 4.1 above.

- Molecule 1: CalU16



5 Refinement protocol and experimental data overview

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

Of the 100 calculated structures, 20 were deposited, based on the following criterion: *structures with the lowest energy*.

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

Software name	Classification	Version
CNS	refinement	1.3
CNS	structure solution	1.3
CNS	geometry optimization	1.3
CYANA	refinement	3.0
CYANA	geometry optimization	3.0
CYANA	structure solution	3.0
AutoStructure	refinement	ASDP-1.0
TALOS+	geometry optimization	
PALES	geometry optimization	
FMCGUI	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)	2luz_nmr.cif
Number of chemical shift lists	1
Total number of shifts	2226
Number of shifts mapped to atoms	1416
Number of unparsed shifts	202
Number of shifts with mapping errors	0
Number of shifts with mapping warnings	608
Assignment completeness (well-defined parts)	65%

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	1192	1158	1158	4±2
All	All	23840	23160	23160	75

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 2.

5 of 47 unique clashes are listed below, sorted by their clash magnitude.

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:60:GLU:HB2	1:A:77:CYS:SG	0.65	2.31	6	8
1:A:92:LYS:HG3	1:A:121:MET:SD	0.62	2.33	18	2
1:A:41:CYS:SG	1:A:99:LEU:HD23	0.56	2.40	2	1
1:A:88:VAL:HG13	1:A:93:PRO:HB3	0.53	1.80	8	1
1:A:11:LEU:HB2	1:A:177:LEU:HB3	0.53	1.79	12	2

6.3 Torsion angles [i](#)

6.3.1 Protein backbone [i](#)

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

Mol	Chain	Analysed	Favoured	Allowed	Outliers	Percentiles	
1	A	151/192 (79%)	139±2 (92±2%)	11±2 (8±2%)	1±1 (1±1%)	31	76
All	All	3020/3840 (79%)	2774 (92%)	229 (8%)	17 (1%)	31	76

5 of 11 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	69	ASN	3
1	A	93	PRO	3
1	A	90	GLU	2
1	A	68	GLY	2
1	A	94	ASP	1

6.3.2 Protein sidechains ⓘ

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	124/156 (79%)	119±2 (96±2%)	5±2 (4±2%)	38	84
All	All	2480/3120 (79%)	2380 (96%)	100 (4%)	38	84

5 of 39 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	11	LEU	12
1	A	13	ARG	9
1	A	103	GLU	7
1	A	22	ARG	7
1	A	141	ARG	5

6.3.3 RNA ⓘ

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 carbohydrates 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

The completeness of assignment taking into account all chemical shift lists is 65% for the well-defined parts and 64% for the entire structure.

7.1 Chemical shift list 1

File name: 2luz_nmr.cif

Chemical shift list name: *nef_chemical_shift_list_2luz.mr*

7.1.1 Bookkeeping

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

Total number of shifts	2226
Number of shifts mapped to atoms	1416
Number of unparsed shifts	202
Number of shifts with mapping errors	0
Number of shifts with mapping warnings	608
Number of shift outliers (ShiftChecker)	2

The following errors were found when reading this chemical shift list.

- Chemical shift has been reported more than once. First 5 (of 202) occurrences are reported below.

Shift ID	Chain	Res	Type	Atom	Shift Data		
					Value	Uncertainty	Ambiguity
7	A	1	MET	HE%	2.010	0.020	1
8	A	1	MET	HE%	2.010	0.020	1
17	A	2	ALA	HB%	1.370	0.020	1
18	A	2	ALA	HB%	1.370	0.020	1
55	A	6	ALA	HB%	1.360	0.020	1

The following assigned chemical shifts were not mapped to the molecules present in the coordinate file.

- No matching atoms found in structure. First 5 (of 608) occurrences are reported below.

Chain	Res	Type	Atom	Shift Data		
				Value	Uncertainty	Ambiguity
A	60	GLU	HBy	2.18	0.02	2
A	98	GLU	HGx	2.48	0.02	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Chain	Res	Type	Atom	Shift Data		
				Value	Uncertainty	Ambiguity
A	150	PRO	HDy	3.68	0.02	2
A	17	PRO	HBx	1.99	0.02	2
A	16	ILE	HG1y	1.34	0.02	2

7.1.2 Chemical shift referencing [i](#)

The following table shows the suggested chemical shift referencing corrections.

Nucleus	# values	Correction \pm precision, ppm	Suggested action
$^{13}\text{C}_\alpha$	182	-0.14 ± 0.09	None needed (< 0.5 ppm)
$^{13}\text{C}_\beta$	163	-0.06 ± 0.13	None needed (< 0.5 ppm)
$^{13}\text{C}'$	167	0.15 ± 0.08	None needed (< 0.5 ppm)
^{15}N	169	-0.61 ± 0.35	None needed (imprecise)

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 65%, i.e. 1205 atoms were assigned a chemical shift out of a possible 1867. 22 out of 22 assigned methyl groups (LEU and VAL) were assigned stereospecifically.

	Total	^1H	^{13}C	^{15}N
Backbone	719/741 (97%)	281/295 (95%)	294/302 (97%)	144/144 (100%)
Sidechain	388/999 (39%)	54/585 (9%)	311/359 (87%)	23/55 (42%)
Aromatic	98/127 (77%)	48/66 (73%)	43/53 (81%)	7/8 (88%)
Overall	1205/1867 (65%)	383/946 (40%)	648/714 (91%)	174/207 (84%)

7.1.4 Statistically unusual chemical shifts [i](#)

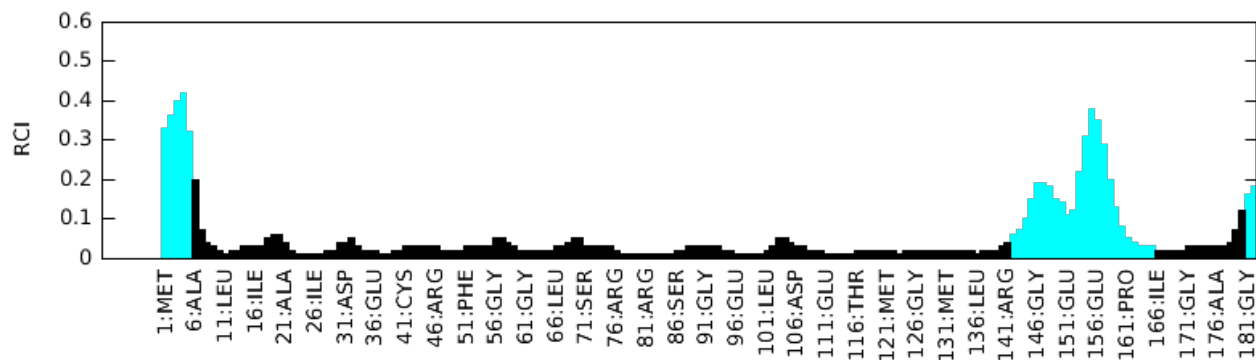
The following table lists the statistically unusual chemical shifts. These are statistical measures, and large deviations from the mean do not necessarily imply incorrect assignments. Molecules containing paramagnetic centres or hemes are expected to give rise to anomalous chemical shifts.

Mol	Chain	Res	Type	Atom	Shift, ppm	Expected range, ppm	Z-score
1	A	80	PRO	HA	2.25	6.05 – 2.75	-6.5
1	A	129	TRP	HE1	12.94	12.85 – 7.35	5.2

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.

Random coil index (RCI) for chain A:



8 NMR restraints analysis

8.1 Conformationally restricting restraints

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

Description	Value
Total distance restraints	2714
Intra-residue ($ i-j =0$)	471
Sequential ($ i-j =1$)	614
Medium range ($ i-j >1$ and $ i-j <5$)	562
Long range ($ i-j \geq 5$)	1067
Inter-chain	0
Total dihedral-angle restraints	222
Total hydrogen bond restraints	384
Total disulfide bond restraints	0
Number of unmapped restraints	0
Number of restraints per residue	14.9
Number of long range restraints per residue	5.9

8.2 Residual restraint violations

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

8.2.1 Average number of distance violations per model

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

Bins (Å)	Average number of violations per model	Max (Å)
0.1-0.2 (Small)	22.9	0.2
0.2-0.5 (Medium)	6.0	0.47
>0.5 (Large)	None	None

8.2.2 Average number of dihedral-angle violations per model

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

Bins (°)	Average number of violations per model	Max (°)
1.0-10.0 (Small)	17.3	9.7
10.0-20.0 (Medium)	0.1	15.2
>20.0 (Large)	None	None

9 Distance violation analysis

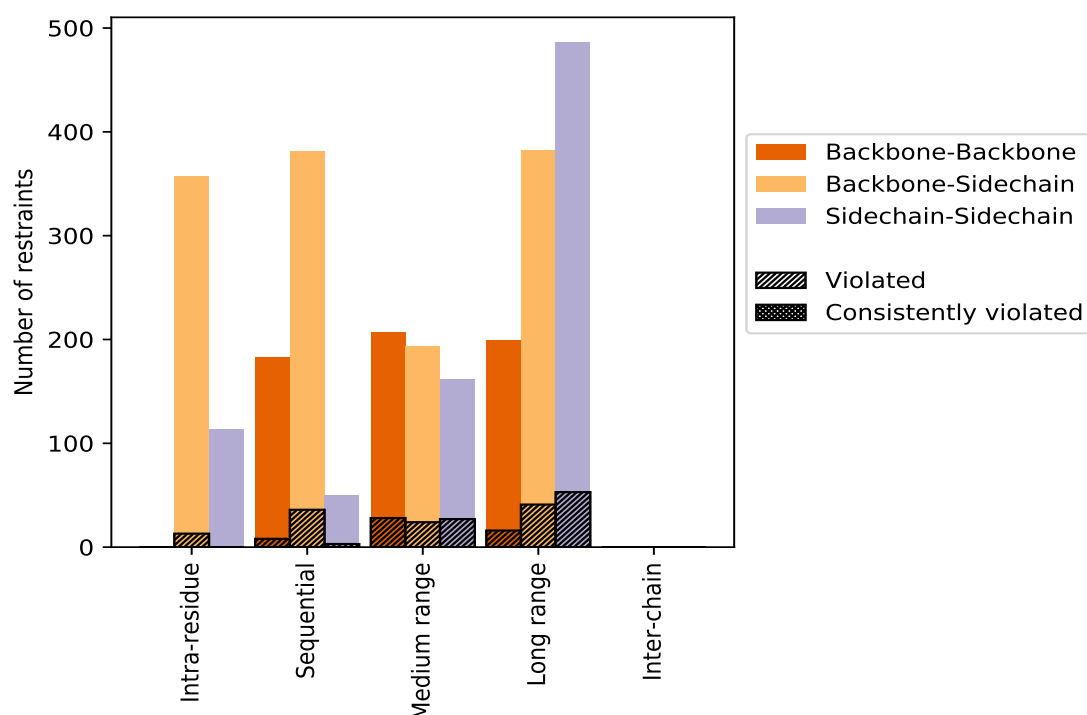
9.1 Summary of distance violations

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

Restrains type	Count	% ¹	Violated ³			Consistently Violated ⁴		
			Count	% ²	% ¹	Count	% ²	% ¹
Intra-residue ($i-j =0$)	471	17.4	13	2.8	0.5	0	0.0	0.0
Backbone-Backbone	1	0.0	0	0.0	0.0	0	0.0	0.0
Backbone-Sidechain	357	13.2	13	3.6	0.5	0	0.0	0.0
Sidechain-Sidechain	113	4.2	0	0.0	0.0	0	0.0	0.0
Sequential ($i-j =1$)	614	22.6	47	7.7	1.7	0	0.0	0.0
Backbone-Backbone	183	6.7	8	4.4	0.3	0	0.0	0.0
Backbone-Sidechain	381	14.0	36	9.4	1.3	0	0.0	0.0
Sidechain-Sidechain	50	1.8	3	6.0	0.1	0	0.0	0.0
Medium range ($i-j >1$ & $i-j <5$)	562	20.7	79	14.1	2.9	0	0.0	0.0
Backbone-Backbone	207	7.6	28	13.5	1.0	0	0.0	0.0
Backbone-Sidechain	193	7.1	24	12.4	0.9	0	0.0	0.0
Sidechain-Sidechain	162	6.0	27	16.7	1.0	0	0.0	0.0
Long range ($i-j \geq 5$)	1067	39.3	110	10.3	4.1	0	0.0	0.0
Backbone-Backbone	199	7.3	16	8.0	0.6	0	0.0	0.0
Backbone-Sidechain	382	14.1	41	10.7	1.5	0	0.0	0.0
Sidechain-Sidechain	486	17.9	53	10.9	2.0	0	0.0	0.0
Inter-chain	0	0.0	0	0.0	0.0	0	0.0	0.0
Backbone-Backbone	0	0.0	0	0.0	0.0	0	0.0	0.0
Backbone-Sidechain	0	0.0	0	0.0	0.0	0	0.0	0.0
Sidechain-Sidechain	0	0.0	0	0.0	0.0	0	0.0	0.0
Total	2714	100.0	249	9.2	9.2	0	0.0	0.0
Backbone-Backbone	590	21.7	52	8.8	1.9	0	0.0	0.0
Backbone-Sidechain	1313	48.4	114	8.7	4.2	0	0.0	0.0
Sidechain-Sidechain	811	29.9	83	10.2	3.1	0	0.0	0.0

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

9.1.1 Bar chart : Distribution of distance restraints and violations



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

9.2 Distance violation statistics for each model

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)
	IR ¹	SQ ²	MR ³	LR ⁴	IC ⁵	Total			
1	0	4	10	8	0	22	0.17	0.37	0.07
2	3	6	4	11	0	24	0.17	0.39	0.07
3	1	12	14	11	0	38	0.19	0.46	0.1
4	2	5	5	14	0	26	0.16	0.37	0.06
5	2	8	9	15	0	34	0.17	0.32	0.06
6	1	1	4	17	0	23	0.15	0.3	0.05
7	0	3	6	7	0	16	0.13	0.19	0.02
8	2	7	3	17	0	29	0.17	0.41	0.06
9	4	9	11	8	0	32	0.18	0.47	0.08
10	0	7	13	7	0	27	0.15	0.26	0.04
11	1	6	8	12	0	27	0.17	0.35	0.07
12	3	7	8	14	0	32	0.16	0.31	0.05

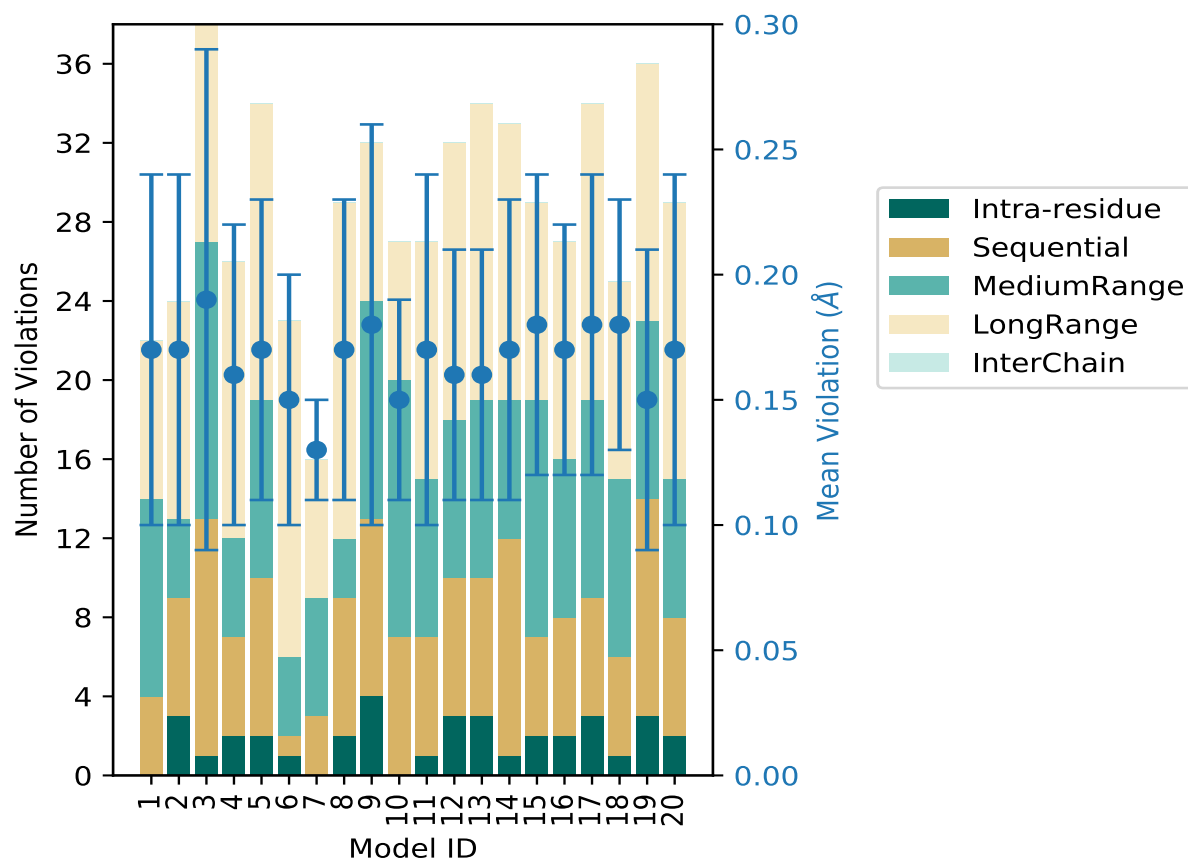
Continued on next page...

Continued from previous page...

Model ID	Number of violations						Mean (Å)	Max (Å)	SD ⁶ (Å)
	IR ¹	SQ ²	MR ³	LR ⁴	IC ⁵	Total			
13	3	7	9	15	0	34	0.16	0.42	0.05
14	1	11	7	14	0	33	0.17	0.3	0.06
15	2	5	12	10	0	29	0.18	0.43	0.06
16	2	6	8	11	0	27	0.17	0.29	0.05
17	3	6	10	15	0	34	0.18	0.35	0.06
18	1	5	9	10	0	25	0.18	0.29	0.05
19	3	11	9	13	0	36	0.15	0.38	0.06
20	2	6	7	14	0	29	0.17	0.39	0.07

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

9.2.1 Bar graph : Distance Violation statistics for each model



The mean and the standard deviation are shown in blue with respect to the y axis on the right

9.3 Distance violation statistics for the ensemble

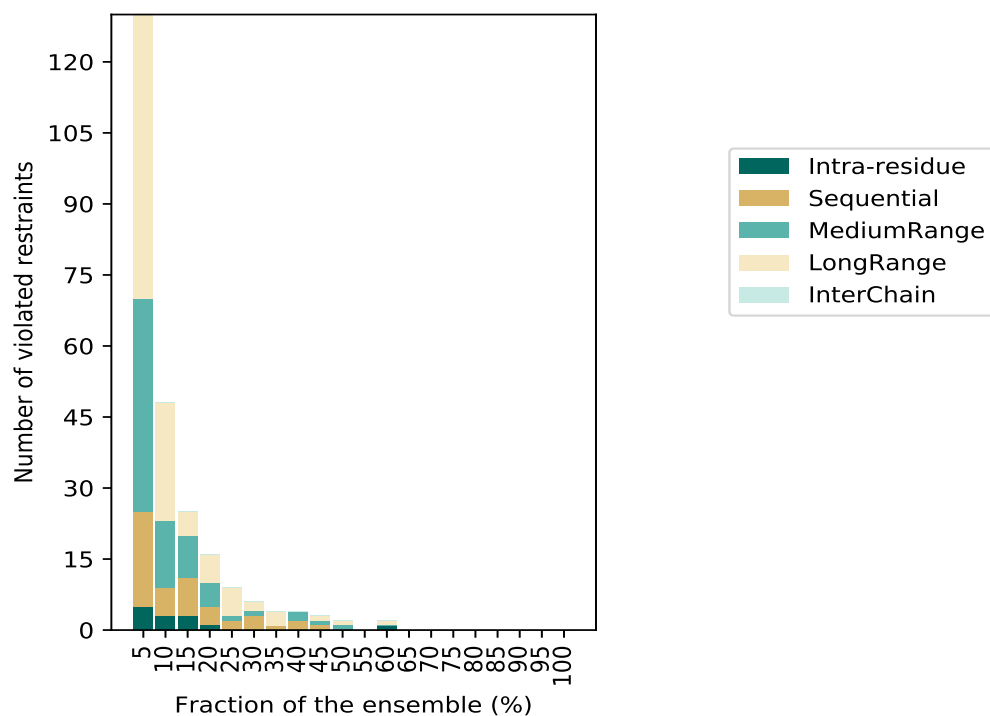
Violation analysis may find that some restraints are violated in few models and some are violated in most of models. The following table provides this information as number of violated restraints for a given fraction of the ensemble. In total, 2465(IR:458, SQ:567, MR:483, LR:957, IC:0) restraints are 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	%
5	20	45	60	0	130	1	5.0
3	6	14	25	0	48	2	10.0
3	8	9	5	0	25	3	15.0
1	4	5	6	0	16	4	20.0
0	2	1	6	0	9	5	25.0
0	3	1	2	0	6	6	30.0
0	1	0	3	0	4	7	35.0
0	2	2	0	0	4	8	40.0
0	1	1	1	0	3	9	45.0
0	0	1	1	0	2	10	50.0
0	0	0	0	0	0	11	55.0
1	0	0	1	0	2	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	0	0	0	20	100.0

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

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

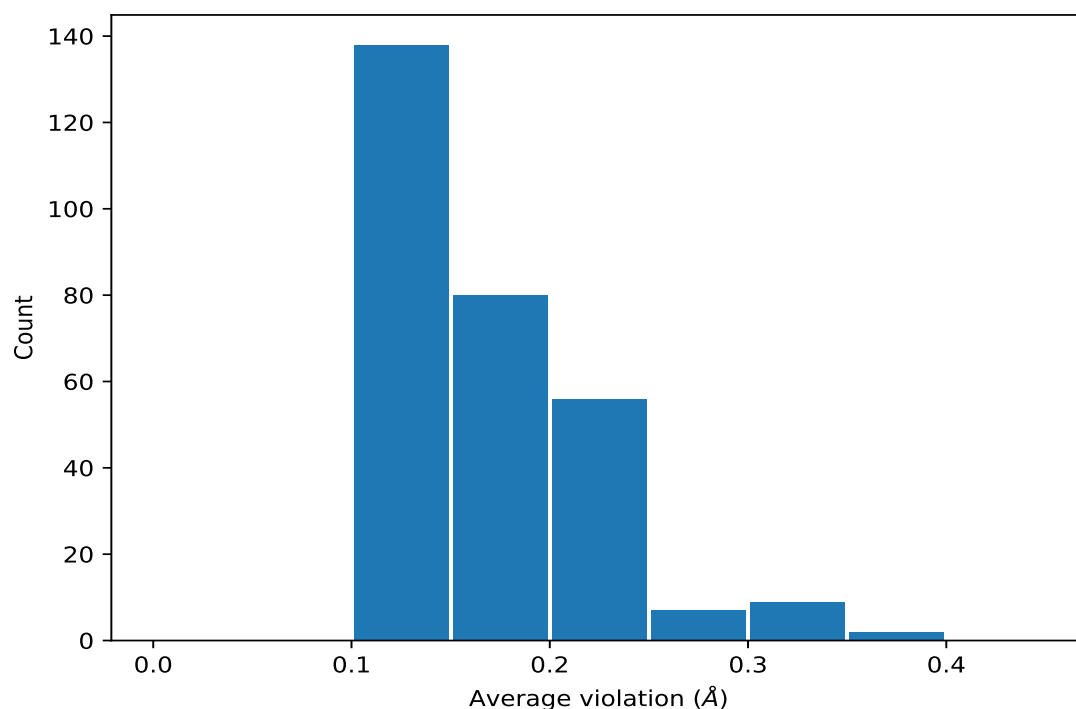
9.3.1 Bar graph : Distance violation statistics for the ensemble



9.4 Most violated distance restraints in the ensemble

9.4.1 Histogram : Distribution of mean distance violations

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

The following table provides the mean and the standard deviation of the absolute value 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)
(1,2703)	1:A:179:HIS:H	1:A:179:HIS:HB3	12	0.12	0.01
(1,15)	1:A:22:ARG:H	1:A:116:THR:O	12	0.17	0.03
(1,801)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:110:LEU:HG	10	0.19	0.04
(1,801)	1:A:30:TYR:HD2	1:A:110:LEU:HG	10	0.19	0.04
(1,137)	1:A:130:GLU:H	1:A:126:GLY:O	10	0.17	0.03
(1,882)	1:A:34:VAL:HB	1:A:103:GLU:HG2	9	0.16	0.05
(1,882)	1:A:34:VAL:HB	1:A:103:GLU:HG3	9	0.16	0.05
(1,1850)	1:A:103:GLU:HB2	1:A:105:GLY:H	9	0.21	0.06
(1,1850)	1:A:103:GLU:HB3	1:A:105:GLY:H	9	0.21	0.06
(1,1849)	1:A:103:GLU:HB2	1:A:104:GLU:H	9	0.24	0.09
(1,1849)	1:A:103:GLU:HB3	1:A:104:GLU:H	9	0.24	0.09
(1,897)	1:A:34:VAL:HG11	1:A:37:VAL:H	8	0.15	0.04
(1,897)	1:A:34:VAL:HG12	1:A:37:VAL:H	8	0.15	0.04
(1,897)	1:A:34:VAL:HG13	1:A:37:VAL:H	8	0.15	0.04
(1,2480)	1:A:161:PRO:HG2	1:A:162:GLU:H	8	0.19	0.05
(1,2480)	1:A:161:PRO:HG3	1:A:162:GLU:H	8	0.19	0.05

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)
(1,179)	1:A:173:ALA:H	1:A:169:GLU:O	8	0.14	0.03
(1,1414)	1:A:67:GLN:HG2	1:A:68:GLY:HA2	8	0.24	0.09
(1,1414)	1:A:67:GLN:HG2	1:A:68:GLY:HA3	8	0.24	0.09
(1,1414)	1:A:67:GLN:HG3	1:A:68:GLY:HA2	8	0.24	0.09
(1,1414)	1:A:67:GLN:HG3	1:A:68:GLY:HA3	8	0.24	0.09
(1,825)	1:A:31:ASP:HA	1:A:107:GLY:H	7	0.18	0.06
(1,461)	1:A:16:ILE:HG12	1:A:21:ALA:H	7	0.19	0.04
(1,461)	1:A:16:ILE:HG13	1:A:21:ALA:H	7	0.19	0.04
(1,29)	1:A:29:ARG:H	1:A:6:ALA:O	7	0.16	0.04
(1,1190)	1:A:50:TRP:HZ3	1:A:51:PHE:HE1	7	0.17	0.06
(1,1190)	1:A:50:TRP:HZ3	1:A:51:PHE:HE2	7	0.17	0.06
(1,51)	1:A:51:PHE:H	1:A:47:ILE:O	6	0.22	0.02
(1,282)	1:A:10:ALA:H	1:A:25:ILE:HD11	6	0.16	0.02
(1,282)	1:A:10:ALA:H	1:A:25:ILE:HD12	6	0.16	0.02
(1,282)	1:A:10:ALA:H	1:A:25:ILE:HD13	6	0.16	0.02
(1,2442)	1:A:155:GLU:HB2	1:A:156:GLU:H	6	0.26	0.11
(1,2442)	1:A:155:GLU:HB3	1:A:156:GLU:H	6	0.26	0.11
(1,2432)	1:A:153:ALA:HB1	1:A:154:ALA:H	6	0.16	0.04
(1,2432)	1:A:153:ALA:HB2	1:A:154:ALA:H	6	0.16	0.04
(1,2432)	1:A:153:ALA:HB3	1:A:154:ALA:H	6	0.16	0.04
(1,1818)	1:A:101:LEU:HD21	1:A:109:LEU:HB2	6	0.16	0.03
(1,1818)	1:A:101:LEU:HD21	1:A:109:LEU:HB3	6	0.16	0.03
(1,1818)	1:A:101:LEU:HD22	1:A:109:LEU:HB2	6	0.16	0.03
(1,1818)	1:A:101:LEU:HD22	1:A:109:LEU:HB3	6	0.16	0.03
(1,1818)	1:A:101:LEU:HD23	1:A:109:LEU:HB2	6	0.16	0.03
(1,1818)	1:A:101:LEU:HD23	1:A:109:LEU:HB3	6	0.16	0.03
(1,1269)	1:A:55:LYS:HB2	1:A:56:GLY:H	6	0.18	0.07
(1,1269)	1:A:55:LYS:HB3	1:A:56:GLY:H	6	0.18	0.07
(1,890)	1:A:34:VAL:HG11	1:A:103:GLU:HG3	5	0.17	0.06
(1,890)	1:A:34:VAL:HG12	1:A:103:GLU:HG3	5	0.17	0.06
(1,890)	1:A:34:VAL:HG13	1:A:103:GLU:HG3	5	0.17	0.06
(1,399)	1:A:14:ARG:HE	1:A:15:THR:H	5	0.21	0.03
(1,2422)	1:A:151:GLU:HG2	1:A:153:ALA:HB1	5	0.19	0.05
(1,2422)	1:A:151:GLU:HG2	1:A:153:ALA:HB2	5	0.19	0.05
(1,2422)	1:A:151:GLU:HG2	1:A:153:ALA:HB3	5	0.19	0.05
(1,2422)	1:A:151:GLU:HG3	1:A:153:ALA:HB1	5	0.19	0.05
(1,2422)	1:A:151:GLU:HG3	1:A:153:ALA:HB2	5	0.19	0.05
(1,2422)	1:A:151:GLU:HG3	1:A:153:ALA:HB3	5	0.19	0.05
(1,1848)	1:A:103:GLU:HG3	1:A:104:GLU:H	5	0.15	0.03
(1,1650)	1:A:87:TRP:HE3	1:A:121:MET:HE1	5	0.13	0.01
(1,1650)	1:A:87:TRP:HE3	1:A:121:MET:HE2	5	0.13	0.01
(1,1650)	1:A:87:TRP:HE3	1:A:121:MET:HE3	5	0.13	0.01

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)
(1,1216)	1:A:52:ILE:HD11	1:A:66:LEU:HA	5	0.18	0.04
(1,1216)	1:A:52:ILE:HD12	1:A:66:LEU:HA	5	0.18	0.04
(1,1216)	1:A:52:ILE:HD13	1:A:66:LEU:HA	5	0.18	0.04
(1,119)	1:A:116:THR:H	1:A:22:ARG:O	5	0.12	0.01
(1,1171)	1:A:50:TRP:HE1	1:A:136:LEU:HG	5	0.14	0.02
(1,101)	1:A:102:SER:H	1:A:109:LEU:O	5	0.14	0.02
(1,928)	1:A:35:ASP:HB2	1:A:38:TRP:HD1	4	0.13	0.01
(1,928)	1:A:35:ASP:HB3	1:A:38:TRP:HD1	4	0.13	0.01
(1,888)	1:A:34:VAL:HG11	1:A:103:GLU:HA	4	0.23	0.1
(1,888)	1:A:34:VAL:HG12	1:A:103:GLU:HA	4	0.23	0.1
(1,888)	1:A:34:VAL:HG13	1:A:103:GLU:HA	4	0.23	0.1
(1,773)	1:A:29:ARG:HD2	1:A:30:TYR:H	4	0.25	0.09
(1,773)	1:A:29:ARG:HD3	1:A:30:TYR:H	4	0.25	0.09
(1,57)	1:A:61:GLY:H	1:A:74:ILE:O	4	0.13	0.01
(1,326)	1:A:11:LEU:HD11	1:A:177:LEU:HD11	4	0.13	0.01
(1,326)	1:A:11:LEU:HD11	1:A:177:LEU:HD12	4	0.13	0.01
(1,326)	1:A:11:LEU:HD11	1:A:177:LEU:HD13	4	0.13	0.01
(1,326)	1:A:11:LEU:HD12	1:A:177:LEU:HD11	4	0.13	0.01
(1,326)	1:A:11:LEU:HD12	1:A:177:LEU:HD12	4	0.13	0.01
(1,326)	1:A:11:LEU:HD12	1:A:177:LEU:HD13	4	0.13	0.01
(1,326)	1:A:11:LEU:HD13	1:A:177:LEU:HD11	4	0.13	0.01
(1,326)	1:A:11:LEU:HD13	1:A:177:LEU:HD12	4	0.13	0.01
(1,326)	1:A:11:LEU:HD13	1:A:177:LEU:HD13	4	0.13	0.01
(1,2664)	1:A:177:LEU:H	1:A:177:LEU:HB3	4	0.12	0.01
(1,2438)	1:A:154:ALA:HB1	1:A:156:GLU:H	4	0.21	0.08
(1,2438)	1:A:154:ALA:HB2	1:A:156:GLU:H	4	0.21	0.08
(1,2438)	1:A:154:ALA:HB3	1:A:156:GLU:H	4	0.21	0.08
(1,2435)	1:A:154:ALA:HB1	1:A:155:GLU:H	4	0.15	0.04
(1,2435)	1:A:154:ALA:HB2	1:A:155:GLU:H	4	0.15	0.04
(1,2435)	1:A:154:ALA:HB3	1:A:155:GLU:H	4	0.15	0.04
(1,2360)	1:A:141:ARG:HB2	1:A:143:ASP:H	4	0.25	0.08
(1,2360)	1:A:141:ARG:HB3	1:A:143:ASP:H	4	0.25	0.08
(1,2354)	1:A:141:ARG:H	1:A:142:GLY:H	4	0.14	0.03
(1,2102)	1:A:123:VAL:HA	1:A:178:VAL:H	4	0.15	0.03
(1,2050)	1:A:120:GLN:HB2	1:A:121:MET:H	4	0.13	0.03
(1,1859)	1:A:104:GLU:HA	1:A:107:GLY:H	4	0.19	0.08
(1,1465)	1:A:73:ASP:HB2	1:A:75:LEU:HD21	4	0.32	0.08
(1,1465)	1:A:73:ASP:HB2	1:A:75:LEU:HD22	4	0.32	0.08
(1,1465)	1:A:73:ASP:HB2	1:A:75:LEU:HD23	4	0.32	0.08
(1,1465)	1:A:73:ASP:HB3	1:A:75:LEU:HD21	4	0.32	0.08
(1,1465)	1:A:73:ASP:HB3	1:A:75:LEU:HD22	4	0.32	0.08
(1,1465)	1:A:73:ASP:HB3	1:A:75:LEU:HD23	4	0.32	0.08

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)
(1,1336)	1:A:62:GLY:H	1:A:74:ILE:HD11	4	0.22	0.06
(1,1336)	1:A:62:GLY:H	1:A:74:ILE:HD12	4	0.22	0.06
(1,1336)	1:A:62:GLY:H	1:A:74:ILE:HD13	4	0.22	0.06
(1,1332)	1:A:61:GLY:H	1:A:74:ILE:HD11	4	0.17	0.05
(1,1332)	1:A:61:GLY:H	1:A:74:ILE:HD12	4	0.17	0.05
(1,1332)	1:A:61:GLY:H	1:A:74:ILE:HD13	4	0.17	0.05
(1,848)	1:A:32:ALA:HB1	1:A:36:GLU:H	3	0.14	0.01
(1,848)	1:A:32:ALA:HB2	1:A:36:GLU:H	3	0.14	0.01
(1,848)	1:A:32:ALA:HB3	1:A:36:GLU:H	3	0.14	0.01
(1,750)	1:A:28:GLN:HB2	1:A:30:TYR:HE1	3	0.23	0.04
(1,750)	1:A:28:GLN:HB2	1:A:30:TYR:HE2	3	0.23	0.04
(1,750)	1:A:28:GLN:HB3	1:A:30:TYR:HE1	3	0.23	0.04
(1,750)	1:A:28:GLN:HB3	1:A:30:TYR:HE2	3	0.23	0.04
(1,746)	1:A:28:GLN:HG3	1:A:29:ARG:H	3	0.15	0.03
(1,689)	1:A:26:ILE:HD11	1:A:28:GLN:HE22	3	0.13	0.01
(1,689)	1:A:26:ILE:HD12	1:A:28:GLN:HE22	3	0.13	0.01
(1,689)	1:A:26:ILE:HD13	1:A:28:GLN:HE22	3	0.13	0.01
(1,549)	1:A:23:SER:HB2	1:A:116:THR:H	3	0.13	0.0
(1,47)	1:A:47:ILE:H	1:A:43:ASP:O	3	0.11	0.0
(1,331)	1:A:11:LEU:HD11	1:A:180:SER:H	3	0.16	0.05
(1,331)	1:A:11:LEU:HD12	1:A:180:SER:H	3	0.16	0.05
(1,331)	1:A:11:LEU:HD13	1:A:180:SER:H	3	0.16	0.05
(1,297)	1:A:11:LEU:H	1:A:11:LEU:HG	3	0.12	0.0
(1,2629)	1:A:174:TRP:HZ3	1:A:177:LEU:HD21	3	0.14	0.03
(1,2629)	1:A:174:TRP:HZ3	1:A:177:LEU:HD22	3	0.14	0.03
(1,2629)	1:A:174:TRP:HZ3	1:A:177:LEU:HD23	3	0.14	0.03
(1,2547)	1:A:166:ILE:HB	1:A:169:GLU:HG2	3	0.17	0.04
(1,2547)	1:A:166:ILE:HB	1:A:169:GLU:HG3	3	0.17	0.04
(1,2531)	1:A:165:ARG:HG2	1:A:166:ILE:H	3	0.14	0.02
(1,2531)	1:A:165:ARG:HG3	1:A:166:ILE:H	3	0.14	0.02
(1,2507)	1:A:164:MET:H	1:A:164:MET:HG2	3	0.35	0.11
(1,2507)	1:A:164:MET:H	1:A:164:MET:HG3	3	0.35	0.11
(1,2458)	1:A:158:GLU:HA	1:A:159:PRO:HD2	3	0.13	0.01
(1,2458)	1:A:158:GLU:HA	1:A:159:PRO:HD3	3	0.13	0.01
(1,2424)	1:A:152:ASP:H	1:A:153:ALA:H	3	0.32	0.12
(1,2419)	1:A:151:GLU:HB2	1:A:153:ALA:HB1	3	0.14	0.0
(1,2419)	1:A:151:GLU:HB2	1:A:153:ALA:HB2	3	0.14	0.0
(1,2419)	1:A:151:GLU:HB2	1:A:153:ALA:HB3	3	0.14	0.0
(1,2419)	1:A:151:GLU:HB3	1:A:153:ALA:HB1	3	0.14	0.0
(1,2419)	1:A:151:GLU:HB3	1:A:153:ALA:HB2	3	0.14	0.0
(1,2419)	1:A:151:GLU:HB3	1:A:153:ALA:HB3	3	0.14	0.0
(1,2383)	1:A:145:PRO:HB2	1:A:146:GLY:H	3	0.21	0.06

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)
(1,2383)	1:A:145:PRO:HB3	1:A:146:GLY:H	3	0.21	0.06
(1,2363)	1:A:142:GLY:H	1:A:143:ASP:H	3	0.13	0.03
(1,2126)	1:A:123:VAL:HG21	1:A:179:HIS:HD2	3	0.19	0.05
(1,2126)	1:A:123:VAL:HG22	1:A:179:HIS:HD2	3	0.19	0.05
(1,2126)	1:A:123:VAL:HG23	1:A:179:HIS:HD2	3	0.19	0.05
(1,196)	1:A:5:GLN:HA	1:A:6:ALA:H	3	0.2	0.03
(1,191)	1:A:179:HIS:H	1:A:175:ALA:O	3	0.13	0.01
(1,1708)	1:A:92:LYS:HA	1:A:92:LYS:HD2	3	0.21	0.04
(1,1708)	1:A:92:LYS:HA	1:A:92:LYS:HD3	3	0.21	0.04
(1,13)	1:A:21:ALA:H	1:A:14:ARG:O	3	0.15	0.03
(1,123)	1:A:123:VAL:H	1:A:119:GLU:O	3	0.12	0.01
(1,1222)	1:A:52:ILE:HD11	1:A:69:ASN:HA	3	0.21	0.04
(1,1222)	1:A:52:ILE:HD12	1:A:69:ASN:HA	3	0.21	0.04
(1,1222)	1:A:52:ILE:HD13	1:A:69:ASN:HA	3	0.21	0.04
(1,1088)	1:A:44:PRO:HG2	1:A:45:ASN:HB2	3	0.12	0.01
(1,1088)	1:A:44:PRO:HG2	1:A:45:ASN:HB3	3	0.12	0.01
(1,1088)	1:A:44:PRO:HG3	1:A:45:ASN:HB2	3	0.12	0.01
(1,1088)	1:A:44:PRO:HG3	1:A:45:ASN:HB3	3	0.12	0.01
(1,976)	1:A:38:TRP:H	1:A:108:THR:HG21	2	0.13	0.0
(1,976)	1:A:38:TRP:H	1:A:108:THR:HG22	2	0.13	0.0
(1,976)	1:A:38:TRP:H	1:A:108:THR:HG23	2	0.13	0.0
(1,968)	1:A:37:VAL:HG21	1:A:108:THR:HA	2	0.16	0.01
(1,968)	1:A:37:VAL:HG22	1:A:108:THR:HA	2	0.16	0.01
(1,968)	1:A:37:VAL:HG23	1:A:108:THR:HA	2	0.16	0.01
(1,904)	1:A:34:VAL:HG21	1:A:101:LEU:H	2	0.13	0.01
(1,904)	1:A:34:VAL:HG22	1:A:101:LEU:H	2	0.13	0.01
(1,904)	1:A:34:VAL:HG23	1:A:101:LEU:H	2	0.13	0.01
(1,899)	1:A:34:VAL:HG11	1:A:38:TRP:HD1	2	0.17	0.02
(1,899)	1:A:34:VAL:HG12	1:A:38:TRP:HD1	2	0.17	0.02
(1,899)	1:A:34:VAL:HG13	1:A:38:TRP:HD1	2	0.17	0.02
(1,889)	1:A:34:VAL:HG11	1:A:103:GLU:HG2	2	0.14	0.01
(1,889)	1:A:34:VAL:HG12	1:A:103:GLU:HG2	2	0.14	0.01
(1,889)	1:A:34:VAL:HG13	1:A:103:GLU:HG2	2	0.14	0.01
(1,87)	1:A:95:SER:H	1:A:87:TRP:O	2	0.15	0.0
(1,862)	1:A:33:PRO:HG3	1:A:36:GLU:H	2	0.11	0.0
(1,805)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:137:GLY:HA3	2	0.14	0.03
(1,805)	1:A:30:TYR:HD2	1:A:137:GLY:HA3	2	0.14	0.03
(1,772)	1:A:29:ARG:HD2	1:A:109:LEU:HD11	2	0.17	0.04
(1,772)	1:A:29:ARG:HD2	1:A:109:LEU:HD12	2	0.17	0.04
(1,772)	1:A:29:ARG:HD2	1:A:109:LEU:HD13	2	0.17	0.04
(1,772)	1:A:29:ARG:HD3	1:A:109:LEU:HD11	2	0.17	0.04
(1,772)	1:A:29:ARG:HD3	1:A:109:LEU:HD12	2	0.17	0.04

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)
(1,772)	1:A:29:ARG:HD3	1:A:109:LEU:HD13	2	0.17	0.04
(1,771)	1:A:29:ARG:HD2	1:A:104:GLU:HG2	2	0.15	0.03
(1,771)	1:A:29:ARG:HD2	1:A:104:GLU:HG3	2	0.15	0.03
(1,771)	1:A:29:ARG:HD3	1:A:104:GLU:HG2	2	0.15	0.03
(1,771)	1:A:29:ARG:HD3	1:A:104:GLU:HG3	2	0.15	0.03
(1,688)	1:A:26:ILE:HD11	1:A:28:GLN:HE21	2	0.14	0.01
(1,688)	1:A:26:ILE:HD12	1:A:28:GLN:HE21	2	0.14	0.01
(1,688)	1:A:26:ILE:HD13	1:A:28:GLN:HE21	2	0.14	0.01
(1,63)	1:A:65:ALA:H	1:A:55:LYS:O	2	0.15	0.04
(1,530)	1:A:22:ARG:HD2	1:A:23:SER:H	2	0.12	0.0
(1,530)	1:A:22:ARG:HD3	1:A:23:SER:H	2	0.12	0.0
(1,446)	1:A:16:ILE:HD11	1:A:117:THR:HG21	2	0.21	0.03
(1,446)	1:A:16:ILE:HD11	1:A:117:THR:HG22	2	0.21	0.03
(1,446)	1:A:16:ILE:HD11	1:A:117:THR:HG23	2	0.21	0.03
(1,446)	1:A:16:ILE:HD12	1:A:117:THR:HG21	2	0.21	0.03
(1,446)	1:A:16:ILE:HD12	1:A:117:THR:HG22	2	0.21	0.03
(1,446)	1:A:16:ILE:HD12	1:A:117:THR:HG23	2	0.21	0.03
(1,446)	1:A:16:ILE:HD13	1:A:117:THR:HG21	2	0.21	0.03
(1,446)	1:A:16:ILE:HD13	1:A:117:THR:HG22	2	0.21	0.03
(1,446)	1:A:16:ILE:HD13	1:A:117:THR:HG23	2	0.21	0.03
(1,43)	1:A:42:THR:H	1:A:38:TRP:O	2	0.13	0.02
(1,407)	1:A:14:ARG:HD2	1:A:15:THR:H	2	0.2	0.05
(1,407)	1:A:14:ARG:HD3	1:A:15:THR:H	2	0.2	0.05
(1,372)	1:A:13:ARG:HA	1:A:13:ARG:HD3	2	0.2	0.01
(1,37)	1:A:39:SER:H	1:A:35:ASP:O	2	0.11	0.0
(1,346)	1:A:11:LEU:HD21	1:A:22:ARG:HG2	2	0.13	0.02
(1,346)	1:A:11:LEU:HD21	1:A:22:ARG:HG3	2	0.13	0.02
(1,346)	1:A:11:LEU:HD22	1:A:22:ARG:HG2	2	0.13	0.02
(1,346)	1:A:11:LEU:HD22	1:A:22:ARG:HG3	2	0.13	0.02
(1,346)	1:A:11:LEU:HD23	1:A:22:ARG:HG2	2	0.13	0.02
(1,346)	1:A:11:LEU:HD23	1:A:22:ARG:HG3	2	0.13	0.02
(1,332)	1:A:11:LEU:HD11	1:A:181:GLY:H	2	0.15	0.04
(1,332)	1:A:11:LEU:HD12	1:A:181:GLY:H	2	0.15	0.04
(1,332)	1:A:11:LEU:HD13	1:A:181:GLY:H	2	0.15	0.04
(1,273)	1:A:9:ARG:HG2	1:A:177:LEU:HD11	2	0.21	0.01
(1,273)	1:A:9:ARG:HG2	1:A:177:LEU:HD12	2	0.21	0.01
(1,273)	1:A:9:ARG:HG2	1:A:177:LEU:HD13	2	0.21	0.01
(1,273)	1:A:9:ARG:HG3	1:A:177:LEU:HD11	2	0.21	0.01
(1,273)	1:A:9:ARG:HG3	1:A:177:LEU:HD12	2	0.21	0.01
(1,273)	1:A:9:ARG:HG3	1:A:177:LEU:HD13	2	0.21	0.01
(1,269)	1:A:9:ARG:HD2	1:A:174:TRP:HE1	2	0.23	0.12
(1,269)	1:A:9:ARG:HD3	1:A:174:TRP:HE1	2	0.23	0.12

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)
(1,2594)	1:A:172:GLU:H	1:A:172:GLU:HG2	2	0.37	0.06
(1,2594)	1:A:172:GLU:H	1:A:172:GLU:HG3	2	0.37	0.06
(1,257)	1:A:9:ARG:HE	1:A:174:TRP:HD1	2	0.14	0.01
(1,2563)	1:A:168:GLN:H	1:A:168:GLN:HE21	2	0.16	0.01
(1,2563)	1:A:168:GLN:H	1:A:168:GLN:HE22	2	0.16	0.01
(1,255)	1:A:9:ARG:HE	1:A:130:GLU:HG2	2	0.13	0.01
(1,255)	1:A:9:ARG:HE	1:A:130:GLU:HG3	2	0.13	0.01
(1,2526)	1:A:165:ARG:HA	1:A:168:GLN:HG2	2	0.15	0.03
(1,2526)	1:A:165:ARG:HA	1:A:168:GLN:HG3	2	0.15	0.03
(1,2502)	1:A:163:MET:HE1	1:A:166:ILE:HD11	2	0.15	0.01
(1,2502)	1:A:163:MET:HE1	1:A:166:ILE:HD12	2	0.15	0.01
(1,2502)	1:A:163:MET:HE1	1:A:166:ILE:HD13	2	0.15	0.01
(1,2502)	1:A:163:MET:HE2	1:A:166:ILE:HD11	2	0.15	0.01
(1,2502)	1:A:163:MET:HE2	1:A:166:ILE:HD12	2	0.15	0.01
(1,2502)	1:A:163:MET:HE2	1:A:166:ILE:HD13	2	0.15	0.01
(1,2502)	1:A:163:MET:HE3	1:A:166:ILE:HD11	2	0.15	0.01
(1,2502)	1:A:163:MET:HE3	1:A:166:ILE:HD12	2	0.15	0.01
(1,2502)	1:A:163:MET:HE3	1:A:166:ILE:HD13	2	0.15	0.01
(1,2430)	1:A:153:ALA:H	1:A:154:ALA:H	2	0.18	0.05
(1,2413)	1:A:150:PRO:HG2	1:A:152:ASP:H	2	0.17	0.01
(1,2413)	1:A:150:PRO:HG3	1:A:152:ASP:H	2	0.17	0.01
(1,2400)	1:A:149:VAL:HB	1:A:150:PRO:HD2	2	0.24	0.12
(1,2400)	1:A:149:VAL:HB	1:A:150:PRO:HD3	2	0.24	0.12
(1,232)	1:A:8:GLU:HB2	1:A:27:ARG:H	2	0.2	0.02
(1,2316)	1:A:138:MET:HE1	1:A:144:LEU:HD11	2	0.13	0.01
(1,2316)	1:A:138:MET:HE1	1:A:144:LEU:HD12	2	0.13	0.01
(1,2316)	1:A:138:MET:HE1	1:A:144:LEU:HD13	2	0.13	0.01
(1,2316)	1:A:138:MET:HE2	1:A:144:LEU:HD11	2	0.13	0.01
(1,2316)	1:A:138:MET:HE2	1:A:144:LEU:HD12	2	0.13	0.01
(1,2316)	1:A:138:MET:HE2	1:A:144:LEU:HD13	2	0.13	0.01
(1,2316)	1:A:138:MET:HE3	1:A:144:LEU:HD11	2	0.13	0.01
(1,2316)	1:A:138:MET:HE3	1:A:144:LEU:HD12	2	0.13	0.01
(1,2316)	1:A:138:MET:HE3	1:A:144:LEU:HD13	2	0.13	0.01
(1,1950)	1:A:112:LEU:HD21	1:A:114:HIS:HB3	2	0.11	0.0
(1,1950)	1:A:112:LEU:HD22	1:A:114:HIS:HB3	2	0.11	0.0
(1,1950)	1:A:112:LEU:HD23	1:A:114:HIS:HB3	2	0.11	0.0
(1,1908)	1:A:109:LEU:HG	1:A:111:GLU:HG2	2	0.15	0.02
(1,1861)	1:A:104:GLU:HB2	1:A:108:THR:H	2	0.17	0.03
(1,1861)	1:A:104:GLU:HB3	1:A:108:THR:H	2	0.17	0.03
(1,1860)	1:A:104:GLU:HB2	1:A:107:GLY:H	2	0.23	0.06
(1,1860)	1:A:104:GLU:HB3	1:A:107:GLY:H	2	0.23	0.06
(1,1787)	1:A:99:LEU:HD11	1:A:112:LEU:H	2	0.15	0.01

Continued on next page...

Continued from previous page...

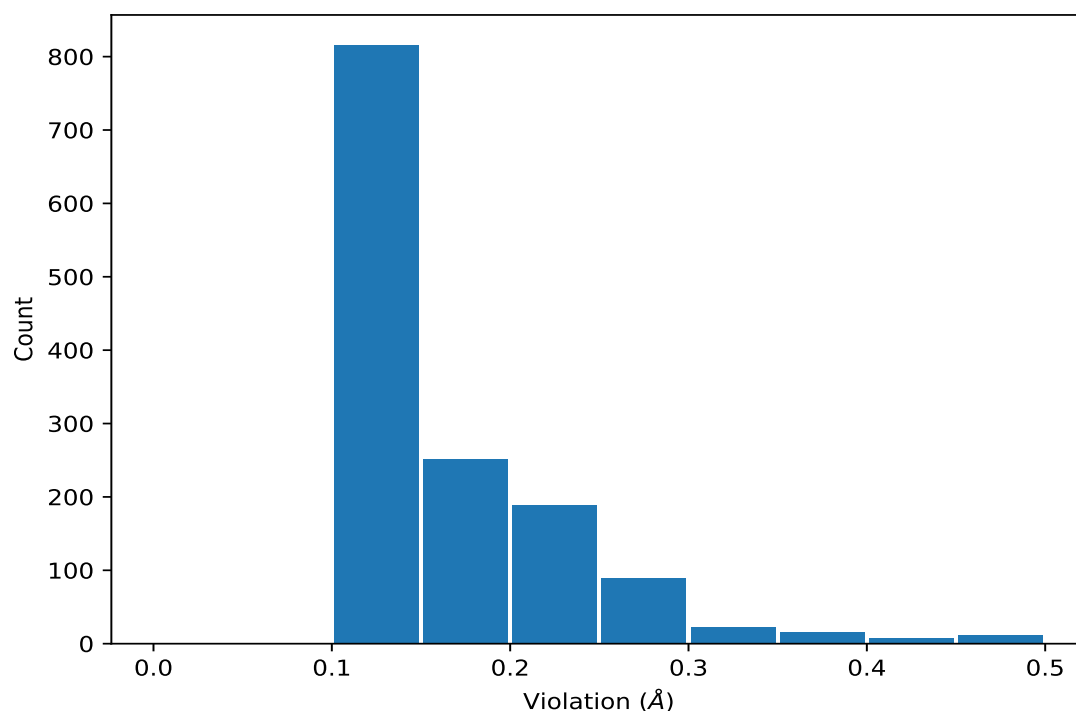
Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)
(1,1787)	1:A:99:LEU:HD12	1:A:112:LEU:H	2	0.15	0.01
(1,1787)	1:A:99:LEU:HD13	1:A:112:LEU:H	2	0.15	0.01
(1,1787)	1:A:99:LEU:HD21	1:A:112:LEU:H	2	0.15	0.01
(1,1787)	1:A:99:LEU:HD22	1:A:112:LEU:H	2	0.15	0.01
(1,1787)	1:A:99:LEU:HD23	1:A:112:LEU:H	2	0.15	0.01
(1,173)	1:A:170:ARG:H	1:A:166:ILE:O	2	0.14	0.01
(1,1649)	1:A:87:TRP:HE1	1:A:89:TYR:HE1	2	0.12	0.0
(1,1649)	1:A:87:TRP:HE1	1:A:89:TYR:HE2	2	0.12	0.0
(1,1571)	1:A:82:ARG:HG2	1:A:99:LEU:H	2	0.14	0.01
(1,1571)	1:A:82:ARG:HG3	1:A:99:LEU:H	2	0.14	0.01
(1,1569)	1:A:82:ARG:HD2	1:A:100:ARG:HB2	2	0.16	0.01
(1,1569)	1:A:82:ARG:HD2	1:A:100:ARG:HB3	2	0.16	0.01
(1,1569)	1:A:82:ARG:HD3	1:A:100:ARG:HB2	2	0.16	0.01
(1,1569)	1:A:82:ARG:HD3	1:A:100:ARG:HB3	2	0.16	0.01
(1,1518)	1:A:76:ARG:HB2	1:A:84:THR:H	2	0.16	0.01
(1,1518)	1:A:76:ARG:HB3	1:A:84:THR:H	2	0.16	0.01
(1,1443)	1:A:71:SER:H	1:A:87:TRP:HA	2	0.13	0.01
(1,1328)	1:A:60:GLU:HG3	1:A:61:GLY:H	2	0.26	0.09
(1,1236)	1:A:52:ILE:HG21	1:A:67:GLN:H	2	0.17	0.05
(1,1236)	1:A:52:ILE:HG22	1:A:67:GLN:H	2	0.17	0.05
(1,1236)	1:A:52:ILE:HG23	1:A:67:GLN:H	2	0.17	0.05
(1,1170)	1:A:50:TRP:H	1:A:51:PHE:H	2	0.11	0.0
(1,1151)	1:A:48:ASN:HB2	1:A:53:GLU:HA	2	0.14	0.03
(1,1151)	1:A:48:ASN:HB3	1:A:53:GLU:HA	2	0.14	0.03

¹Number of violated models, ²Standard deviation

9.5 All distance violations

9.5.1 Histogram : Distribution of distance violations

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

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)
(1,2507)	1:A:164:MET:H	1:A:164:MET:HG2	9	0.47
(1,2507)	1:A:164:MET:H	1:A:164:MET:HG3	9	0.47
(1,1414)	1:A:67:GLN:HG2	1:A:68:GLY:HA2	3	0.46
(1,1414)	1:A:67:GLN:HG2	1:A:68:GLY:HA3	3	0.46
(1,1414)	1:A:67:GLN:HG3	1:A:68:GLY:HA2	3	0.46
(1,1414)	1:A:67:GLN:HG3	1:A:68:GLY:HA3	3	0.46
(1,1465)	1:A:73:ASP:HB2	1:A:75:LEU:HD21	3	0.45
(1,1465)	1:A:73:ASP:HB2	1:A:75:LEU:HD22	3	0.45
(1,1465)	1:A:73:ASP:HB2	1:A:75:LEU:HD23	3	0.45
(1,1465)	1:A:73:ASP:HB3	1:A:75:LEU:HD21	3	0.45
(1,1465)	1:A:73:ASP:HB3	1:A:75:LEU:HD22	3	0.45
(1,1465)	1:A:73:ASP:HB3	1:A:75:LEU:HD23	3	0.45
(1,2594)	1:A:172:GLU:H	1:A:172:GLU:HG2	3	0.43
(1,2594)	1:A:172:GLU:H	1:A:172:GLU:HG3	3	0.43
(1,2424)	1:A:152:ASP:H	1:A:153:ALA:H	15	0.43
(1,2442)	1:A:155:GLU:HB2	1:A:156:GLU:H	13	0.42

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2442)	1:A:155:GLU:HB3	1:A:156:GLU:H	13	0.42
(1,888)	1:A:34:VAL:HG11	1:A:103:GLU:HA	8	0.41
(1,888)	1:A:34:VAL:HG12	1:A:103:GLU:HA	8	0.41
(1,888)	1:A:34:VAL:HG13	1:A:103:GLU:HA	8	0.41
(1,773)	1:A:29:ARG:HD2	1:A:30:TYR:H	20	0.39
(1,773)	1:A:29:ARG:HD3	1:A:30:TYR:H	20	0.39
(1,2424)	1:A:152:ASP:H	1:A:153:ALA:H	9	0.39
(1,1849)	1:A:103:GLU:HB2	1:A:104:GLU:H	2	0.39
(1,1849)	1:A:103:GLU:HB3	1:A:104:GLU:H	2	0.39
(1,2442)	1:A:155:GLU:HB2	1:A:156:GLU:H	3	0.38
(1,2442)	1:A:155:GLU:HB3	1:A:156:GLU:H	3	0.38
(1,1849)	1:A:103:GLU:HB2	1:A:104:GLU:H	19	0.38
(1,1849)	1:A:103:GLU:HB3	1:A:104:GLU:H	19	0.38
(1,2507)	1:A:164:MET:H	1:A:164:MET:HG2	4	0.37
(1,2507)	1:A:164:MET:H	1:A:164:MET:HG3	4	0.37
(1,2360)	1:A:141:ARG:HB2	1:A:143:ASP:H	1	0.37
(1,2360)	1:A:141:ARG:HB3	1:A:143:ASP:H	1	0.37
(1,2400)	1:A:149:VAL:HB	1:A:150:PRO:HD2	3	0.36
(1,2400)	1:A:149:VAL:HB	1:A:150:PRO:HD3	3	0.36
(1,269)	1:A:9:ARG:HD2	1:A:174:TRP:HE1	11	0.35
(1,269)	1:A:9:ARG:HD3	1:A:174:TRP:HE1	11	0.35
(1,1850)	1:A:103:GLU:HB2	1:A:105:GLY:H	17	0.35
(1,1850)	1:A:103:GLU:HB3	1:A:105:GLY:H	17	0.35
(1,1328)	1:A:60:GLU:HG3	1:A:61:GLY:H	11	0.35
(1,1691)	1:A:89:TYR:HE1	1:A:92:LYS:HE2	17	0.34
(1,1691)	1:A:89:TYR:HE1	1:A:92:LYS:HE3	17	0.34
(1,1691)	1:A:89:TYR:HE2	1:A:92:LYS:HE2	17	0.34
(1,1691)	1:A:89:TYR:HE2	1:A:92:LYS:HE3	17	0.34
(1,2658)	1:A:176:ALA:HA	1:A:179:HIS:HB2	5	0.32
(1,2438)	1:A:154:ALA:HB1	1:A:156:GLU:H	2	0.32
(1,2438)	1:A:154:ALA:HB2	1:A:156:GLU:H	2	0.32
(1,2438)	1:A:154:ALA:HB3	1:A:156:GLU:H	2	0.32
(1,2051)	1:A:120:GLN:HB3	1:A:121:MET:H	19	0.32
(1,1859)	1:A:104:GLU:HA	1:A:107:GLY:H	5	0.32
(1,1269)	1:A:55:LYS:HB2	1:A:56:GLY:H	4	0.32
(1,1269)	1:A:55:LYS:HB3	1:A:56:GLY:H	4	0.32
(1,2594)	1:A:172:GLU:H	1:A:172:GLU:HG2	12	0.31
(1,2594)	1:A:172:GLU:H	1:A:172:GLU:HG3	12	0.31
(1,1336)	1:A:62:GLY:H	1:A:74:ILE:HD11	12	0.31
(1,1336)	1:A:62:GLY:H	1:A:74:ILE:HD12	12	0.31
(1,1336)	1:A:62:GLY:H	1:A:74:ILE:HD13	12	0.31
(1,1860)	1:A:104:GLU:HB2	1:A:107:GLY:H	5	0.3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1860)	1:A:104:GLU:HB3	1:A:107:GLY:H	5	0.3
(1,1465)	1:A:73:ASP:HB2	1:A:75:LEU:HD21	6	0.3
(1,1465)	1:A:73:ASP:HB2	1:A:75:LEU:HD22	6	0.3
(1,1465)	1:A:73:ASP:HB2	1:A:75:LEU:HD23	6	0.3
(1,1465)	1:A:73:ASP:HB3	1:A:75:LEU:HD21	6	0.3
(1,1465)	1:A:73:ASP:HB3	1:A:75:LEU:HD22	6	0.3
(1,1465)	1:A:73:ASP:HB3	1:A:75:LEU:HD23	6	0.3
(1,1190)	1:A:50:TRP:HZ3	1:A:51:PHE:HE1	14	0.3
(1,1190)	1:A:50:TRP:HZ3	1:A:51:PHE:HE2	14	0.3
(1,890)	1:A:34:VAL:HG11	1:A:103:GLU:HG3	17	0.29
(1,890)	1:A:34:VAL:HG12	1:A:103:GLU:HG3	17	0.29
(1,890)	1:A:34:VAL:HG13	1:A:103:GLU:HG3	17	0.29
(1,825)	1:A:31:ASP:HA	1:A:107:GLY:H	20	0.29
(1,2710)	1:A:180:SER:H	1:A:180:SER:HB2	14	0.29
(1,2710)	1:A:180:SER:H	1:A:180:SER:HB3	14	0.29
(1,2442)	1:A:155:GLU:HB2	1:A:156:GLU:H	14	0.29
(1,2442)	1:A:155:GLU:HB3	1:A:156:GLU:H	14	0.29
(1,2410)	1:A:150:PRO:HB2	1:A:151:GLU:H	16	0.29
(1,2410)	1:A:150:PRO:HB3	1:A:151:GLU:H	16	0.29
(1,1465)	1:A:73:ASP:HB2	1:A:75:LEU:HD21	18	0.29
(1,1465)	1:A:73:ASP:HB2	1:A:75:LEU:HD22	18	0.29
(1,1465)	1:A:73:ASP:HB2	1:A:75:LEU:HD23	18	0.29
(1,1465)	1:A:73:ASP:HB3	1:A:75:LEU:HD21	18	0.29
(1,1465)	1:A:73:ASP:HB3	1:A:75:LEU:HD22	18	0.29
(1,1465)	1:A:73:ASP:HB3	1:A:75:LEU:HD23	18	0.29
(1,1414)	1:A:67:GLN:HG2	1:A:68:GLY:HA2	1	0.29
(1,1414)	1:A:67:GLN:HG2	1:A:68:GLY:HA3	1	0.29
(1,1414)	1:A:67:GLN:HG3	1:A:68:GLY:HA2	1	0.29
(1,1414)	1:A:67:GLN:HG3	1:A:68:GLY:HA3	1	0.29
(1,882)	1:A:34:VAL:HB	1:A:103:GLU:HG2	11	0.28
(1,882)	1:A:34:VAL:HB	1:A:103:GLU:HG3	11	0.28
(1,397)	1:A:14:ARG:HB3	1:A:16:ILE:HG21	9	0.28
(1,397)	1:A:14:ARG:HB3	1:A:16:ILE:HG22	9	0.28
(1,397)	1:A:14:ARG:HB3	1:A:16:ILE:HG23	9	0.28
(1,394)	1:A:14:ARG:HB2	1:A:16:ILE:HG21	1	0.27
(1,394)	1:A:14:ARG:HB2	1:A:16:ILE:HG22	1	0.27
(1,394)	1:A:14:ARG:HB2	1:A:16:ILE:HG23	1	0.27
(1,2422)	1:A:151:GLU:HG2	1:A:153:ALA:HB1	20	0.27
(1,2422)	1:A:151:GLU:HG2	1:A:153:ALA:HB2	20	0.27
(1,2422)	1:A:151:GLU:HG2	1:A:153:ALA:HB3	20	0.27
(1,2422)	1:A:151:GLU:HG3	1:A:153:ALA:HB1	20	0.27
(1,2422)	1:A:151:GLU:HG3	1:A:153:ALA:HB2	20	0.27

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2422)	1:A:151:GLU:HG3	1:A:153:ALA:HB3	20	0.27
(1,2383)	1:A:145:PRO:HB2	1:A:146:GLY:H	3	0.27
(1,2383)	1:A:145:PRO:HB3	1:A:146:GLY:H	3	0.27
(1,2360)	1:A:141:ARG:HB2	1:A:143:ASP:H	5	0.27
(1,2360)	1:A:141:ARG:HB3	1:A:143:ASP:H	5	0.27
(1,2345)	1:A:140:ILE:HB	1:A:141:ARG:H	14	0.27
(1,1849)	1:A:103:GLU:HB2	1:A:104:GLU:H	3	0.27
(1,1849)	1:A:103:GLU:HB3	1:A:104:GLU:H	3	0.27
(1,801)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:110:LEU:HG	2	0.26
(1,801)	1:A:30:TYR:HD2	1:A:110:LEU:HG	2	0.26
(1,801)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:110:LEU:HG	15	0.26
(1,801)	1:A:30:TYR:HD2	1:A:110:LEU:HG	15	0.26
(1,750)	1:A:28:GLN:HB2	1:A:30:TYR:HE1	10	0.26
(1,750)	1:A:28:GLN:HB2	1:A:30:TYR:HE2	10	0.26
(1,750)	1:A:28:GLN:HB3	1:A:30:TYR:HE1	10	0.26
(1,750)	1:A:28:GLN:HB3	1:A:30:TYR:HE2	10	0.26
(1,2402)	1:A:149:VAL:HB	1:A:152:ASP:H	15	0.26
(1,2126)	1:A:123:VAL:HG21	1:A:179:HIS:HD2	1	0.26
(1,2126)	1:A:123:VAL:HG22	1:A:179:HIS:HD2	1	0.26
(1,2126)	1:A:123:VAL:HG23	1:A:179:HIS:HD2	1	0.26
(1,1850)	1:A:103:GLU:HB2	1:A:105:GLY:H	14	0.26
(1,1850)	1:A:103:GLU:HB3	1:A:105:GLY:H	14	0.26
(1,1708)	1:A:92:LYS:HA	1:A:92:LYS:HD2	9	0.26
(1,1708)	1:A:92:LYS:HA	1:A:92:LYS:HD3	9	0.26
(1,1332)	1:A:61:GLY:H	1:A:74:ILE:HD11	8	0.26
(1,1332)	1:A:61:GLY:H	1:A:74:ILE:HD12	8	0.26
(1,1332)	1:A:61:GLY:H	1:A:74:ILE:HD13	8	0.26
(1,1222)	1:A:52:ILE:HD11	1:A:69:ASN:HA	6	0.26
(1,1222)	1:A:52:ILE:HD12	1:A:69:ASN:HA	6	0.26
(1,1222)	1:A:52:ILE:HD13	1:A:69:ASN:HA	6	0.26
(1,750)	1:A:28:GLN:HB2	1:A:30:TYR:HE1	11	0.25
(1,750)	1:A:28:GLN:HB2	1:A:30:TYR:HE2	11	0.25
(1,750)	1:A:28:GLN:HB3	1:A:30:TYR:HE1	11	0.25
(1,750)	1:A:28:GLN:HB3	1:A:30:TYR:HE2	11	0.25
(1,633)	1:A:25:ILE:HD11	1:A:114:HIS:H	18	0.25
(1,633)	1:A:25:ILE:HD12	1:A:114:HIS:H	18	0.25
(1,633)	1:A:25:ILE:HD13	1:A:114:HIS:H	18	0.25
(1,51)	1:A:51:PHE:H	1:A:47:ILE:O	10	0.25
(1,407)	1:A:14:ARG:HD2	1:A:15:THR:H	9	0.25
(1,407)	1:A:14:ARG:HD3	1:A:15:THR:H	9	0.25
(1,2480)	1:A:161:PRO:HG2	1:A:162:GLU:H	11	0.25
(1,2480)	1:A:161:PRO:HG3	1:A:162:GLU:H	11	0.25

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2438)	1:A:154:ALA:HB1	1:A:156:GLU:H	18	0.25
(1,2438)	1:A:154:ALA:HB2	1:A:156:GLU:H	18	0.25
(1,2438)	1:A:154:ALA:HB3	1:A:156:GLU:H	18	0.25
(1,196)	1:A:5:GLN:HA	1:A:6:ALA:H	14	0.25
(1,825)	1:A:31:ASP:HA	1:A:107:GLY:H	9	0.24
(1,773)	1:A:29:ARG:HD2	1:A:30:TYR:H	5	0.24
(1,773)	1:A:29:ARG:HD3	1:A:30:TYR:H	5	0.24
(1,461)	1:A:16:ILE:HG12	1:A:21:ALA:H	17	0.24
(1,461)	1:A:16:ILE:HG13	1:A:21:ALA:H	17	0.24
(1,399)	1:A:14:ARG:HE	1:A:15:THR:H	16	0.24
(1,399)	1:A:14:ARG:HE	1:A:15:THR:H	20	0.24
(1,2459)	1:A:158:GLU:HA	1:A:159:PRO:HG2	5	0.24
(1,2459)	1:A:158:GLU:HA	1:A:159:PRO:HG3	5	0.24
(1,1850)	1:A:103:GLU:HB2	1:A:105:GLY:H	16	0.24
(1,1850)	1:A:103:GLU:HB3	1:A:105:GLY:H	16	0.24
(1,1850)	1:A:103:GLU:HB2	1:A:105:GLY:H	18	0.24
(1,1850)	1:A:103:GLU:HB3	1:A:105:GLY:H	18	0.24
(1,1849)	1:A:103:GLU:HB2	1:A:104:GLU:H	17	0.24
(1,1849)	1:A:103:GLU:HB3	1:A:104:GLU:H	17	0.24
(1,1336)	1:A:62:GLY:H	1:A:74:ILE:HD11	16	0.24
(1,1336)	1:A:62:GLY:H	1:A:74:ILE:HD12	16	0.24
(1,1336)	1:A:62:GLY:H	1:A:74:ILE:HD13	16	0.24
(1,897)	1:A:34:VAL:HG11	1:A:37:VAL:H	18	0.23
(1,897)	1:A:34:VAL:HG12	1:A:37:VAL:H	18	0.23
(1,897)	1:A:34:VAL:HG13	1:A:37:VAL:H	18	0.23
(1,727)	1:A:27:ARG:HB2	1:A:109:LEU:HD11	13	0.23
(1,727)	1:A:27:ARG:HB2	1:A:109:LEU:HD12	13	0.23
(1,727)	1:A:27:ARG:HB2	1:A:109:LEU:HD13	13	0.23
(1,727)	1:A:27:ARG:HB3	1:A:109:LEU:HD11	13	0.23
(1,727)	1:A:27:ARG:HB3	1:A:109:LEU:HD12	13	0.23
(1,727)	1:A:27:ARG:HB3	1:A:109:LEU:HD13	13	0.23
(1,51)	1:A:51:PHE:H	1:A:47:ILE:O	16	0.23
(1,51)	1:A:51:PHE:H	1:A:47:ILE:O	18	0.23
(1,446)	1:A:16:ILE:HD11	1:A:117:THR:HG21	20	0.23
(1,446)	1:A:16:ILE:HD11	1:A:117:THR:HG22	20	0.23
(1,446)	1:A:16:ILE:HD11	1:A:117:THR:HG23	20	0.23
(1,446)	1:A:16:ILE:HD12	1:A:117:THR:HG21	20	0.23
(1,446)	1:A:16:ILE:HD12	1:A:117:THR:HG22	20	0.23
(1,446)	1:A:16:ILE:HD12	1:A:117:THR:HG23	20	0.23
(1,446)	1:A:16:ILE:HD13	1:A:117:THR:HG21	20	0.23
(1,446)	1:A:16:ILE:HD13	1:A:117:THR:HG22	20	0.23
(1,446)	1:A:16:ILE:HD13	1:A:117:THR:HG23	20	0.23

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2480)	1:A:161:PRO:HG2	1:A:162:GLU:H	12	0.23
(1,2480)	1:A:161:PRO:HG3	1:A:162:GLU:H	12	0.23
(1,2480)	1:A:161:PRO:HG2	1:A:162:GLU:H	14	0.23
(1,2480)	1:A:161:PRO:HG3	1:A:162:GLU:H	14	0.23
(1,2430)	1:A:153:ALA:H	1:A:154:ALA:H	17	0.23
(1,2383)	1:A:145:PRO:HB2	1:A:146:GLY:H	17	0.23
(1,2383)	1:A:145:PRO:HB3	1:A:146:GLY:H	17	0.23
(1,1465)	1:A:73:ASP:HB2	1:A:75:LEU:HD21	9	0.23
(1,1465)	1:A:73:ASP:HB2	1:A:75:LEU:HD22	9	0.23
(1,1465)	1:A:73:ASP:HB2	1:A:75:LEU:HD23	9	0.23
(1,1465)	1:A:73:ASP:HB3	1:A:75:LEU:HD21	9	0.23
(1,1465)	1:A:73:ASP:HB3	1:A:75:LEU:HD22	9	0.23
(1,1465)	1:A:73:ASP:HB3	1:A:75:LEU:HD23	9	0.23
(1,1414)	1:A:67:GLN:HG2	1:A:68:GLY:HA2	20	0.23
(1,1414)	1:A:67:GLN:HG2	1:A:68:GLY:HA3	20	0.23
(1,1414)	1:A:67:GLN:HG3	1:A:68:GLY:HA2	20	0.23
(1,1414)	1:A:67:GLN:HG3	1:A:68:GLY:HA3	20	0.23
(1,1216)	1:A:52:ILE:HD11	1:A:66:LEU:HA	13	0.23
(1,1216)	1:A:52:ILE:HD12	1:A:66:LEU:HA	13	0.23
(1,1216)	1:A:52:ILE:HD13	1:A:66:LEU:HA	13	0.23
(1,61)	1:A:64:PHE:H	1:A:72:GLY:O	14	0.22
(1,51)	1:A:51:PHE:H	1:A:47:ILE:O	15	0.22
(1,461)	1:A:16:ILE:HG12	1:A:21:ALA:H	3	0.22
(1,461)	1:A:16:ILE:HG13	1:A:21:ALA:H	3	0.22
(1,331)	1:A:11:LEU:HD11	1:A:180:SER:H	1	0.22
(1,331)	1:A:11:LEU:HD12	1:A:180:SER:H	1	0.22
(1,331)	1:A:11:LEU:HD13	1:A:180:SER:H	1	0.22
(1,29)	1:A:29:ARG:H	1:A:6:ALA:O	18	0.22
(1,273)	1:A:9:ARG:HG2	1:A:177:LEU:HD11	4	0.22
(1,273)	1:A:9:ARG:HG2	1:A:177:LEU:HD12	4	0.22
(1,273)	1:A:9:ARG:HG2	1:A:177:LEU:HD13	4	0.22
(1,273)	1:A:9:ARG:HG3	1:A:177:LEU:HD11	4	0.22
(1,273)	1:A:9:ARG:HG3	1:A:177:LEU:HD12	4	0.22
(1,273)	1:A:9:ARG:HG3	1:A:177:LEU:HD13	4	0.22
(1,2547)	1:A:166:ILE:HB	1:A:169:GLU:HG2	16	0.22
(1,2547)	1:A:166:ILE:HB	1:A:169:GLU:HG3	16	0.22
(1,2435)	1:A:154:ALA:HB1	1:A:155:GLU:H	8	0.22
(1,2435)	1:A:154:ALA:HB2	1:A:155:GLU:H	8	0.22
(1,2435)	1:A:154:ALA:HB3	1:A:155:GLU:H	8	0.22
(1,2416)	1:A:151:GLU:H	1:A:153:ALA:HB1	16	0.22
(1,2416)	1:A:151:GLU:H	1:A:153:ALA:HB2	16	0.22
(1,2416)	1:A:151:GLU:H	1:A:153:ALA:HB3	16	0.22

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,232)	1:A:8:GLU:HB2	1:A:27:ARG:H	20	0.22
(1,2036)	1:A:119:GLU:HG3	1:A:122:LEU:HD11	15	0.22
(1,2036)	1:A:119:GLU:HG3	1:A:122:LEU:HD12	15	0.22
(1,2036)	1:A:119:GLU:HG3	1:A:122:LEU:HD13	15	0.22
(1,1865)	1:A:104:GLU:HB2	1:A:109:LEU:HD11	17	0.22
(1,1865)	1:A:104:GLU:HB2	1:A:109:LEU:HD12	17	0.22
(1,1865)	1:A:104:GLU:HB2	1:A:109:LEU:HD13	17	0.22
(1,1865)	1:A:104:GLU:HB3	1:A:109:LEU:HD11	17	0.22
(1,1865)	1:A:104:GLU:HB3	1:A:109:LEU:HD12	17	0.22
(1,1865)	1:A:104:GLU:HB3	1:A:109:LEU:HD13	17	0.22
(1,1850)	1:A:103:GLU:HB2	1:A:105:GLY:H	3	0.22
(1,1850)	1:A:103:GLU:HB3	1:A:105:GLY:H	3	0.22
(1,1818)	1:A:101:LEU:HD21	1:A:109:LEU:HB2	8	0.22
(1,1818)	1:A:101:LEU:HD21	1:A:109:LEU:HB3	8	0.22
(1,1818)	1:A:101:LEU:HD22	1:A:109:LEU:HB2	8	0.22
(1,1818)	1:A:101:LEU:HD22	1:A:109:LEU:HB3	8	0.22
(1,1818)	1:A:101:LEU:HD23	1:A:109:LEU:HB2	8	0.22
(1,1818)	1:A:101:LEU:HD23	1:A:109:LEU:HB3	8	0.22
(1,15)	1:A:22:ARG:H	1:A:116:THR:O	2	0.22
(1,137)	1:A:130:GLU:H	1:A:126:GLY:O	12	0.22
(1,137)	1:A:130:GLU:H	1:A:126:GLY:O	18	0.22
(1,1269)	1:A:55:LYS:HB2	1:A:56:GLY:H	3	0.22
(1,1269)	1:A:55:LYS:HB3	1:A:56:GLY:H	3	0.22
(1,1236)	1:A:52:ILE:HG21	1:A:67:GLN:H	14	0.22
(1,1236)	1:A:52:ILE:HG22	1:A:67:GLN:H	14	0.22
(1,1236)	1:A:52:ILE:HG23	1:A:67:GLN:H	14	0.22
(1,1216)	1:A:52:ILE:HD11	1:A:66:LEU:HA	16	0.22
(1,1216)	1:A:52:ILE:HD12	1:A:66:LEU:HA	16	0.22
(1,1216)	1:A:52:ILE:HD13	1:A:66:LEU:HA	16	0.22
(1,882)	1:A:34:VAL:HB	1:A:103:GLU:HG2	18	0.21
(1,882)	1:A:34:VAL:HB	1:A:103:GLU:HG3	18	0.21
(1,825)	1:A:31:ASP:HA	1:A:107:GLY:H	8	0.21
(1,773)	1:A:29:ARG:HD2	1:A:30:TYR:H	10	0.21
(1,773)	1:A:29:ARG:HD3	1:A:30:TYR:H	10	0.21
(1,51)	1:A:51:PHE:H	1:A:47:ILE:O	12	0.21
(1,461)	1:A:16:ILE:HG12	1:A:21:ALA:H	4	0.21
(1,461)	1:A:16:ILE:HG13	1:A:21:ALA:H	4	0.21
(1,461)	1:A:16:ILE:HG12	1:A:21:ALA:H	5	0.21
(1,461)	1:A:16:ILE:HG13	1:A:21:ALA:H	5	0.21
(1,372)	1:A:13:ARG:HA	1:A:13:ARG:HD3	19	0.21
(1,29)	1:A:29:ARG:H	1:A:6:ALA:O	20	0.21
(1,2507)	1:A:164:MET:H	1:A:164:MET:HG2	19	0.21

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2507)	1:A:164:MET:H	1:A:164:MET:HG3	19	0.21
(1,2432)	1:A:153:ALA:HB1	1:A:154:ALA:H	14	0.21
(1,2432)	1:A:153:ALA:HB2	1:A:154:ALA:H	14	0.21
(1,2432)	1:A:153:ALA:HB3	1:A:154:ALA:H	14	0.21
(1,2422)	1:A:151:GLU:HG2	1:A:153:ALA:HB1	15	0.21
(1,2422)	1:A:151:GLU:HG2	1:A:153:ALA:HB2	15	0.21
(1,2422)	1:A:151:GLU:HG2	1:A:153:ALA:HB3	15	0.21
(1,2422)	1:A:151:GLU:HG3	1:A:153:ALA:HB1	15	0.21
(1,2422)	1:A:151:GLU:HG3	1:A:153:ALA:HB2	15	0.21
(1,2422)	1:A:151:GLU:HG3	1:A:153:ALA:HB3	15	0.21
(1,2323)	1:A:139:PHE:HA	1:A:144:LEU:HB3	8	0.21
(1,1848)	1:A:103:GLU:HG3	1:A:104:GLU:H	5	0.21
(1,179)	1:A:173:ALA:H	1:A:169:GLU:O	5	0.21
(1,15)	1:A:22:ARG:H	1:A:116:THR:O	9	0.21
(1,1414)	1:A:67:GLN:HG2	1:A:68:GLY:HA2	11	0.21
(1,1414)	1:A:67:GLN:HG2	1:A:68:GLY:HA3	11	0.21
(1,1414)	1:A:67:GLN:HG3	1:A:68:GLY:HA2	11	0.21
(1,1414)	1:A:67:GLN:HG3	1:A:68:GLY:HA3	11	0.21
(1,1414)	1:A:67:GLN:HG2	1:A:68:GLY:HA2	19	0.21
(1,1414)	1:A:67:GLN:HG2	1:A:68:GLY:HA3	19	0.21
(1,1414)	1:A:67:GLN:HG3	1:A:68:GLY:HA2	19	0.21
(1,1414)	1:A:67:GLN:HG3	1:A:68:GLY:HA3	19	0.21
(1,1327)	1:A:60:GLU:HG2	1:A:61:GLY:H	15	0.21
(1,906)	1:A:34:VAL:HG21	1:A:102:SER:HA	14	0.2
(1,906)	1:A:34:VAL:HG22	1:A:102:SER:HA	14	0.2
(1,906)	1:A:34:VAL:HG23	1:A:102:SER:HA	14	0.2
(1,897)	1:A:34:VAL:HG11	1:A:37:VAL:H	15	0.2
(1,897)	1:A:34:VAL:HG12	1:A:37:VAL:H	15	0.2
(1,897)	1:A:34:VAL:HG13	1:A:37:VAL:H	15	0.2
(1,888)	1:A:34:VAL:HG11	1:A:103:GLU:HA	3	0.2
(1,888)	1:A:34:VAL:HG12	1:A:103:GLU:HA	3	0.2
(1,888)	1:A:34:VAL:HG13	1:A:103:GLU:HA	3	0.2
(1,801)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:110:LEU:HG	16	0.2
(1,801)	1:A:30:TYR:HD2	1:A:110:LEU:HG	16	0.2
(1,772)	1:A:29:ARG:HD2	1:A:109:LEU:HD11	15	0.2
(1,772)	1:A:29:ARG:HD2	1:A:109:LEU:HD12	15	0.2
(1,772)	1:A:29:ARG:HD2	1:A:109:LEU:HD13	15	0.2
(1,772)	1:A:29:ARG:HD3	1:A:109:LEU:HD11	15	0.2
(1,772)	1:A:29:ARG:HD3	1:A:109:LEU:HD12	15	0.2
(1,772)	1:A:29:ARG:HD3	1:A:109:LEU:HD13	15	0.2
(1,2659)	1:A:176:ALA:HA	1:A:179:HIS:HB3	16	0.2
(1,2480)	1:A:161:PRO:HG2	1:A:162:GLU:H	15	0.2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2480)	1:A:161:PRO:HG3	1:A:162:GLU:H	15	0.2
(1,2480)	1:A:161:PRO:HG2	1:A:162:GLU:H	18	0.2
(1,2480)	1:A:161:PRO:HG3	1:A:162:GLU:H	18	0.2
(1,2442)	1:A:155:GLU:HB2	1:A:156:GLU:H	9	0.2
(1,2442)	1:A:155:GLU:HB3	1:A:156:GLU:H	9	0.2
(1,2432)	1:A:153:ALA:HB1	1:A:154:ALA:H	2	0.2
(1,2432)	1:A:153:ALA:HB2	1:A:154:ALA:H	2	0.2
(1,2432)	1:A:153:ALA:HB3	1:A:154:ALA:H	2	0.2
(1,2422)	1:A:151:GLU:HG2	1:A:153:ALA:HB1	2	0.2
(1,2422)	1:A:151:GLU:HG2	1:A:153:ALA:HB2	2	0.2
(1,2422)	1:A:151:GLU:HG2	1:A:153:ALA:HB3	2	0.2
(1,2422)	1:A:151:GLU:HG3	1:A:153:ALA:HB1	2	0.2
(1,2422)	1:A:151:GLU:HG3	1:A:153:ALA:HB2	2	0.2
(1,2422)	1:A:151:GLU:HG3	1:A:153:ALA:HB3	2	0.2
(1,2102)	1:A:123:VAL:HA	1:A:178:VAL:H	8	0.2
(1,1861)	1:A:104:GLU:HB2	1:A:108:THR:H	17	0.2
(1,1861)	1:A:104:GLU:HB3	1:A:108:THR:H	17	0.2
(1,1849)	1:A:103:GLU:HB2	1:A:104:GLU:H	4	0.2
(1,1849)	1:A:103:GLU:HB3	1:A:104:GLU:H	4	0.2
(1,15)	1:A:22:ARG:H	1:A:116:THR:O	20	0.2
(1,1336)	1:A:62:GLY:H	1:A:74:ILE:HD11	6	0.2
(1,1336)	1:A:62:GLY:H	1:A:74:ILE:HD12	6	0.2
(1,1336)	1:A:62:GLY:H	1:A:74:ILE:HD13	6	0.2
(1,1273)	1:A:55:LYS:HD2	1:A:56:GLY:H	8	0.2
(1,1273)	1:A:55:LYS:HD3	1:A:56:GLY:H	8	0.2
(1,899)	1:A:34:VAL:HG11	1:A:38:TRP:HD1	15	0.19
(1,899)	1:A:34:VAL:HG12	1:A:38:TRP:HD1	15	0.19
(1,899)	1:A:34:VAL:HG13	1:A:38:TRP:HD1	15	0.19
(1,801)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:110:LEU:HG	12	0.19
(1,801)	1:A:30:TYR:HD2	1:A:110:LEU:HG	12	0.19
(1,801)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:110:LEU:HG	18	0.19
(1,801)	1:A:30:TYR:HD2	1:A:110:LEU:HG	18	0.19
(1,746)	1:A:28:GLN:HG3	1:A:29:ARG:H	13	0.19
(1,63)	1:A:65:ALA:H	1:A:55:LYS:O	18	0.19
(1,51)	1:A:51:PHE:H	1:A:47:ILE:O	11	0.19
(1,399)	1:A:14:ARG:HE	1:A:15:THR:H	3	0.19
(1,399)	1:A:14:ARG:HE	1:A:15:THR:H	17	0.19
(1,332)	1:A:11:LEU:HD11	1:A:181:GLY:H	9	0.19
(1,332)	1:A:11:LEU:HD12	1:A:181:GLY:H	9	0.19
(1,332)	1:A:11:LEU:HD13	1:A:181:GLY:H	9	0.19
(1,273)	1:A:9:ARG:HG2	1:A:177:LEU:HD11	12	0.19
(1,273)	1:A:9:ARG:HG2	1:A:177:LEU:HD12	12	0.19

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,273)	1:A:9:ARG:HG2	1:A:177:LEU:HD13	12	0.19
(1,273)	1:A:9:ARG:HG3	1:A:177:LEU:HD11	12	0.19
(1,273)	1:A:9:ARG:HG3	1:A:177:LEU:HD12	12	0.19
(1,273)	1:A:9:ARG:HG3	1:A:177:LEU:HD13	12	0.19
(1,2432)	1:A:153:ALA:HB1	1:A:154:ALA:H	9	0.19
(1,2432)	1:A:153:ALA:HB2	1:A:154:ALA:H	9	0.19
(1,2432)	1:A:153:ALA:HB3	1:A:154:ALA:H	9	0.19
(1,2050)	1:A:120:GLN:HB2	1:A:121:MET:H	13	0.19
(1,196)	1:A:5:GLN:HA	1:A:6:ALA:H	7	0.19
(1,1918)	1:A:110:LEU:HG	1:A:111:GLU:H	10	0.19
(1,1849)	1:A:103:GLU:HB2	1:A:104:GLU:H	11	0.19
(1,1849)	1:A:103:GLU:HB3	1:A:104:GLU:H	11	0.19
(1,1849)	1:A:103:GLU:HB2	1:A:104:GLU:H	14	0.19
(1,1849)	1:A:103:GLU:HB3	1:A:104:GLU:H	14	0.19
(1,1708)	1:A:92:LYS:HA	1:A:92:LYS:HD2	12	0.19
(1,1708)	1:A:92:LYS:HA	1:A:92:LYS:HD3	12	0.19
(1,1597)	1:A:84:THR:HG21	1:A:96:GLU:HG3	17	0.19
(1,1597)	1:A:84:THR:HG22	1:A:96:GLU:HG3	17	0.19
(1,1597)	1:A:84:THR:HG23	1:A:96:GLU:HG3	17	0.19
(1,1231)	1:A:52:ILE:HG21	1:A:55:LYS:H	15	0.19
(1,1231)	1:A:52:ILE:HG22	1:A:55:LYS:H	15	0.19
(1,1231)	1:A:52:ILE:HG23	1:A:55:LYS:H	15	0.19
(1,1222)	1:A:52:ILE:HD11	1:A:69:ASN:HA	11	0.19
(1,1222)	1:A:52:ILE:HD12	1:A:69:ASN:HA	11	0.19
(1,1222)	1:A:52:ILE:HD13	1:A:69:ASN:HA	11	0.19
(1,968)	1:A:37:VAL:HG21	1:A:108:THR:HA	15	0.18
(1,968)	1:A:37:VAL:HG22	1:A:108:THR:HA	15	0.18
(1,968)	1:A:37:VAL:HG23	1:A:108:THR:HA	15	0.18
(1,805)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:137:GLY:HA3	17	0.18
(1,805)	1:A:30:TYR:HD2	1:A:137:GLY:HA3	17	0.18
(1,801)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:110:LEU:HG	3	0.18
(1,801)	1:A:30:TYR:HD2	1:A:110:LEU:HG	3	0.18
(1,801)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:110:LEU:HG	5	0.18
(1,801)	1:A:30:TYR:HD2	1:A:110:LEU:HG	5	0.18
(1,771)	1:A:29:ARG:HD2	1:A:104:GLU:HG2	11	0.18
(1,771)	1:A:29:ARG:HD2	1:A:104:GLU:HG3	11	0.18
(1,771)	1:A:29:ARG:HD3	1:A:104:GLU:HG2	11	0.18
(1,771)	1:A:29:ARG:HD3	1:A:104:GLU:HG3	11	0.18
(1,446)	1:A:16:ILE:HD11	1:A:117:THR:HG21	15	0.18
(1,446)	1:A:16:ILE:HD11	1:A:117:THR:HG22	15	0.18
(1,446)	1:A:16:ILE:HD11	1:A:117:THR:HG23	15	0.18
(1,446)	1:A:16:ILE:HD12	1:A:117:THR:HG21	15	0.18

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,446)	1:A:16:ILE:HD12	1:A:117:THR:HG22	15	0.18
(1,446)	1:A:16:ILE:HD12	1:A:117:THR:HG23	15	0.18
(1,446)	1:A:16:ILE:HD13	1:A:117:THR:HG21	15	0.18
(1,446)	1:A:16:ILE:HD13	1:A:117:THR:HG22	15	0.18
(1,446)	1:A:16:ILE:HD13	1:A:117:THR:HG23	15	0.18
(1,399)	1:A:14:ARG:HE	1:A:15:THR:H	8	0.18
(1,372)	1:A:13:ARG:HA	1:A:13:ARG:HD3	9	0.18
(1,2702)	1:A:179:HIS:H	1:A:179:HIS:HB2	5	0.18
(1,2629)	1:A:174:TRP:HZ3	1:A:177:LEU:HD21	9	0.18
(1,2629)	1:A:174:TRP:HZ3	1:A:177:LEU:HD22	9	0.18
(1,2629)	1:A:174:TRP:HZ3	1:A:177:LEU:HD23	9	0.18
(1,2584)	1:A:170:ARG:HA	1:A:170:ARG:HE	13	0.18
(1,2549)	1:A:166:ILE:HD11	1:A:169:GLU:HG2	18	0.18
(1,2549)	1:A:166:ILE:HD11	1:A:169:GLU:HG3	18	0.18
(1,2549)	1:A:166:ILE:HD12	1:A:169:GLU:HG2	18	0.18
(1,2549)	1:A:166:ILE:HD12	1:A:169:GLU:HG3	18	0.18
(1,2549)	1:A:166:ILE:HD13	1:A:169:GLU:HG2	18	0.18
(1,2549)	1:A:166:ILE:HD13	1:A:169:GLU:HG3	18	0.18
(1,2526)	1:A:165:ARG:HA	1:A:168:GLN:HG2	3	0.18
(1,2526)	1:A:165:ARG:HA	1:A:168:GLN:HG3	3	0.18
(1,2413)	1:A:150:PRO:HG2	1:A:152:ASP:H	10	0.18
(1,2413)	1:A:150:PRO:HG3	1:A:152:ASP:H	10	0.18
(1,2360)	1:A:141:ARG:HB2	1:A:143:ASP:H	3	0.18
(1,2360)	1:A:141:ARG:HB3	1:A:143:ASP:H	3	0.18
(1,2354)	1:A:141:ARG:H	1:A:142:GLY:H	9	0.18
(1,1908)	1:A:109:LEU:HG	1:A:111:GLU:HG2	17	0.18
(1,1818)	1:A:101:LEU:HD21	1:A:109:LEU:HB2	13	0.18
(1,1818)	1:A:101:LEU:HD21	1:A:109:LEU:HB3	13	0.18
(1,1818)	1:A:101:LEU:HD22	1:A:109:LEU:HB2	13	0.18
(1,1818)	1:A:101:LEU:HD22	1:A:109:LEU:HB3	13	0.18
(1,1818)	1:A:101:LEU:HD23	1:A:109:LEU:HB2	13	0.18
(1,1818)	1:A:101:LEU:HD23	1:A:109:LEU:HB3	13	0.18
(1,1708)	1:A:92:LYS:HA	1:A:92:LYS:HD2	8	0.18
(1,1708)	1:A:92:LYS:HA	1:A:92:LYS:HD3	8	0.18
(1,1569)	1:A:82:ARG:HD2	1:A:100:ARG:HB2	17	0.18
(1,1569)	1:A:82:ARG:HD2	1:A:100:ARG:HB3	17	0.18
(1,1569)	1:A:82:ARG:HD3	1:A:100:ARG:HB2	17	0.18
(1,1569)	1:A:82:ARG:HD3	1:A:100:ARG:HB3	17	0.18
(1,15)	1:A:22:ARG:H	1:A:116:THR:O	1	0.18
(1,15)	1:A:22:ARG:H	1:A:116:THR:O	3	0.18
(1,15)	1:A:22:ARG:H	1:A:116:THR:O	17	0.18
(1,1414)	1:A:67:GLN:HG2	1:A:68:GLY:HA2	12	0.18

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1414)	1:A:67:GLN:HG2	1:A:68:GLY:HA3	12	0.18
(1,1414)	1:A:67:GLN:HG3	1:A:68:GLY:HA2	12	0.18
(1,1414)	1:A:67:GLN:HG3	1:A:68:GLY:HA3	12	0.18
(1,1414)	1:A:67:GLN:HG2	1:A:68:GLY:HA2	17	0.18
(1,1414)	1:A:67:GLN:HG2	1:A:68:GLY:HA3	17	0.18
(1,1414)	1:A:67:GLN:HG3	1:A:68:GLY:HA2	17	0.18
(1,1414)	1:A:67:GLN:HG3	1:A:68:GLY:HA3	17	0.18
(1,13)	1:A:21:ALA:H	1:A:14:ARG:O	2	0.18
(1,1216)	1:A:52:ILE:HD11	1:A:66:LEU:HA	14	0.18
(1,1216)	1:A:52:ILE:HD12	1:A:66:LEU:HA	14	0.18
(1,1216)	1:A:52:ILE:HD13	1:A:66:LEU:HA	14	0.18
(1,1190)	1:A:50:TRP:HZ3	1:A:51:PHE:HE1	6	0.18
(1,1190)	1:A:50:TRP:HZ3	1:A:51:PHE:HE2	6	0.18
(1,1190)	1:A:50:TRP:HZ3	1:A:51:PHE:HE1	20	0.18
(1,1190)	1:A:50:TRP:HZ3	1:A:51:PHE:HE2	20	0.18
(1,1171)	1:A:50:TRP:HE1	1:A:136:LEU:HG	13	0.18
(1,1097)	1:A:45:ASN:HA	1:A:48:ASN:HD22	13	0.18
(1,888)	1:A:34:VAL:HG11	1:A:103:GLU:HA	5	0.17
(1,888)	1:A:34:VAL:HG12	1:A:103:GLU:HA	5	0.17
(1,888)	1:A:34:VAL:HG13	1:A:103:GLU:HA	5	0.17
(1,882)	1:A:34:VAL:HB	1:A:103:GLU:HG2	10	0.17
(1,882)	1:A:34:VAL:HB	1:A:103:GLU:HG3	10	0.17
(1,801)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:110:LEU:HG	4	0.17
(1,801)	1:A:30:TYR:HD2	1:A:110:LEU:HG	4	0.17
(1,750)	1:A:28:GLN:HB2	1:A:30:TYR:HE1	13	0.17
(1,750)	1:A:28:GLN:HB2	1:A:30:TYR:HE2	13	0.17
(1,750)	1:A:28:GLN:HB3	1:A:30:TYR:HE1	13	0.17
(1,750)	1:A:28:GLN:HB3	1:A:30:TYR:HE2	13	0.17
(1,29)	1:A:29:ARG:H	1:A:6:ALA:O	15	0.17
(1,282)	1:A:10:ALA:H	1:A:25:ILE:HD11	3	0.17
(1,282)	1:A:10:ALA:H	1:A:25:ILE:HD12	3	0.17
(1,282)	1:A:10:ALA:H	1:A:25:ILE:HD13	3	0.17
(1,282)	1:A:10:ALA:H	1:A:25:ILE:HD11	11	0.17
(1,282)	1:A:10:ALA:H	1:A:25:ILE:HD12	11	0.17
(1,282)	1:A:10:ALA:H	1:A:25:ILE:HD13	11	0.17
(1,282)	1:A:10:ALA:H	1:A:25:ILE:HD11	20	0.17
(1,282)	1:A:10:ALA:H	1:A:25:ILE:HD12	20	0.17
(1,282)	1:A:10:ALA:H	1:A:25:ILE:HD13	20	0.17
(1,2563)	1:A:168:GLN:H	1:A:168:GLN:HE21	15	0.17
(1,2563)	1:A:168:GLN:H	1:A:168:GLN:HE22	15	0.17
(1,2531)	1:A:165:ARG:HG2	1:A:166:ILE:H	13	0.17
(1,2531)	1:A:165:ARG:HG3	1:A:166:ILE:H	13	0.17

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2415)	1:A:151:GLU:H	1:A:152:ASP:H	8	0.17
(1,2363)	1:A:142:GLY:H	1:A:143:ASP:H	19	0.17
(1,232)	1:A:8:GLU:HB2	1:A:27:ARG:H	16	0.17
(1,2274)	1:A:135:PHE:HD1	1:A:144:LEU:HD11	6	0.17
(1,2274)	1:A:135:PHE:HD1	1:A:144:LEU:HD12	6	0.17
(1,2274)	1:A:135:PHE:HD1	1:A:144:LEU:HD13	6	0.17
(1,2274)	1:A:135:PHE:HD2	1:A:144:LEU:HD11	6	0.17
(1,2274)	1:A:135:PHE:HD2	1:A:144:LEU:HD12	6	0.17
(1,2274)	1:A:135:PHE:HD2	1:A:144:LEU:HD13	6	0.17
(1,2126)	1:A:123:VAL:HG21	1:A:179:HIS:HD2	20	0.17
(1,2126)	1:A:123:VAL:HG22	1:A:179:HIS:HD2	20	0.17
(1,2126)	1:A:123:VAL:HG23	1:A:179:HIS:HD2	20	0.17
(1,196)	1:A:5:GLN:HA	1:A:6:ALA:H	3	0.17
(1,1860)	1:A:104:GLU:HB2	1:A:107:GLY:H	17	0.17
(1,1860)	1:A:104:GLU:HB3	1:A:107:GLY:H	17	0.17
(1,1850)	1:A:103:GLU:HB2	1:A:105:GLY:H	11	0.17
(1,1850)	1:A:103:GLU:HB3	1:A:105:GLY:H	11	0.17
(1,1850)	1:A:103:GLU:HB2	1:A:105:GLY:H	12	0.17
(1,1850)	1:A:103:GLU:HB3	1:A:105:GLY:H	12	0.17
(1,1818)	1:A:101:LEU:HD21	1:A:109:LEU:HB2	2	0.17
(1,1818)	1:A:101:LEU:HD21	1:A:109:LEU:HB3	2	0.17
(1,1818)	1:A:101:LEU:HD22	1:A:109:LEU:HB2	2	0.17
(1,1818)	1:A:101:LEU:HD22	1:A:109:LEU:HB3	2	0.17
(1,1818)	1:A:101:LEU:HD23	1:A:109:LEU:HB2	2	0.17
(1,1818)	1:A:101:LEU:HD23	1:A:109:LEU:HB3	2	0.17
(1,1784)	1:A:99:LEU:HD11	1:A:110:LEU:HG	19	0.17
(1,1784)	1:A:99:LEU:HD12	1:A:110:LEU:HG	19	0.17
(1,1784)	1:A:99:LEU:HD13	1:A:110:LEU:HG	19	0.17
(1,1784)	1:A:99:LEU:HD21	1:A:110:LEU:HG	19	0.17
(1,1784)	1:A:99:LEU:HD22	1:A:110:LEU:HG	19	0.17
(1,1784)	1:A:99:LEU:HD23	1:A:110:LEU:HG	19	0.17
(1,175)	1:A:171:GLY:H	1:A:167:SER:O	8	0.17
(1,1683)	1:A:89:TYR:HD1	1:A:90:GLU:H	14	0.17
(1,1683)	1:A:89:TYR:HD2	1:A:90:GLU:H	14	0.17
(1,1518)	1:A:76:ARG:HB2	1:A:84:THR:H	8	0.17
(1,1518)	1:A:76:ARG:HB3	1:A:84:THR:H	8	0.17
(1,1475)	1:A:74:ILE:HD11	1:A:75:LEU:H	14	0.17
(1,1475)	1:A:74:ILE:HD12	1:A:75:LEU:H	14	0.17
(1,1475)	1:A:74:ILE:HD13	1:A:75:LEU:H	14	0.17
(1,137)	1:A:130:GLU:H	1:A:126:GLY:O	10	0.17
(1,137)	1:A:130:GLU:H	1:A:126:GLY:O	15	0.17
(1,137)	1:A:130:GLU:H	1:A:126:GLY:O	20	0.17

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1222)	1:A:52:ILE:HD11	1:A:69:ASN:HA	10	0.17
(1,1222)	1:A:52:ILE:HD12	1:A:69:ASN:HA	10	0.17
(1,1222)	1:A:52:ILE:HD13	1:A:69:ASN:HA	10	0.17
(1,1151)	1:A:48:ASN:HB2	1:A:53:GLU:HA	11	0.17
(1,1151)	1:A:48:ASN:HB3	1:A:53:GLU:HA	11	0.17
(1,11)	1:A:19:GLY:H	1:A:16:ILE:O	12	0.17
(1,103)	1:A:104:GLU:H	1:A:107:GLY:O	1	0.17
(1,101)	1:A:102:SER:H	1:A:109:LEU:O	15	0.17
(1,798)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:109:LEU:HA	1	0.16
(1,798)	1:A:30:TYR:HD2	1:A:109:LEU:HA	1	0.16
(1,39)	1:A:40:ALA:H	1:A:36:GLU:O	1	0.16
(1,324)	1:A:11:LEU:HD11	1:A:177:LEU:HB2	5	0.16
(1,324)	1:A:11:LEU:HD12	1:A:177:LEU:HB2	5	0.16
(1,324)	1:A:11:LEU:HD13	1:A:177:LEU:HB2	5	0.16
(1,282)	1:A:10:ALA:H	1:A:25:ILE:HD11	9	0.16
(1,282)	1:A:10:ALA:H	1:A:25:ILE:HD12	9	0.16
(1,282)	1:A:10:ALA:H	1:A:25:ILE:HD13	9	0.16
(1,2547)	1:A:166:ILE:HB	1:A:169:GLU:HG2	6	0.16
(1,2547)	1:A:166:ILE:HB	1:A:169:GLU:HG3	6	0.16
(1,2502)	1:A:163:MET:HE1	1:A:166:ILE:HD11	19	0.16
(1,2502)	1:A:163:MET:HE1	1:A:166:ILE:HD12	19	0.16
(1,2502)	1:A:163:MET:HE1	1:A:166:ILE:HD13	19	0.16
(1,2502)	1:A:163:MET:HE2	1:A:166:ILE:HD11	19	0.16
(1,2502)	1:A:163:MET:HE2	1:A:166:ILE:HD12	19	0.16
(1,2502)	1:A:163:MET:HE2	1:A:166:ILE:HD13	19	0.16
(1,2502)	1:A:163:MET:HE3	1:A:166:ILE:HD11	19	0.16
(1,2502)	1:A:163:MET:HE3	1:A:166:ILE:HD12	19	0.16
(1,2502)	1:A:163:MET:HE3	1:A:166:ILE:HD13	19	0.16
(1,2480)	1:A:161:PRO:HG2	1:A:162:GLU:H	9	0.16
(1,2480)	1:A:161:PRO:HG3	1:A:162:GLU:H	9	0.16
(1,2421)	1:A:151:GLU:HG2	1:A:153:ALA:H	7	0.16
(1,2421)	1:A:151:GLU:HG3	1:A:153:ALA:H	7	0.16
(1,2413)	1:A:150:PRO:HG2	1:A:152:ASP:H	5	0.16
(1,2413)	1:A:150:PRO:HG3	1:A:152:ASP:H	5	0.16
(1,2379)	1:A:144:LEU:HA	1:A:145:PRO:HD2	19	0.16
(1,2379)	1:A:144:LEU:HA	1:A:145:PRO:HD3	19	0.16
(1,2367)	1:A:143:ASP:H	1:A:144:LEU:HB2	5	0.16
(1,2367)	1:A:143:ASP:H	1:A:144:LEU:HB3	5	0.16
(1,2360)	1:A:141:ARG:HB2	1:A:143:ASP:H	19	0.16
(1,2360)	1:A:141:ARG:HB3	1:A:143:ASP:H	19	0.16
(1,2161)	1:A:126:GLY:HA2	1:A:174:TRP:HZ3	8	0.16
(1,2161)	1:A:126:GLY:HA3	1:A:174:TRP:HZ3	8	0.16

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1859)	1:A:104:GLU:HA	1:A:107:GLY:H	13	0.16
(1,1849)	1:A:103:GLU:HB2	1:A:104:GLU:H	12	0.16
(1,1849)	1:A:103:GLU:HB3	1:A:104:GLU:H	12	0.16
(1,1848)	1:A:103:GLU:HG3	1:A:104:GLU:H	4	0.16
(1,1787)	1:A:99:LEU:HD11	1:A:112:LEU:H	13	0.16
(1,1787)	1:A:99:LEU:HD12	1:A:112:LEU:H	13	0.16
(1,1787)	1:A:99:LEU:HD13	1:A:112:LEU:H	13	0.16
(1,1787)	1:A:99:LEU:HD21	1:A:112:LEU:H	13	0.16
(1,1787)	1:A:99:LEU:HD22	1:A:112:LEU:H	13	0.16
(1,1787)	1:A:99:LEU:HD23	1:A:112:LEU:H	13	0.16
(1,1650)	1:A:87:TRP:HE3	1:A:121:MET:HE1	17	0.16
(1,1650)	1:A:87:TRP:HE3	1:A:121:MET:HE2	17	0.16
(1,1650)	1:A:87:TRP:HE3	1:A:121:MET:HE3	17	0.16
(1,15)	1:A:22:ARG:H	1:A:116:THR:O	18	0.16
(1,137)	1:A:130:GLU:H	1:A:126:GLY:O	11	0.16
(1,137)	1:A:130:GLU:H	1:A:126:GLY:O	16	0.16
(1,1328)	1:A:60:GLU:HG3	1:A:61:GLY:H	10	0.16
(1,13)	1:A:21:ALA:H	1:A:14:ARG:O	12	0.16
(1,1269)	1:A:55:LYS:HB2	1:A:56:GLY:H	9	0.16
(1,1269)	1:A:55:LYS:HB3	1:A:56:GLY:H	9	0.16
(1,1239)	1:A:52:ILE:HG21	1:A:68:GLY:H	6	0.16
(1,1239)	1:A:52:ILE:HG22	1:A:68:GLY:H	6	0.16
(1,1239)	1:A:52:ILE:HG23	1:A:68:GLY:H	6	0.16
(1,1096)	1:A:45:ASN:HA	1:A:48:ASN:HD21	17	0.16
(1,101)	1:A:102:SER:H	1:A:109:LEU:O	7	0.16
(1,968)	1:A:37:VAL:HG21	1:A:108:THR:HA	20	0.15
(1,968)	1:A:37:VAL:HG22	1:A:108:THR:HA	20	0.15
(1,968)	1:A:37:VAL:HG23	1:A:108:THR:HA	20	0.15
(1,890)	1:A:34:VAL:HG11	1:A:103:GLU:HG3	1	0.15
(1,890)	1:A:34:VAL:HG12	1:A:103:GLU:HG3	1	0.15
(1,890)	1:A:34:VAL:HG13	1:A:103:GLU:HG3	1	0.15
(1,890)	1:A:34:VAL:HG11	1:A:103:GLU:HG3	12	0.15
(1,890)	1:A:34:VAL:HG12	1:A:103:GLU:HG3	12	0.15
(1,890)	1:A:34:VAL:HG13	1:A:103:GLU:HG3	12	0.15
(1,889)	1:A:34:VAL:HG11	1:A:103:GLU:HG2	10	0.15
(1,889)	1:A:34:VAL:HG12	1:A:103:GLU:HG2	10	0.15
(1,889)	1:A:34:VAL:HG13	1:A:103:GLU:HG2	10	0.15
(1,888)	1:A:34:VAL:HG11	1:A:103:GLU:HA	15	0.15
(1,888)	1:A:34:VAL:HG12	1:A:103:GLU:HA	15	0.15
(1,888)	1:A:34:VAL:HG13	1:A:103:GLU:HA	15	0.15
(1,882)	1:A:34:VAL:HB	1:A:103:GLU:HG2	13	0.15
(1,882)	1:A:34:VAL:HB	1:A:103:GLU:HG3	13	0.15

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,87)	1:A:95:SER:H	1:A:87:TRP:O	11	0.15
(1,848)	1:A:32:ALA:HB1	1:A:36:GLU:H	4	0.15
(1,848)	1:A:32:ALA:HB2	1:A:36:GLU:H	4	0.15
(1,848)	1:A:32:ALA:HB3	1:A:36:GLU:H	4	0.15
(1,825)	1:A:31:ASP:HA	1:A:107:GLY:H	14	0.15
(1,773)	1:A:29:ARG:HD2	1:A:30:TYR:H	15	0.15
(1,773)	1:A:29:ARG:HD3	1:A:30:TYR:H	15	0.15
(1,57)	1:A:61:GLY:H	1:A:74:ILE:O	15	0.15
(1,461)	1:A:16:ILE:HG12	1:A:21:ALA:H	8	0.15
(1,461)	1:A:16:ILE:HG13	1:A:21:ALA:H	8	0.15
(1,346)	1:A:11:LEU:HD21	1:A:22:ARG:HG2	2	0.15
(1,346)	1:A:11:LEU:HD21	1:A:22:ARG:HG3	2	0.15
(1,346)	1:A:11:LEU:HD22	1:A:22:ARG:HG2	2	0.15
(1,346)	1:A:11:LEU:HD22	1:A:22:ARG:HG3	2	0.15
(1,346)	1:A:11:LEU:HD23	1:A:22:ARG:HG2	2	0.15
(1,346)	1:A:11:LEU:HD23	1:A:22:ARG:HG3	2	0.15
(1,333)	1:A:11:LEU:HD11	1:A:181:GLY:HA2	5	0.15
(1,333)	1:A:11:LEU:HD11	1:A:181:GLY:HA3	5	0.15
(1,333)	1:A:11:LEU:HD12	1:A:181:GLY:HA2	5	0.15
(1,333)	1:A:11:LEU:HD12	1:A:181:GLY:HA3	5	0.15
(1,333)	1:A:11:LEU:HD13	1:A:181:GLY:HA2	5	0.15
(1,333)	1:A:11:LEU:HD13	1:A:181:GLY:HA3	5	0.15
(1,326)	1:A:11:LEU:HD11	1:A:177:LEU:HD11	5	0.15
(1,326)	1:A:11:LEU:HD11	1:A:177:LEU:HD12	5	0.15
(1,326)	1:A:11:LEU:HD11	1:A:177:LEU:HD13	5	0.15
(1,326)	1:A:11:LEU:HD12	1:A:177:LEU:HD11	5	0.15
(1,326)	1:A:11:LEU:HD12	1:A:177:LEU:HD12	5	0.15
(1,326)	1:A:11:LEU:HD12	1:A:177:LEU:HD13	5	0.15
(1,326)	1:A:11:LEU:HD13	1:A:177:LEU:HD11	5	0.15
(1,326)	1:A:11:LEU:HD13	1:A:177:LEU:HD12	5	0.15
(1,326)	1:A:11:LEU:HD13	1:A:177:LEU:HD13	5	0.15
(1,29)	1:A:29:ARG:H	1:A:6:ALA:O	10	0.15
(1,257)	1:A:9:ARG:HE	1:A:174:TRP:HD1	18	0.15
(1,2563)	1:A:168:GLN:H	1:A:168:GLN:HE21	20	0.15
(1,2563)	1:A:168:GLN:H	1:A:168:GLN:HE22	20	0.15
(1,2515)	1:A:164:MET:HE1	1:A:168:GLN:HE22	7	0.15
(1,2515)	1:A:164:MET:HE2	1:A:168:GLN:HE22	7	0.15
(1,2515)	1:A:164:MET:HE3	1:A:168:GLN:HE22	7	0.15
(1,2442)	1:A:155:GLU:HB2	1:A:156:GLU:H	15	0.15
(1,2442)	1:A:155:GLU:HB3	1:A:156:GLU:H	15	0.15
(1,2424)	1:A:152:ASP:H	1:A:153:ALA:H	19	0.15
(1,2419)	1:A:151:GLU:HB2	1:A:153:ALA:HB1	1	0.15

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2419)	1:A:151:GLU:HB2	1:A:153:ALA:HB2	1	0.15
(1,2419)	1:A:151:GLU:HB2	1:A:153:ALA:HB3	1	0.15
(1,2419)	1:A:151:GLU:HB3	1:A:153:ALA:HB1	1	0.15
(1,2419)	1:A:151:GLU:HB3	1:A:153:ALA:HB2	1	0.15
(1,2419)	1:A:151:GLU:HB3	1:A:153:ALA:HB3	1	0.15
(1,2317)	1:A:138:MET:HE1	1:A:144:LEU:HD21	5	0.15
(1,2317)	1:A:138:MET:HE1	1:A:144:LEU:HD22	5	0.15
(1,2317)	1:A:138:MET:HE1	1:A:144:LEU:HD23	5	0.15
(1,2317)	1:A:138:MET:HE2	1:A:144:LEU:HD21	5	0.15
(1,2317)	1:A:138:MET:HE2	1:A:144:LEU:HD22	5	0.15
(1,2317)	1:A:138:MET:HE2	1:A:144:LEU:HD23	5	0.15
(1,2317)	1:A:138:MET:HE3	1:A:144:LEU:HD21	5	0.15
(1,2317)	1:A:138:MET:HE3	1:A:144:LEU:HD22	5	0.15
(1,2317)	1:A:138:MET:HE3	1:A:144:LEU:HD23	5	0.15
(1,2275)	1:A:135:PHE:HD1	1:A:144:LEU:HD21	8	0.15
(1,2275)	1:A:135:PHE:HD1	1:A:144:LEU:HD22	8	0.15
(1,2275)	1:A:135:PHE:HD1	1:A:144:LEU:HD23	8	0.15
(1,2275)	1:A:135:PHE:HD2	1:A:144:LEU:HD21	8	0.15
(1,2275)	1:A:135:PHE:HD2	1:A:144:LEU:HD22	8	0.15
(1,2275)	1:A:135:PHE:HD2	1:A:144:LEU:HD23	8	0.15
(1,2241)	1:A:132:ALA:HB1	1:A:135:PHE:HD1	8	0.15
(1,2241)	1:A:132:ALA:HB1	1:A:135:PHE:HD2	8	0.15
(1,2241)	1:A:132:ALA:HB2	1:A:135:PHE:HD1	8	0.15
(1,2241)	1:A:132:ALA:HB2	1:A:135:PHE:HD2	8	0.15
(1,2241)	1:A:132:ALA:HB3	1:A:135:PHE:HD1	8	0.15
(1,2241)	1:A:132:ALA:HB3	1:A:135:PHE:HD2	8	0.15
(1,2126)	1:A:123:VAL:HG21	1:A:179:HIS:HD2	5	0.15
(1,2126)	1:A:123:VAL:HG22	1:A:179:HIS:HD2	5	0.15
(1,2126)	1:A:123:VAL:HG23	1:A:179:HIS:HD2	5	0.15
(1,2102)	1:A:123:VAL:HA	1:A:178:VAL:H	4	0.15
(1,2102)	1:A:123:VAL:HA	1:A:178:VAL:H	19	0.15
(1,1861)	1:A:104:GLU:HB2	1:A:108:THR:H	5	0.15
(1,1861)	1:A:104:GLU:HB3	1:A:108:THR:H	5	0.15
(1,1850)	1:A:103:GLU:HB2	1:A:105:GLY:H	10	0.15
(1,1850)	1:A:103:GLU:HB3	1:A:105:GLY:H	10	0.15
(1,1818)	1:A:101:LEU:HD21	1:A:109:LEU:HB2	3	0.15
(1,1818)	1:A:101:LEU:HD21	1:A:109:LEU:HB3	3	0.15
(1,1818)	1:A:101:LEU:HD22	1:A:109:LEU:HB2	3	0.15
(1,1818)	1:A:101:LEU:HD22	1:A:109:LEU:HB3	3	0.15
(1,1818)	1:A:101:LEU:HD23	1:A:109:LEU:HB2	3	0.15
(1,1818)	1:A:101:LEU:HD23	1:A:109:LEU:HB3	3	0.15
(1,181)	1:A:174:TRP:H	1:A:170:ARG:O	13	0.15

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,179)	1:A:173:ALA:H	1:A:169:GLU:O	2	0.15
(1,1787)	1:A:99:LEU:HD11	1:A:112:LEU:H	14	0.15
(1,1787)	1:A:99:LEU:HD12	1:A:112:LEU:H	14	0.15
(1,1787)	1:A:99:LEU:HD13	1:A:112:LEU:H	14	0.15
(1,1787)	1:A:99:LEU:HD21	1:A:112:LEU:H	14	0.15
(1,1787)	1:A:99:LEU:HD22	1:A:112:LEU:H	14	0.15
(1,1787)	1:A:99:LEU:HD23	1:A:112:LEU:H	14	0.15
(1,173)	1:A:170:ARG:H	1:A:166:ILE:O	10	0.15
(1,167)	1:A:167:SER:H	1:A:163:MET:O	20	0.15
(1,1569)	1:A:82:ARG:HD2	1:A:100:ARG:HB2	13	0.15
(1,1569)	1:A:82:ARG:HD2	1:A:100:ARG:HB3	13	0.15
(1,1569)	1:A:82:ARG:HD3	1:A:100:ARG:HB2	13	0.15
(1,1569)	1:A:82:ARG:HD3	1:A:100:ARG:HB3	13	0.15
(1,1518)	1:A:76:ARG:HB2	1:A:84:THR:H	4	0.15
(1,1518)	1:A:76:ARG:HB3	1:A:84:THR:H	4	0.15
(1,15)	1:A:22:ARG:H	1:A:116:THR:O	12	0.15
(1,137)	1:A:130:GLU:H	1:A:126:GLY:O	3	0.15
(1,137)	1:A:130:GLU:H	1:A:126:GLY:O	17	0.15
(1,1336)	1:A:62:GLY:H	1:A:74:ILE:HD11	7	0.15
(1,1336)	1:A:62:GLY:H	1:A:74:ILE:HD12	7	0.15
(1,1336)	1:A:62:GLY:H	1:A:74:ILE:HD13	7	0.15
(1,1332)	1:A:61:GLY:H	1:A:74:ILE:HD11	13	0.15
(1,1332)	1:A:61:GLY:H	1:A:74:ILE:HD12	13	0.15
(1,1332)	1:A:61:GLY:H	1:A:74:ILE:HD13	13	0.15
(1,1332)	1:A:61:GLY:H	1:A:74:ILE:HD11	17	0.15
(1,1332)	1:A:61:GLY:H	1:A:74:ILE:HD12	17	0.15
(1,1332)	1:A:61:GLY:H	1:A:74:ILE:HD13	17	0.15
(1,131)	1:A:127:VAL:H	1:A:123:VAL:O	1	0.15
(1,1269)	1:A:55:LYS:HB2	1:A:56:GLY:H	19	0.15
(1,1269)	1:A:55:LYS:HB3	1:A:56:GLY:H	19	0.15
(1,1216)	1:A:52:ILE:HD11	1:A:66:LEU:HA	4	0.15
(1,1216)	1:A:52:ILE:HD12	1:A:66:LEU:HA	4	0.15
(1,1216)	1:A:52:ILE:HD13	1:A:66:LEU:HA	4	0.15
(1,1190)	1:A:50:TRP:HZ3	1:A:51:PHE:HE1	13	0.15
(1,1190)	1:A:50:TRP:HZ3	1:A:51:PHE:HE2	13	0.15
(1,1030)	1:A:40:ALA:H	1:A:46:ARG:HD2	13	0.15
(1,1030)	1:A:40:ALA:H	1:A:46:ARG:HD3	13	0.15
(1,928)	1:A:35:ASP:HB2	1:A:38:TRP:HD1	12	0.14
(1,928)	1:A:35:ASP:HB3	1:A:38:TRP:HD1	12	0.14
(1,928)	1:A:35:ASP:HB2	1:A:38:TRP:HD1	18	0.14
(1,928)	1:A:35:ASP:HB3	1:A:38:TRP:HD1	18	0.14
(1,899)	1:A:34:VAL:HG11	1:A:38:TRP:HD1	11	0.14

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,899)	1:A:34:VAL:HG12	1:A:38:TRP:HD1	11	0.14
(1,899)	1:A:34:VAL:HG13	1:A:38:TRP:HD1	11	0.14
(1,897)	1:A:34:VAL:HG11	1:A:37:VAL:H	9	0.14
(1,897)	1:A:34:VAL:HG12	1:A:37:VAL:H	9	0.14
(1,897)	1:A:34:VAL:HG13	1:A:37:VAL:H	9	0.14
(1,897)	1:A:34:VAL:HG11	1:A:37:VAL:H	11	0.14
(1,897)	1:A:34:VAL:HG12	1:A:37:VAL:H	11	0.14
(1,897)	1:A:34:VAL:HG13	1:A:37:VAL:H	11	0.14
(1,897)	1:A:34:VAL:HG11	1:A:37:VAL:H	12	0.14
(1,897)	1:A:34:VAL:HG12	1:A:37:VAL:H	12	0.14
(1,897)	1:A:34:VAL:HG13	1:A:37:VAL:H	12	0.14
(1,890)	1:A:34:VAL:HG11	1:A:103:GLU:HG3	11	0.14
(1,890)	1:A:34:VAL:HG12	1:A:103:GLU:HG3	11	0.14
(1,890)	1:A:34:VAL:HG13	1:A:103:GLU:HG3	11	0.14
(1,882)	1:A:34:VAL:HB	1:A:103:GLU:HG2	15	0.14
(1,882)	1:A:34:VAL:HB	1:A:103:GLU:HG3	15	0.14
(1,87)	1:A:95:SER:H	1:A:87:TRP:O	8	0.14
(1,860)	1:A:33:PRO:HB3	1:A:36:GLU:H	10	0.14
(1,848)	1:A:32:ALA:HB1	1:A:36:GLU:H	5	0.14
(1,848)	1:A:32:ALA:HB2	1:A:36:GLU:H	5	0.14
(1,848)	1:A:32:ALA:HB3	1:A:36:GLU:H	5	0.14
(1,801)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:110:LEU:HG	20	0.14
(1,801)	1:A:30:TYR:HD2	1:A:110:LEU:HG	20	0.14
(1,689)	1:A:26:ILE:HD11	1:A:28:GLN:HE22	20	0.14
(1,689)	1:A:26:ILE:HD12	1:A:28:GLN:HE22	20	0.14
(1,689)	1:A:26:ILE:HD13	1:A:28:GLN:HE22	20	0.14
(1,688)	1:A:26:ILE:HD11	1:A:28:GLN:HE21	3	0.14
(1,688)	1:A:26:ILE:HD12	1:A:28:GLN:HE21	3	0.14
(1,688)	1:A:26:ILE:HD13	1:A:28:GLN:HE21	3	0.14
(1,642)	1:A:25:ILE:HG21	1:A:113:GLU:HB2	14	0.14
(1,642)	1:A:25:ILE:HG21	1:A:113:GLU:HB3	14	0.14
(1,642)	1:A:25:ILE:HG22	1:A:113:GLU:HB2	14	0.14
(1,642)	1:A:25:ILE:HG22	1:A:113:GLU:HB3	14	0.14
(1,642)	1:A:25:ILE:HG23	1:A:113:GLU:HB2	14	0.14
(1,642)	1:A:25:ILE:HG23	1:A:113:GLU:HB3	14	0.14
(1,57)	1:A:61:GLY:H	1:A:74:ILE:O	6	0.14
(1,549)	1:A:23:SER:HB2	1:A:116:THR:H	20	0.14
(1,461)	1:A:16:ILE:HG12	1:A:21:ALA:H	2	0.14
(1,461)	1:A:16:ILE:HG13	1:A:21:ALA:H	2	0.14
(1,461)	1:A:16:ILE:HG12	1:A:21:ALA:H	13	0.14
(1,461)	1:A:16:ILE:HG13	1:A:21:ALA:H	13	0.14
(1,43)	1:A:42:THR:H	1:A:38:TRP:O	12	0.14

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,407)	1:A:14:ARG:HD2	1:A:15:THR:H	7	0.14
(1,407)	1:A:14:ARG:HD3	1:A:15:THR:H	7	0.14
(1,331)	1:A:11:LEU:HD11	1:A:180:SER:H	4	0.14
(1,331)	1:A:11:LEU:HD12	1:A:180:SER:H	4	0.14
(1,331)	1:A:11:LEU:HD13	1:A:180:SER:H	4	0.14
(1,282)	1:A:10:ALA:H	1:A:25:ILE:HD11	18	0.14
(1,282)	1:A:10:ALA:H	1:A:25:ILE:HD12	18	0.14
(1,282)	1:A:10:ALA:H	1:A:25:ILE:HD13	18	0.14
(1,2703)	1:A:179:HIS:H	1:A:179:HIS:HB3	12	0.14
(1,255)	1:A:9:ARG:HE	1:A:130:GLU:HG2	5	0.14
(1,255)	1:A:9:ARG:HE	1:A:130:GLU:HG3	5	0.14
(1,2502)	1:A:163:MET:HE1	1:A:166:ILE:HD11	10	0.14
(1,2502)	1:A:163:MET:HE1	1:A:166:ILE:HD12	10	0.14
(1,2502)	1:A:163:MET:HE1	1:A:166:ILE:HD13	10	0.14
(1,2502)	1:A:163:MET:HE2	1:A:166:ILE:HD11	10	0.14
(1,2502)	1:A:163:MET:HE2	1:A:166:ILE:HD12	10	0.14
(1,2502)	1:A:163:MET:HE2	1:A:166:ILE:HD13	10	0.14
(1,2502)	1:A:163:MET:HE3	1:A:166:ILE:HD11	10	0.14
(1,2502)	1:A:163:MET:HE3	1:A:166:ILE:HD12	10	0.14
(1,2502)	1:A:163:MET:HE3	1:A:166:ILE:HD13	10	0.14
(1,2489)	1:A:162:GLU:HG2	1:A:166:ILE:HD11	18	0.14
(1,2489)	1:A:162:GLU:HG2	1:A:166:ILE:HD12	18	0.14
(1,2489)	1:A:162:GLU:HG2	1:A:166:ILE:HD13	18	0.14
(1,2489)	1:A:162:GLU:HG3	1:A:166:ILE:HD11	18	0.14
(1,2489)	1:A:162:GLU:HG3	1:A:166:ILE:HD12	18	0.14
(1,2489)	1:A:162:GLU:HG3	1:A:166:ILE:HD13	18	0.14
(1,2458)	1:A:158:GLU:HA	1:A:159:PRO:HD2	17	0.14
(1,2458)	1:A:158:GLU:HA	1:A:159:PRO:HD3	17	0.14
(1,2435)	1:A:154:ALA:HB1	1:A:155:GLU:H	9	0.14
(1,2435)	1:A:154:ALA:HB2	1:A:155:GLU:H	9	0.14
(1,2435)	1:A:154:ALA:HB3	1:A:155:GLU:H	9	0.14
(1,2428)	1:A:152:ASP:HA	1:A:154:ALA:HB1	1	0.14
(1,2428)	1:A:152:ASP:HA	1:A:154:ALA:HB2	1	0.14
(1,2428)	1:A:152:ASP:HA	1:A:154:ALA:HB3	1	0.14
(1,2422)	1:A:151:GLU:HG2	1:A:153:ALA:HB1	17	0.14
(1,2422)	1:A:151:GLU:HG2	1:A:153:ALA:HB2	17	0.14
(1,2422)	1:A:151:GLU:HG2	1:A:153:ALA:HB3	17	0.14
(1,2422)	1:A:151:GLU:HG3	1:A:153:ALA:HB1	17	0.14
(1,2422)	1:A:151:GLU:HG3	1:A:153:ALA:HB2	17	0.14
(1,2422)	1:A:151:GLU:HG3	1:A:153:ALA:HB3	17	0.14
(1,2419)	1:A:151:GLU:HB2	1:A:153:ALA:HB1	3	0.14
(1,2419)	1:A:151:GLU:HB2	1:A:153:ALA:HB2	3	0.14

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2419)	1:A:151:GLU:HB2	1:A:153:ALA:HB3	3	0.14
(1,2419)	1:A:151:GLU:HB3	1:A:153:ALA:HB1	3	0.14
(1,2419)	1:A:151:GLU:HB3	1:A:153:ALA:HB2	3	0.14
(1,2419)	1:A:151:GLU:HB3	1:A:153:ALA:HB3	3	0.14
(1,2419)	1:A:151:GLU:HB2	1:A:153:ALA:HB1	9	0.14
(1,2419)	1:A:151:GLU:HB2	1:A:153:ALA:HB2	9	0.14
(1,2419)	1:A:151:GLU:HB2	1:A:153:ALA:HB3	9	0.14
(1,2419)	1:A:151:GLU:HB3	1:A:153:ALA:HB1	9	0.14
(1,2419)	1:A:151:GLU:HB3	1:A:153:ALA:HB2	9	0.14
(1,2419)	1:A:151:GLU:HB3	1:A:153:ALA:HB3	9	0.14
(1,2325)	1:A:139:PHE:HA	1:A:144:LEU:HD11	18	0.14
(1,2325)	1:A:139:PHE:HA	1:A:144:LEU:HD12	18	0.14
(1,2325)	1:A:139:PHE:HA	1:A:144:LEU:HD13	18	0.14
(1,191)	1:A:179:HIS:H	1:A:175:ALA:O	14	0.14
(1,1859)	1:A:104:GLU:HA	1:A:107:GLY:H	3	0.14
(1,1818)	1:A:101:LEU:HD21	1:A:109:LEU:HB2	4	0.14
(1,1818)	1:A:101:LEU:HD21	1:A:109:LEU:HB3	4	0.14
(1,1818)	1:A:101:LEU:HD22	1:A:109:LEU:HB2	4	0.14
(1,1818)	1:A:101:LEU:HD22	1:A:109:LEU:HB3	4	0.14
(1,1818)	1:A:101:LEU:HD23	1:A:109:LEU:HB2	4	0.14
(1,1818)	1:A:101:LEU:HD23	1:A:109:LEU:HB3	4	0.14
(1,1812)	1:A:101:LEU:HD11	1:A:110:LEU:HA	10	0.14
(1,1812)	1:A:101:LEU:HD12	1:A:110:LEU:HA	10	0.14
(1,1812)	1:A:101:LEU:HD13	1:A:110:LEU:HA	10	0.14
(1,179)	1:A:173:ALA:H	1:A:169:GLU:O	10	0.14
(1,1746)	1:A:97:VAL:HG11	1:A:112:LEU:HD21	19	0.14
(1,1746)	1:A:97:VAL:HG11	1:A:112:LEU:HD22	19	0.14
(1,1746)	1:A:97:VAL:HG11	1:A:112:LEU:HD23	19	0.14
(1,1746)	1:A:97:VAL:HG12	1:A:112:LEU:HD21	19	0.14
(1,1746)	1:A:97:VAL:HG12	1:A:112:LEU:HD22	19	0.14
(1,1746)	1:A:97:VAL:HG12	1:A:112:LEU:HD23	19	0.14
(1,1746)	1:A:97:VAL:HG13	1:A:112:LEU:HD21	19	0.14
(1,1746)	1:A:97:VAL:HG13	1:A:112:LEU:HD22	19	0.14
(1,1746)	1:A:97:VAL:HG13	1:A:112:LEU:HD23	19	0.14
(1,1650)	1:A:87:TRP:HE3	1:A:121:MET:HE1	3	0.14
(1,1650)	1:A:87:TRP:HE3	1:A:121:MET:HE2	3	0.14
(1,1650)	1:A:87:TRP:HE3	1:A:121:MET:HE3	3	0.14
(1,1610)	1:A:85:ILE:H	1:A:98:GLU:HB2	16	0.14
(1,1610)	1:A:85:ILE:H	1:A:98:GLU:HB3	16	0.14
(1,1571)	1:A:82:ARG:HG2	1:A:99:LEU:H	13	0.14
(1,1571)	1:A:82:ARG:HG3	1:A:99:LEU:H	13	0.14
(1,15)	1:A:22:ARG:H	1:A:116:THR:O	5	0.14

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,15)	1:A:22:ARG:H	1:A:116:THR:O	7	0.14
(1,1426)	1:A:70:ALA:H	1:A:89:TYR:HD1	12	0.14
(1,1426)	1:A:70:ALA:H	1:A:89:TYR:HD2	12	0.14
(1,1420)	1:A:69:ASN:HA	1:A:89:TYR:HE1	16	0.14
(1,1420)	1:A:69:ASN:HA	1:A:89:TYR:HE2	16	0.14
(1,1408)	1:A:67:GLN:HA	1:A:69:ASN:H	10	0.14
(1,1314)	1:A:59:ARG:H	1:A:63:ASN:H	3	0.14
(1,1269)	1:A:55:LYS:HB2	1:A:56:GLY:H	2	0.14
(1,1269)	1:A:55:LYS:HB3	1:A:56:GLY:H	2	0.14
(1,1190)	1:A:50:TRP:HZ3	1:A:51:PHE:HE1	2	0.14
(1,1190)	1:A:50:TRP:HZ3	1:A:51:PHE:HE2	2	0.14
(1,1171)	1:A:50:TRP:HE1	1:A:136:LEU:HG	1	0.14
(1,1171)	1:A:50:TRP:HE1	1:A:136:LEU:HG	17	0.14
(1,976)	1:A:38:TRP:H	1:A:108:THR:HG21	5	0.13
(1,976)	1:A:38:TRP:H	1:A:108:THR:HG22	5	0.13
(1,976)	1:A:38:TRP:H	1:A:108:THR:HG23	5	0.13
(1,976)	1:A:38:TRP:H	1:A:108:THR:HG21	8	0.13
(1,976)	1:A:38:TRP:H	1:A:108:THR:HG22	8	0.13
(1,976)	1:A:38:TRP:H	1:A:108:THR:HG23	8	0.13
(1,904)	1:A:34:VAL:HG21	1:A:101:LEU:H	12	0.13
(1,904)	1:A:34:VAL:HG22	1:A:101:LEU:H	12	0.13
(1,904)	1:A:34:VAL:HG23	1:A:101:LEU:H	12	0.13
(1,897)	1:A:34:VAL:HG11	1:A:37:VAL:H	6	0.13
(1,897)	1:A:34:VAL:HG12	1:A:37:VAL:H	6	0.13
(1,897)	1:A:34:VAL:HG13	1:A:37:VAL:H	6	0.13
(1,889)	1:A:34:VAL:HG11	1:A:103:GLU:HG2	7	0.13
(1,889)	1:A:34:VAL:HG12	1:A:103:GLU:HG2	7	0.13
(1,889)	1:A:34:VAL:HG13	1:A:103:GLU:HG2	7	0.13
(1,882)	1:A:34:VAL:HB	1:A:103:GLU:HG2	6	0.13
(1,882)	1:A:34:VAL:HB	1:A:103:GLU:HG3	6	0.13
(1,882)	1:A:34:VAL:HB	1:A:103:GLU:HG2	16	0.13
(1,882)	1:A:34:VAL:HB	1:A:103:GLU:HG3	16	0.13
(1,801)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:110:LEU:HG	6	0.13
(1,801)	1:A:30:TYR:HD2	1:A:110:LEU:HG	6	0.13
(1,772)	1:A:29:ARG:HD2	1:A:109:LEU:HD11	16	0.13
(1,772)	1:A:29:ARG:HD2	1:A:109:LEU:HD12	16	0.13
(1,772)	1:A:29:ARG:HD2	1:A:109:LEU:HD13	16	0.13
(1,772)	1:A:29:ARG:HD3	1:A:109:LEU:HD11	16	0.13
(1,772)	1:A:29:ARG:HD3	1:A:109:LEU:HD12	16	0.13
(1,772)	1:A:29:ARG:HD3	1:A:109:LEU:HD13	16	0.13
(1,746)	1:A:28:GLN:HG3	1:A:29:ARG:H	19	0.13
(1,688)	1:A:26:ILE:HD11	1:A:28:GLN:HE21	9	0.13

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,688)	1:A:26:ILE:HD12	1:A:28:GLN:HE21	9	0.13
(1,688)	1:A:26:ILE:HD13	1:A:28:GLN:HE21	9	0.13
(1,57)	1:A:61:GLY:H	1:A:74:ILE:O	7	0.13
(1,555)	1:A:23:SER:HB3	1:A:116:THR:H	2	0.13
(1,549)	1:A:23:SER:HB2	1:A:116:THR:H	4	0.13
(1,549)	1:A:23:SER:HB2	1:A:116:THR:H	8	0.13
(1,293)	1:A:10:ALA:HB1	1:A:177:LEU:HD21	6	0.13
(1,293)	1:A:10:ALA:HB1	1:A:177:LEU:HD22	6	0.13
(1,293)	1:A:10:ALA:HB1	1:A:177:LEU:HD23	6	0.13
(1,293)	1:A:10:ALA:HB2	1:A:177:LEU:HD21	6	0.13
(1,293)	1:A:10:ALA:HB2	1:A:177:LEU:HD22	6	0.13
(1,293)	1:A:10:ALA:HB2	1:A:177:LEU:HD23	6	0.13
(1,293)	1:A:10:ALA:HB3	1:A:177:LEU:HD21	6	0.13
(1,293)	1:A:10:ALA:HB3	1:A:177:LEU:HD22	6	0.13
(1,293)	1:A:10:ALA:HB3	1:A:177:LEU:HD23	6	0.13
(1,29)	1:A:29:ARG:H	1:A:6:ALA:O	12	0.13
(1,282)	1:A:10:ALA:H	1:A:25:ILE:HD11	16	0.13
(1,282)	1:A:10:ALA:H	1:A:25:ILE:HD12	16	0.13
(1,282)	1:A:10:ALA:H	1:A:25:ILE:HD13	16	0.13
(1,2703)	1:A:179:HIS:H	1:A:179:HIS:HB3	13	0.13
(1,2703)	1:A:179:HIS:H	1:A:179:HIS:HB3	16	0.13
(1,2664)	1:A:177:LEU:H	1:A:177:LEU:HB3	5	0.13
(1,2656)	1:A:176:ALA:H	1:A:179:HIS:HB2	5	0.13
(1,2656)	1:A:176:ALA:H	1:A:179:HIS:HB3	5	0.13
(1,2591)	1:A:171:GLY:H	1:A:172:GLU:HG2	12	0.13
(1,2591)	1:A:171:GLY:H	1:A:172:GLU:HG3	12	0.13
(1,2550)	1:A:166:ILE:HD11	1:A:170:ARG:HG2	4	0.13
(1,2550)	1:A:166:ILE:HD11	1:A:170:ARG:HG3	4	0.13
(1,2550)	1:A:166:ILE:HD12	1:A:170:ARG:HG2	4	0.13
(1,2550)	1:A:166:ILE:HD12	1:A:170:ARG:HG3	4	0.13
(1,2550)	1:A:166:ILE:HD13	1:A:170:ARG:HG2	4	0.13
(1,2550)	1:A:166:ILE:HD13	1:A:170:ARG:HG3	4	0.13
(1,2547)	1:A:166:ILE:HB	1:A:169:GLU:HG2	13	0.13
(1,2547)	1:A:166:ILE:HB	1:A:169:GLU:HG3	13	0.13
(1,2531)	1:A:165:ARG:HG2	1:A:166:ILE:H	12	0.13
(1,2531)	1:A:165:ARG:HG3	1:A:166:ILE:H	12	0.13
(1,2480)	1:A:161:PRO:HG2	1:A:162:GLU:H	13	0.13
(1,2480)	1:A:161:PRO:HG3	1:A:162:GLU:H	13	0.13
(1,2458)	1:A:158:GLU:HA	1:A:159:PRO:HD2	8	0.13
(1,2458)	1:A:158:GLU:HA	1:A:159:PRO:HD3	8	0.13
(1,2438)	1:A:154:ALA:HB1	1:A:156:GLU:H	1	0.13
(1,2438)	1:A:154:ALA:HB2	1:A:156:GLU:H	1	0.13

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2438)	1:A:154:ALA:HB3	1:A:156:GLU:H	1	0.13
(1,2438)	1:A:154:ALA:HB1	1:A:156:GLU:H	4	0.13
(1,2438)	1:A:154:ALA:HB2	1:A:156:GLU:H	4	0.13
(1,2438)	1:A:154:ALA:HB3	1:A:156:GLU:H	4	0.13
(1,2435)	1:A:154:ALA:HB1	1:A:155:GLU:H	10	0.13
(1,2435)	1:A:154:ALA:HB2	1:A:155:GLU:H	10	0.13
(1,2435)	1:A:154:ALA:HB3	1:A:155:GLU:H	10	0.13
(1,2432)	1:A:153:ALA:HB1	1:A:154:ALA:H	3	0.13
(1,2432)	1:A:153:ALA:HB2	1:A:154:ALA:H	3	0.13
(1,2432)	1:A:153:ALA:HB3	1:A:154:ALA:H	3	0.13
(1,2432)	1:A:153:ALA:HB1	1:A:154:ALA:H	10	0.13
(1,2432)	1:A:153:ALA:HB2	1:A:154:ALA:H	10	0.13
(1,2432)	1:A:153:ALA:HB3	1:A:154:ALA:H	10	0.13
(1,2430)	1:A:153:ALA:H	1:A:154:ALA:H	13	0.13
(1,243)	1:A:9:ARG:H	1:A:177:LEU:HD11	6	0.13
(1,243)	1:A:9:ARG:H	1:A:177:LEU:HD12	6	0.13
(1,243)	1:A:9:ARG:H	1:A:177:LEU:HD13	6	0.13
(1,2422)	1:A:151:GLU:HG2	1:A:153:ALA:HB1	7	0.13
(1,2422)	1:A:151:GLU:HG2	1:A:153:ALA:HB2	7	0.13
(1,2422)	1:A:151:GLU:HG2	1:A:153:ALA:HB3	7	0.13
(1,2422)	1:A:151:GLU:HG3	1:A:153:ALA:HB1	7	0.13
(1,2422)	1:A:151:GLU:HG3	1:A:153:ALA:HB2	7	0.13
(1,2422)	1:A:151:GLU:HG3	1:A:153:ALA:HB3	7	0.13
(1,2383)	1:A:145:PRO:HB2	1:A:146:GLY:H	16	0.13
(1,2383)	1:A:145:PRO:HB3	1:A:146:GLY:H	16	0.13
(1,2354)	1:A:141:ARG:H	1:A:142:GLY:H	1	0.13
(1,2316)	1:A:138:MET:HE1	1:A:144:LEU:HD11	3	0.13
(1,2316)	1:A:138:MET:HE1	1:A:144:LEU:HD12	3	0.13
(1,2316)	1:A:138:MET:HE1	1:A:144:LEU:HD13	3	0.13
(1,2316)	1:A:138:MET:HE2	1:A:144:LEU:HD11	3	0.13
(1,2316)	1:A:138:MET:HE2	1:A:144:LEU:HD12	3	0.13
(1,2316)	1:A:138:MET:HE2	1:A:144:LEU:HD13	3	0.13
(1,2316)	1:A:138:MET:HE3	1:A:144:LEU:HD11	3	0.13
(1,2316)	1:A:138:MET:HE3	1:A:144:LEU:HD12	3	0.13
(1,2316)	1:A:138:MET:HE3	1:A:144:LEU:HD13	3	0.13
(1,2314)	1:A:138:MET:HE1	1:A:143:ASP:HB3	9	0.13
(1,2314)	1:A:138:MET:HE2	1:A:143:ASP:HB3	9	0.13
(1,2314)	1:A:138:MET:HE3	1:A:143:ASP:HB3	9	0.13
(1,2313)	1:A:138:MET:HE1	1:A:143:ASP:HB2	14	0.13
(1,2313)	1:A:138:MET:HE2	1:A:143:ASP:HB2	14	0.13
(1,2313)	1:A:138:MET:HE3	1:A:143:ASP:HB2	14	0.13
(1,2283)	1:A:136:LEU:HG	1:A:140:ILE:HG12	14	0.13

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2283)	1:A:136:LEU:HG	1:A:140:ILE:HG13	14	0.13
(1,2001)	1:A:116:THR:HG21	1:A:121:MET:HG2	12	0.13
(1,2001)	1:A:116:THR:HG21	1:A:121:MET:HG3	12	0.13
(1,2001)	1:A:116:THR:HG22	1:A:121:MET:HG2	12	0.13
(1,2001)	1:A:116:THR:HG22	1:A:121:MET:HG3	12	0.13
(1,2001)	1:A:116:THR:HG23	1:A:121:MET:HG2	12	0.13
(1,2001)	1:A:116:THR:HG23	1:A:121:MET:HG3	12	0.13
(1,191)	1:A:179:HIS:H	1:A:175:ALA:O	15	0.13
(1,1908)	1:A:109:LEU:HG	1:A:111:GLU:HG2	15	0.13
(1,1859)	1:A:104:GLU:HA	1:A:107:GLY:H	8	0.13
(1,1850)	1:A:103:GLU:HB2	1:A:105:GLY:H	19	0.13
(1,1850)	1:A:103:GLU:HB3	1:A:105:GLY:H	19	0.13
(1,1848)	1:A:103:GLU:HG3	1:A:104:GLU:H	19	0.13
(1,179)	1:A:173:ALA:H	1:A:169:GLU:O	19	0.13
(1,173)	1:A:170:ARG:H	1:A:166:ILE:O	19	0.13
(1,1650)	1:A:87:TRP:HE3	1:A:121:MET:HE1	4	0.13
(1,1650)	1:A:87:TRP:HE3	1:A:121:MET:HE2	4	0.13
(1,1650)	1:A:87:TRP:HE3	1:A:121:MET:HE3	4	0.13
(1,1571)	1:A:82:ARG:HG2	1:A:99:LEU:H	12	0.13
(1,1571)	1:A:82:ARG:HG3	1:A:99:LEU:H	12	0.13
(1,153)	1:A:138:MET:H	1:A:134:ASP:O	9	0.13
(1,15)	1:A:22:ARG:H	1:A:116:THR:O	19	0.13
(1,1443)	1:A:71:SER:H	1:A:87:TRP:HA	2	0.13
(1,1414)	1:A:67:GLN:HG2	1:A:68:GLY:HA2	5	0.13
(1,1414)	1:A:67:GLN:HG2	1:A:68:GLY:HA3	5	0.13
(1,1414)	1:A:67:GLN:HG3	1:A:68:GLY:HA2	5	0.13
(1,1414)	1:A:67:GLN:HG3	1:A:68:GLY:HA3	5	0.13
(1,137)	1:A:130:GLU:H	1:A:126:GLY:O	13	0.13
(1,1332)	1:A:61:GLY:H	1:A:74:ILE:HD11	5	0.13
(1,1332)	1:A:61:GLY:H	1:A:74:ILE:HD12	5	0.13
(1,1332)	1:A:61:GLY:H	1:A:74:ILE:HD13	5	0.13
(1,1295)	1:A:57:ASP:HB2	1:A:63:ASN:H	17	0.13
(1,1295)	1:A:57:ASP:HB3	1:A:63:ASN:H	17	0.13
(1,125)	1:A:124:GLU:H	1:A:120:GLN:O	1	0.13
(1,123)	1:A:123:VAL:H	1:A:119:GLU:O	10	0.13
(1,119)	1:A:116:THR:H	1:A:22:ARG:O	5	0.13
(1,119)	1:A:116:THR:H	1:A:22:ARG:O	19	0.13
(1,1171)	1:A:50:TRP:HE1	1:A:136:LEU:HG	4	0.13
(1,1171)	1:A:50:TRP:HE1	1:A:136:LEU:HG	8	0.13
(1,1088)	1:A:44:PRO:HG2	1:A:45:ASN:HB2	12	0.13
(1,1088)	1:A:44:PRO:HG2	1:A:45:ASN:HB3	12	0.13
(1,1088)	1:A:44:PRO:HG3	1:A:45:ASN:HB2	12	0.13

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1088)	1:A:44:PRO:HG3	1:A:45:ASN:HB3	12	0.13
(1,928)	1:A:35:ASP:HB2	1:A:38:TRP:HD1	2	0.12
(1,928)	1:A:35:ASP:HB3	1:A:38:TRP:HD1	2	0.12
(1,904)	1:A:34:VAL:HG21	1:A:101:LEU:H	9	0.12
(1,904)	1:A:34:VAL:HG22	1:A:101:LEU:H	9	0.12
(1,904)	1:A:34:VAL:HG23	1:A:101:LEU:H	9	0.12
(1,890)	1:A:34:VAL:HG11	1:A:103:GLU:HG3	18	0.12
(1,890)	1:A:34:VAL:HG12	1:A:103:GLU:HG3	18	0.12
(1,890)	1:A:34:VAL:HG13	1:A:103:GLU:HG3	18	0.12
(1,882)	1:A:34:VAL:HB	1:A:103:GLU:HG2	12	0.12
(1,882)	1:A:34:VAL:HB	1:A:103:GLU:HG3	12	0.12
(1,848)	1:A:32:ALA:HB1	1:A:36:GLU:H	14	0.12
(1,848)	1:A:32:ALA:HB2	1:A:36:GLU:H	14	0.12
(1,848)	1:A:32:ALA:HB3	1:A:36:GLU:H	14	0.12
(1,825)	1:A:31:ASP:HA	1:A:107:GLY:H	3	0.12
(1,825)	1:A:31:ASP:HA	1:A:107:GLY:H	11	0.12
(1,771)	1:A:29:ARG:HD2	1:A:104:GLU:HG2	8	0.12
(1,771)	1:A:29:ARG:HD2	1:A:104:GLU:HG3	8	0.12
(1,771)	1:A:29:ARG:HD3	1:A:104:GLU:HG2	8	0.12
(1,771)	1:A:29:ARG:HD3	1:A:104:GLU:HG3	8	0.12
(1,746)	1:A:28:GLN:HG3	1:A:29:ARG:H	20	0.12
(1,726)	1:A:27:ARG:HG3	1:A:28:GLN:H	18	0.12
(1,689)	1:A:26:ILE:HD11	1:A:28:GLN:HE22	7	0.12
(1,689)	1:A:26:ILE:HD12	1:A:28:GLN:HE22	7	0.12
(1,689)	1:A:26:ILE:HD13	1:A:28:GLN:HE22	7	0.12
(1,689)	1:A:26:ILE:HD11	1:A:28:GLN:HE22	17	0.12
(1,689)	1:A:26:ILE:HD12	1:A:28:GLN:HE22	17	0.12
(1,689)	1:A:26:ILE:HD13	1:A:28:GLN:HE22	17	0.12
(1,530)	1:A:22:ARG:HD2	1:A:23:SER:H	3	0.12
(1,530)	1:A:22:ARG:HD3	1:A:23:SER:H	3	0.12
(1,530)	1:A:22:ARG:HD2	1:A:23:SER:H	12	0.12
(1,530)	1:A:22:ARG:HD3	1:A:23:SER:H	12	0.12
(1,47)	1:A:47:ILE:H	1:A:43:ASP:O	9	0.12
(1,37)	1:A:39:SER:H	1:A:35:ASP:O	3	0.12
(1,369)	1:A:13:ARG:H	1:A:23:SER:HG	2	0.12
(1,341)	1:A:11:LEU:HD21	1:A:177:LEU:HD11	6	0.12
(1,341)	1:A:11:LEU:HD21	1:A:177:LEU:HD12	6	0.12
(1,341)	1:A:11:LEU:HD21	1:A:177:LEU:HD13	6	0.12
(1,341)	1:A:11:LEU:HD22	1:A:177:LEU:HD11	6	0.12
(1,341)	1:A:11:LEU:HD22	1:A:177:LEU:HD12	6	0.12
(1,341)	1:A:11:LEU:HD22	1:A:177:LEU:HD13	6	0.12
(1,341)	1:A:11:LEU:HD23	1:A:177:LEU:HD11	6	0.12

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,341)	1:A:11:LEU:HD23	1:A:177:LEU:HD12	6	0.12
(1,341)	1:A:11:LEU:HD23	1:A:177:LEU:HD13	6	0.12
(1,335)	1:A:11:LEU:HD11	1:A:22:ARG:HD2	20	0.12
(1,335)	1:A:11:LEU:HD11	1:A:22:ARG:HD3	20	0.12
(1,335)	1:A:11:LEU:HD12	1:A:22:ARG:HD2	20	0.12
(1,335)	1:A:11:LEU:HD12	1:A:22:ARG:HD3	20	0.12
(1,335)	1:A:11:LEU:HD13	1:A:22:ARG:HD2	20	0.12
(1,335)	1:A:11:LEU:HD13	1:A:22:ARG:HD3	20	0.12
(1,332)	1:A:11:LEU:HD11	1:A:181:GLY:H	12	0.12
(1,332)	1:A:11:LEU:HD12	1:A:181:GLY:H	12	0.12
(1,332)	1:A:11:LEU:HD13	1:A:181:GLY:H	12	0.12
(1,326)	1:A:11:LEU:HD11	1:A:177:LEU:HD11	4	0.12
(1,326)	1:A:11:LEU:HD11	1:A:177:LEU:HD12	4	0.12
(1,326)	1:A:11:LEU:HD11	1:A:177:LEU:HD13	4	0.12
(1,326)	1:A:11:LEU:HD12	1:A:177:LEU:HD11	4	0.12
(1,326)	1:A:11:LEU:HD12	1:A:177:LEU:HD12	4	0.12
(1,326)	1:A:11:LEU:HD12	1:A:177:LEU:HD13	4	0.12
(1,326)	1:A:11:LEU:HD13	1:A:177:LEU:HD11	4	0.12
(1,326)	1:A:11:LEU:HD13	1:A:177:LEU:HD12	4	0.12
(1,326)	1:A:11:LEU:HD13	1:A:177:LEU:HD13	4	0.12
(1,326)	1:A:11:LEU:HD11	1:A:177:LEU:HD11	19	0.12
(1,326)	1:A:11:LEU:HD11	1:A:177:LEU:HD12	19	0.12
(1,326)	1:A:11:LEU:HD11	1:A:177:LEU:HD13	19	0.12
(1,326)	1:A:11:LEU:HD12	1:A:177:LEU:HD11	19	0.12
(1,326)	1:A:11:LEU:HD12	1:A:177:LEU:HD12	19	0.12
(1,326)	1:A:11:LEU:HD12	1:A:177:LEU:HD13	19	0.12
(1,326)	1:A:11:LEU:HD13	1:A:177:LEU:HD11	19	0.12
(1,326)	1:A:11:LEU:HD13	1:A:177:LEU:HD12	19	0.12
(1,326)	1:A:11:LEU:HD13	1:A:177:LEU:HD13	19	0.12
(1,297)	1:A:11:LEU:H	1:A:11:LEU:HG	2	0.12
(1,297)	1:A:11:LEU:H	1:A:11:LEU:HG	13	0.12
(1,297)	1:A:11:LEU:H	1:A:11:LEU:HG	17	0.12
(1,2703)	1:A:179:HIS:H	1:A:179:HIS:HB3	6	0.12
(1,2703)	1:A:179:HIS:H	1:A:179:HIS:HB3	15	0.12
(1,2664)	1:A:177:LEU:H	1:A:177:LEU:HB3	8	0.12
(1,2629)	1:A:174:TRP:HZ3	1:A:177:LEU:HD21	13	0.12
(1,2629)	1:A:174:TRP:HZ3	1:A:177:LEU:HD22	13	0.12
(1,2629)	1:A:174:TRP:HZ3	1:A:177:LEU:HD23	13	0.12
(1,2629)	1:A:174:TRP:HZ3	1:A:177:LEU:HD21	16	0.12
(1,2629)	1:A:174:TRP:HZ3	1:A:177:LEU:HD22	16	0.12
(1,2629)	1:A:174:TRP:HZ3	1:A:177:LEU:HD23	16	0.12
(1,257)	1:A:9:ARG:HE	1:A:174:TRP:HD1	10	0.12

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,255)	1:A:9:ARG:HE	1:A:130:GLU:HG2	3	0.12
(1,255)	1:A:9:ARG:HE	1:A:130:GLU:HG3	3	0.12
(1,2531)	1:A:165:ARG:HG2	1:A:166:ILE:H	9	0.12
(1,2531)	1:A:165:ARG:HG3	1:A:166:ILE:H	9	0.12
(1,2526)	1:A:165:ARG:HA	1:A:168:GLN:HG2	10	0.12
(1,2526)	1:A:165:ARG:HA	1:A:168:GLN:HG3	10	0.12
(1,2516)	1:A:164:MET:HE1	1:A:168:GLN:HE21	20	0.12
(1,2516)	1:A:164:MET:HE1	1:A:168:GLN:HE22	20	0.12
(1,2516)	1:A:164:MET:HE2	1:A:168:GLN:HE21	20	0.12
(1,2516)	1:A:164:MET:HE2	1:A:168:GLN:HE22	20	0.12
(1,2516)	1:A:164:MET:HE3	1:A:168:GLN:HE21	20	0.12
(1,2516)	1:A:164:MET:HE3	1:A:168:GLN:HE22	20	0.12
(1,2477)	1:A:161:PRO:HA	1:A:164:MET:HG2	19	0.12
(1,2477)	1:A:161:PRO:HA	1:A:164:MET:HG3	19	0.12
(1,2458)	1:A:158:GLU:HA	1:A:159:PRO:HD2	5	0.12
(1,2458)	1:A:158:GLU:HA	1:A:159:PRO:HD3	5	0.12
(1,2442)	1:A:155:GLU:HB2	1:A:156:GLU:H	5	0.12
(1,2442)	1:A:155:GLU:HB3	1:A:156:GLU:H	5	0.12
(1,2432)	1:A:153:ALA:HB1	1:A:154:ALA:H	20	0.12
(1,2432)	1:A:153:ALA:HB2	1:A:154:ALA:H	20	0.12
(1,2432)	1:A:153:ALA:HB3	1:A:154:ALA:H	20	0.12
(1,2400)	1:A:149:VAL:HB	1:A:150:PRO:HD2	1	0.12
(1,2400)	1:A:149:VAL:HB	1:A:150:PRO:HD3	1	0.12
(1,2363)	1:A:142:GLY:H	1:A:143:ASP:H	3	0.12
(1,2354)	1:A:141:ARG:H	1:A:142:GLY:H	10	0.12
(1,2316)	1:A:138:MET:HE1	1:A:144:LEU:HD11	13	0.12
(1,2316)	1:A:138:MET:HE1	1:A:144:LEU:HD12	13	0.12
(1,2316)	1:A:138:MET:HE1	1:A:144:LEU:HD13	13	0.12
(1,2316)	1:A:138:MET:HE2	1:A:144:LEU:HD11	13	0.12
(1,2316)	1:A:138:MET:HE2	1:A:144:LEU:HD12	13	0.12
(1,2316)	1:A:138:MET:HE2	1:A:144:LEU:HD13	13	0.12
(1,2316)	1:A:138:MET:HE3	1:A:144:LEU:HD11	13	0.12
(1,2316)	1:A:138:MET:HE3	1:A:144:LEU:HD12	13	0.12
(1,2316)	1:A:138:MET:HE3	1:A:144:LEU:HD13	13	0.12
(1,2191)	1:A:127:VAL:HG21	1:A:174:TRP:H	8	0.12
(1,2191)	1:A:127:VAL:HG22	1:A:174:TRP:H	8	0.12
(1,2191)	1:A:127:VAL:HG23	1:A:174:TRP:H	8	0.12
(1,2102)	1:A:123:VAL:HA	1:A:178:VAL:H	2	0.12
(1,2050)	1:A:120:GLN:HB2	1:A:121:MET:H	4	0.12
(1,191)	1:A:179:HIS:H	1:A:175:ALA:O	9	0.12
(1,185)	1:A:176:ALA:H	1:A:172:GLU:O	1	0.12
(1,1849)	1:A:103:GLU:HB2	1:A:104:GLU:H	16	0.12

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1849)	1:A:103:GLU:HB3	1:A:104:GLU:H	16	0.12
(1,1848)	1:A:103:GLU:HG3	1:A:104:GLU:H	2	0.12
(1,1848)	1:A:103:GLU:HG3	1:A:104:GLU:H	8	0.12
(1,182)	1:A:174:TRP:N	1:A:170:ARG:O	13	0.12
(1,1818)	1:A:101:LEU:HD21	1:A:109:LEU:HB2	5	0.12
(1,1818)	1:A:101:LEU:HD21	1:A:109:LEU:HB3	5	0.12
(1,1818)	1:A:101:LEU:HD22	1:A:109:LEU:HB2	5	0.12
(1,1818)	1:A:101:LEU:HD22	1:A:109:LEU:HB3	5	0.12
(1,1818)	1:A:101:LEU:HD23	1:A:109:LEU:HB2	5	0.12
(1,1818)	1:A:101:LEU:HD23	1:A:109:LEU:HB3	5	0.12
(1,179)	1:A:173:ALA:H	1:A:169:GLU:O	4	0.12
(1,179)	1:A:173:ALA:H	1:A:169:GLU:O	16	0.12
(1,179)	1:A:173:ALA:H	1:A:169:GLU:O	17	0.12
(1,1731)	1:A:96:GLU:H	1:A:114:HIS:HD2	19	0.12
(1,1650)	1:A:87:TRP:HE3	1:A:121:MET:HE1	2	0.12
(1,1650)	1:A:87:TRP:HE3	1:A:121:MET:HE2	2	0.12
(1,1650)	1:A:87:TRP:HE3	1:A:121:MET:HE3	2	0.12
(1,1650)	1:A:87:TRP:HE3	1:A:121:MET:HE1	19	0.12
(1,1650)	1:A:87:TRP:HE3	1:A:121:MET:HE2	19	0.12
(1,1650)	1:A:87:TRP:HE3	1:A:121:MET:HE3	19	0.12
(1,165)	1:A:166:ILE:H	1:A:162:GLU:O	20	0.12
(1,1649)	1:A:87:TRP:HE1	1:A:89:TYR:HE1	9	0.12
(1,1649)	1:A:87:TRP:HE1	1:A:89:TYR:HE2	9	0.12
(1,1649)	1:A:87:TRP:HE1	1:A:89:TYR:HE1	13	0.12
(1,1649)	1:A:87:TRP:HE1	1:A:89:TYR:HE2	13	0.12
(1,1648)	1:A:87:TRP:HE1	1:A:89:TYR:HD1	12	0.12
(1,1648)	1:A:87:TRP:HE1	1:A:89:TYR:HD2	12	0.12
(1,163)	1:A:165:ARG:H	1:A:161:PRO:O	19	0.12
(1,15)	1:A:22:ARG:H	1:A:116:THR:O	16	0.12
(1,1473)	1:A:74:ILE:HA	1:A:85:ILE:HG21	6	0.12
(1,1473)	1:A:74:ILE:HA	1:A:85:ILE:HG22	6	0.12
(1,1473)	1:A:74:ILE:HA	1:A:85:ILE:HG23	6	0.12
(1,1443)	1:A:71:SER:H	1:A:87:TRP:HA	13	0.12
(1,1374)	1:A:65:ALA:HA	1:A:71:SER:HA	14	0.12
(1,1349)	1:A:63:ASN:HB2	1:A:64:PHE:H	18	0.12
(1,1349)	1:A:63:ASN:HB3	1:A:64:PHE:H	18	0.12
(1,1317)	1:A:59:ARG:H	1:A:74:ILE:HG21	15	0.12
(1,1317)	1:A:59:ARG:H	1:A:74:ILE:HG22	15	0.12
(1,1317)	1:A:59:ARG:H	1:A:74:ILE:HG23	15	0.12
(1,1236)	1:A:52:ILE:HG21	1:A:67:GLN:H	6	0.12
(1,1236)	1:A:52:ILE:HG22	1:A:67:GLN:H	6	0.12
(1,1236)	1:A:52:ILE:HG23	1:A:67:GLN:H	6	0.12

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,123)	1:A:123:VAL:H	1:A:119:GLU:O	15	0.12
(1,1190)	1:A:50:TRP:HZ3	1:A:51:PHE:HE1	19	0.12
(1,1190)	1:A:50:TRP:HZ3	1:A:51:PHE:HE2	19	0.12
(1,1182)	1:A:50:TRP:HH2	1:A:136:LEU:HB2	20	0.12
(1,1182)	1:A:50:TRP:HH2	1:A:136:LEU:HB3	20	0.12
(1,1181)	1:A:50:TRP:HH2	1:A:133:LEU:HD21	11	0.12
(1,1181)	1:A:50:TRP:HH2	1:A:133:LEU:HD22	11	0.12
(1,1181)	1:A:50:TRP:HH2	1:A:133:LEU:HD23	11	0.12
(1,115)	1:A:114:HIS:H	1:A:24:ILE:O	6	0.12
(1,1118)	1:A:46:ARG:HD2	1:A:139:PHE:HZ	9	0.12
(1,1118)	1:A:46:ARG:HD3	1:A:139:PHE:HZ	9	0.12
(1,1088)	1:A:44:PRO:HG2	1:A:45:ASN:HB2	16	0.12
(1,1088)	1:A:44:PRO:HG2	1:A:45:ASN:HB3	16	0.12
(1,1088)	1:A:44:PRO:HG3	1:A:45:ASN:HB2	16	0.12
(1,1088)	1:A:44:PRO:HG3	1:A:45:ASN:HB3	16	0.12
(1,101)	1:A:102:SER:H	1:A:109:LEU:O	6	0.12
(1,101)	1:A:102:SER:H	1:A:109:LEU:O	17	0.12
(1,928)	1:A:35:ASP:HB2	1:A:38:TRP:HD1	19	0.11
(1,928)	1:A:35:ASP:HB3	1:A:38:TRP:HD1	19	0.11
(1,9)	1:A:16:ILE:H	1:A:19:GLY:O	11	0.11
(1,897)	1:A:34:VAL:HG11	1:A:37:VAL:H	3	0.11
(1,897)	1:A:34:VAL:HG12	1:A:37:VAL:H	3	0.11
(1,897)	1:A:34:VAL:HG13	1:A:37:VAL:H	3	0.11
(1,897)	1:A:34:VAL:HG11	1:A:37:VAL:H	14	0.11
(1,897)	1:A:34:VAL:HG12	1:A:37:VAL:H	14	0.11
(1,897)	1:A:34:VAL:HG13	1:A:37:VAL:H	14	0.11
(1,882)	1:A:34:VAL:HB	1:A:103:GLU:HG2	14	0.11
(1,882)	1:A:34:VAL:HB	1:A:103:GLU:HG3	14	0.11
(1,862)	1:A:33:PRO:HG3	1:A:36:GLU:H	3	0.11
(1,862)	1:A:33:PRO:HG3	1:A:36:GLU:H	7	0.11
(1,825)	1:A:31:ASP:HA	1:A:107:GLY:H	17	0.11
(1,805)	1:A:30:TYR:HD1	1:A:137:GLY:HA3	5	0.11
(1,805)	1:A:30:TYR:HD2	1:A:137:GLY:HA3	5	0.11
(1,766)	1:A:29:ARG:HE	1:A:104:GLU:HB2	6	0.11
(1,766)	1:A:29:ARG:HE	1:A:104:GLU:HB3	6	0.11
(1,745)	1:A:28:GLN:HG2	1:A:29:ARG:H	3	0.11
(1,742)	1:A:28:GLN:HE21	1:A:133:LEU:HD21	14	0.11
(1,742)	1:A:28:GLN:HE21	1:A:133:LEU:HD22	14	0.11
(1,742)	1:A:28:GLN:HE21	1:A:133:LEU:HD23	14	0.11
(1,732)	1:A:27:ARG:HG2	1:A:109:LEU:HD21	14	0.11
(1,732)	1:A:27:ARG:HG2	1:A:109:LEU:HD22	14	0.11
(1,732)	1:A:27:ARG:HG2	1:A:109:LEU:HD23	14	0.11

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,732)	1:A:27:ARG:HG3	1:A:109:LEU:HD21	14	0.11
(1,732)	1:A:27:ARG:HG3	1:A:109:LEU:HD22	14	0.11
(1,732)	1:A:27:ARG:HG3	1:A:109:LEU:HD23	14	0.11
(1,719)	1:A:27:ARG:HE	1:A:109:LEU:HD21	19	0.11
(1,719)	1:A:27:ARG:HE	1:A:109:LEU:HD22	19	0.11
(1,719)	1:A:27:ARG:HE	1:A:109:LEU:HD23	19	0.11
(1,673)	1:A:26:ILE:HD11	1:A:112:LEU:HD11	14	0.11
(1,673)	1:A:26:ILE:HD11	1:A:112:LEU:HD12	14	0.11
(1,673)	1:A:26:ILE:HD11	1:A:112:LEU:HD13	14	0.11
(1,673)	1:A:26:ILE:HD12	1:A:112:LEU:HD11	14	0.11
(1,673)	1:A:26:ILE:HD12	1:A:112:LEU:HD12	14	0.11
(1,673)	1:A:26:ILE:HD12	1:A:112:LEU:HD13	14	0.11
(1,673)	1:A:26:ILE:HD13	1:A:112:LEU:HD11	14	0.11
(1,673)	1:A:26:ILE:HD13	1:A:112:LEU:HD12	14	0.11
(1,673)	1:A:26:ILE:HD13	1:A:112:LEU:HD13	14	0.11
(1,63)	1:A:65:ALA:H	1:A:55:LYS:O	20	0.11
(1,57)	1:A:61:GLY:H	1:A:74:ILE:O	16	0.11
(1,508)	1:A:21:ALA:HB1	1:A:117:THR:HG21	4	0.11
(1,508)	1:A:21:ALA:HB1	1:A:117:THR:HG22	4	0.11
(1,508)	1:A:21:ALA:HB1	1:A:117:THR:HG23	4	0.11
(1,508)	1:A:21:ALA:HB2	1:A:117:THR:HG21	4	0.11
(1,508)	1:A:21:ALA:HB2	1:A:117:THR:HG22	4	0.11
(1,508)	1:A:21:ALA:HB2	1:A:117:THR:HG23	4	0.11
(1,508)	1:A:21:ALA:HB3	1:A:117:THR:HG21	4	0.11
(1,508)	1:A:21:ALA:HB3	1:A:117:THR:HG22	4	0.11
(1,508)	1:A:21:ALA:HB3	1:A:117:THR:HG23	4	0.11
(1,47)	1:A:47:ILE:H	1:A:43:ASP:O	3	0.11
(1,47)	1:A:47:ILE:H	1:A:43:ASP:O	10	0.11
(1,45)	1:A:43:ASP:H	1:A:39:SER:O	3	0.11
(1,43)	1:A:42:THR:H	1:A:38:TRP:O	7	0.11
(1,37)	1:A:39:SER:H	1:A:35:ASP:O	19	0.11
(1,346)	1:A:11:LEU:HD21	1:A:22:ARG:HG2	19	0.11
(1,346)	1:A:11:LEU:HD21	1:A:22:ARG:HG3	19	0.11
(1,346)	1:A:11:LEU:HD22	1:A:22:ARG:HG2	19	0.11
(1,346)	1:A:11:LEU:HD22	1:A:22:ARG:HG3	19	0.11
(1,346)	1:A:11:LEU:HD23	1:A:22:ARG:HG2	19	0.11
(1,346)	1:A:11:LEU:HD23	1:A:22:ARG:HG3	19	0.11
(1,338)	1:A:11:LEU:HD21	1:A:174:TRP:HH2	13	0.11
(1,338)	1:A:11:LEU:HD22	1:A:174:TRP:HH2	13	0.11
(1,338)	1:A:11:LEU:HD23	1:A:174:TRP:HH2	13	0.11
(1,331)	1:A:11:LEU:HD11	1:A:180:SER:H	19	0.11
(1,331)	1:A:11:LEU:HD12	1:A:180:SER:H	19	0.11

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,331)	1:A:11:LEU:HD13	1:A:180:SER:H	19	0.11
(1,326)	1:A:11:LEU:HD11	1:A:177:LEU:HD11	1	0.11
(1,326)	1:A:11:LEU:HD11	1:A:177:LEU:HD12	1	0.11
(1,326)	1:A:11:LEU:HD11	1:A:177:LEU:HD13	1	0.11
(1,326)	1:A:11:LEU:HD12	1:A:177:LEU:HD11	1	0.11
(1,326)	1:A:11:LEU:HD12	1:A:177:LEU:HD12	1	0.11
(1,326)	1:A:11:LEU:HD12	1:A:177:LEU:HD13	1	0.11
(1,326)	1:A:11:LEU:HD13	1:A:177:LEU:HD11	1	0.11
(1,326)	1:A:11:LEU:HD13	1:A:177:LEU:HD12	1	0.11
(1,326)	1:A:11:LEU:HD13	1:A:177:LEU:HD13	1	0.11
(1,30)	1:A:29:ARG:N	1:A:6:ALA:O	20	0.11
(1,3)	1:A:10:ALA:H	1:A:25:ILE:O	12	0.11
(1,29)	1:A:29:ARG:H	1:A:6:ALA:O	6	0.11
(1,29)	1:A:29:ARG:H	1:A:6:ALA:O	8	0.11
(1,2703)	1:A:179:HIS:H	1:A:179:HIS:HB3	2	0.11
(1,2703)	1:A:179:HIS:H	1:A:179:HIS:HB3	4	0.11
(1,2703)	1:A:179:HIS:H	1:A:179:HIS:HB3	11	0.11
(1,2703)	1:A:179:HIS:H	1:A:179:HIS:HB3	17	0.11
(1,2703)	1:A:179:HIS:H	1:A:179:HIS:HB3	18	0.11
(1,2703)	1:A:179:HIS:H	1:A:179:HIS:HB3	19	0.11
(1,2703)	1:A:179:HIS:H	1:A:179:HIS:HB3	20	0.11
(1,269)	1:A:9:ARG:HD2	1:A:174:TRP:HE1	13	0.11
(1,269)	1:A:9:ARG:HD3	1:A:174:TRP:HE1	13	0.11
(1,2664)	1:A:177:LEU:H	1:A:177:LEU:HB3	16	0.11
(1,2664)	1:A:177:LEU:H	1:A:177:LEU:HB3	17	0.11
(1,2513)	1:A:164:MET:HE1	1:A:165:ARG:H	11	0.11
(1,2513)	1:A:164:MET:HE2	1:A:165:ARG:H	11	0.11
(1,2513)	1:A:164:MET:HE3	1:A:165:ARG:H	11	0.11
(1,2480)	1:A:161:PRO:HG2	1:A:162:GLU:H	8	0.11
(1,2480)	1:A:161:PRO:HG3	1:A:162:GLU:H	8	0.11
(1,2435)	1:A:154:ALA:HB1	1:A:155:GLU:H	14	0.11
(1,2435)	1:A:154:ALA:HB2	1:A:155:GLU:H	14	0.11
(1,2435)	1:A:154:ALA:HB3	1:A:155:GLU:H	14	0.11
(1,2363)	1:A:142:GLY:H	1:A:143:ASP:H	10	0.11
(1,2354)	1:A:141:ARG:H	1:A:142:GLY:H	19	0.11
(1,2335)	1:A:139:PHE:HD1	1:A:144:LEU:HG	11	0.11
(1,2335)	1:A:139:PHE:HD2	1:A:144:LEU:HG	11	0.11
(1,2276)	1:A:135:PHE:HE1	1:A:138:MET:HE1	9	0.11
(1,2276)	1:A:135:PHE:HE1	1:A:138:MET:HE2	9	0.11
(1,2276)	1:A:135:PHE:HE1	1:A:138:MET:HE3	9	0.11
(1,2276)	1:A:135:PHE:HE2	1:A:138:MET:HE1	9	0.11
(1,2276)	1:A:135:PHE:HE2	1:A:138:MET:HE2	9	0.11

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2276)	1:A:135:PHE:HE2	1:A:138:MET:HE3	9	0.11
(1,2133)	1:A:124:GLU:HA	1:A:127:VAL:HB	4	0.11
(1,2050)	1:A:120:GLN:HB2	1:A:121:MET:H	16	0.11
(1,2050)	1:A:120:GLN:HB2	1:A:121:MET:H	18	0.11
(1,2030)	1:A:119:GLU:HA	1:A:122:LEU:HD11	15	0.11
(1,2030)	1:A:119:GLU:HA	1:A:122:LEU:HD12	15	0.11
(1,2030)	1:A:119:GLU:HA	1:A:122:LEU:HD13	15	0.11
(1,1956)	1:A:112:LEU:HD21	1:A:133:LEU:HD11	17	0.11
(1,1956)	1:A:112:LEU:HD21	1:A:133:LEU:HD12	17	0.11
(1,1956)	1:A:112:LEU:HD21	1:A:133:LEU:HD13	17	0.11
(1,1956)	1:A:112:LEU:HD22	1:A:133:LEU:HD11	17	0.11
(1,1956)	1:A:112:LEU:HD22	1:A:133:LEU:HD12	17	0.11
(1,1956)	1:A:112:LEU:HD22	1:A:133:LEU:HD13	17	0.11
(1,1956)	1:A:112:LEU:HD23	1:A:133:LEU:HD11	17	0.11
(1,1956)	1:A:112:LEU:HD23	1:A:133:LEU:HD12	17	0.11
(1,1956)	1:A:112:LEU:HD23	1:A:133:LEU:HD13	17	0.11
(1,1950)	1:A:112:LEU:HD21	1:A:114:HIS:HB3	11	0.11
(1,1950)	1:A:112:LEU:HD22	1:A:114:HIS:HB3	11	0.11
(1,1950)	1:A:112:LEU:HD23	1:A:114:HIS:HB3	11	0.11
(1,1950)	1:A:112:LEU:HD21	1:A:114:HIS:HB3	14	0.11
(1,1950)	1:A:112:LEU:HD22	1:A:114:HIS:HB3	14	0.11
(1,1950)	1:A:112:LEU:HD23	1:A:114:HIS:HB3	14	0.11
(1,1944)	1:A:112:LEU:HD11	1:A:113:GLU:H	7	0.11
(1,1944)	1:A:112:LEU:HD12	1:A:113:GLU:H	7	0.11
(1,1944)	1:A:112:LEU:HD13	1:A:113:GLU:H	7	0.11
(1,1922)	1:A:110:LEU:HD11	1:A:133:LEU:HB2	7	0.11
(1,1922)	1:A:110:LEU:HD11	1:A:133:LEU:HB3	7	0.11
(1,1922)	1:A:110:LEU:HD12	1:A:133:LEU:HB2	7	0.11
(1,1922)	1:A:110:LEU:HD12	1:A:133:LEU:HB3	7	0.11
(1,1922)	1:A:110:LEU:HD13	1:A:133:LEU:HB2	7	0.11
(1,1922)	1:A:110:LEU:HD13	1:A:133:LEU:HB3	7	0.11
(1,1821)	1:A:101:LEU:HD21	1:A:110:LEU:HG	19	0.11
(1,1821)	1:A:101:LEU:HD22	1:A:110:LEU:HG	19	0.11
(1,1821)	1:A:101:LEU:HD23	1:A:110:LEU:HG	19	0.11
(1,179)	1:A:173:ALA:H	1:A:169:GLU:O	14	0.11
(1,1709)	1:A:92:LYS:HA	1:A:92:LYS:HE2	9	0.11
(1,1709)	1:A:92:LYS:HA	1:A:92:LYS:HE3	9	0.11
(1,1697)	1:A:90:GLU:HA	1:A:91:GLY:H	4	0.11
(1,168)	1:A:167:SER:N	1:A:163:MET:O	20	0.11
(1,1573)	1:A:83:LEU:H	1:A:83:LEU:HD21	2	0.11
(1,1573)	1:A:83:LEU:H	1:A:83:LEU:HD22	2	0.11
(1,1573)	1:A:83:LEU:H	1:A:83:LEU:HD23	2	0.11

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1457)	1:A:73:ASP:H	1:A:74:ILE:HD11	14	0.11
(1,1457)	1:A:73:ASP:H	1:A:74:ILE:HD12	14	0.11
(1,1457)	1:A:73:ASP:H	1:A:74:ILE:HD13	14	0.11
(1,13)	1:A:21:ALA:H	1:A:14:ARG:O	1	0.11
(1,1269)	1:A:55:LYS:HB2	1:A:56:GLY:H	18	0.11
(1,1269)	1:A:55:LYS:HB3	1:A:56:GLY:H	18	0.11
(1,1255)	1:A:54:PRO:HB2	1:A:64:PHE:HB2	14	0.11
(1,1255)	1:A:54:PRO:HB2	1:A:64:PHE:HB3	14	0.11
(1,1255)	1:A:54:PRO:HB3	1:A:64:PHE:HB2	14	0.11
(1,1255)	1:A:54:PRO:HB3	1:A:64:PHE:HB3	14	0.11
(1,1238)	1:A:52:ILE:HG21	1:A:67:GLN:HG2	9	0.11
(1,1238)	1:A:52:ILE:HG21	1:A:67:GLN:HG3	9	0.11
(1,1238)	1:A:52:ILE:HG22	1:A:67:GLN:HG2	9	0.11
(1,1238)	1:A:52:ILE:HG22	1:A:67:GLN:HG3	9	0.11
(1,1238)	1:A:52:ILE:HG23	1:A:67:GLN:HG2	9	0.11
(1,1238)	1:A:52:ILE:HG23	1:A:67:GLN:HG3	9	0.11
(1,123)	1:A:123:VAL:H	1:A:119:GLU:O	6	0.11
(1,1226)	1:A:52:ILE:HD11	1:A:69:ASN:HD21	11	0.11
(1,1226)	1:A:52:ILE:HD11	1:A:69:ASN:HD22	11	0.11
(1,1226)	1:A:52:ILE:HD12	1:A:69:ASN:HD21	11	0.11
(1,1226)	1:A:52:ILE:HD12	1:A:69:ASN:HD22	11	0.11
(1,1226)	1:A:52:ILE:HD13	1:A:69:ASN:HD21	11	0.11
(1,1226)	1:A:52:ILE:HD13	1:A:69:ASN:HD22	11	0.11
(1,1216)	1:A:52:ILE:HD11	1:A:66:LEU:HA	10	0.11
(1,1216)	1:A:52:ILE:HD12	1:A:66:LEU:HA	10	0.11
(1,1216)	1:A:52:ILE:HD13	1:A:66:LEU:HA	10	0.11
(1,1190)	1:A:50:TRP:HZ3	1:A:51:PHE:HE1	11	0.11
(1,1190)	1:A:50:TRP:HZ3	1:A:51:PHE:HE2	11	0.11
(1,119)	1:A:116:THR:H	1:A:22:ARG:O	3	0.11
(1,119)	1:A:116:THR:H	1:A:22:ARG:O	6	0.11
(1,119)	1:A:116:THR:H	1:A:22:ARG:O	17	0.11
(1,1170)	1:A:50:TRP:H	1:A:51:PHE:H	1	0.11
(1,1170)	1:A:50:TRP:H	1:A:51:PHE:H	5	0.11
(1,1151)	1:A:48:ASN:HB2	1:A:53:GLU:HA	19	0.11
(1,1151)	1:A:48:ASN:HB3	1:A:53:GLU:HA	19	0.11
(1,1088)	1:A:44:PRO:HG2	1:A:45:ASN:HB2	2	0.11
(1,1088)	1:A:44:PRO:HG2	1:A:45:ASN:HB3	2	0.11
(1,1088)	1:A:44:PRO:HG3	1:A:45:ASN:HB2	2	0.11
(1,1088)	1:A:44:PRO:HG3	1:A:45:ASN:HB3	2	0.11
(1,101)	1:A:102:SER:H	1:A:109:LEU:O	4	0.11
(1,1002)	1:A:38:TRP:HE3	1:A:101:LEU:HD11	7	0.11
(1,1002)	1:A:38:TRP:HE3	1:A:101:LEU:HD12	7	0.11

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1002)	1:A:38:TRP:HE3	1:A:101:LEU:HD13	7	0.11

10 Dihedral-angle violation analysis

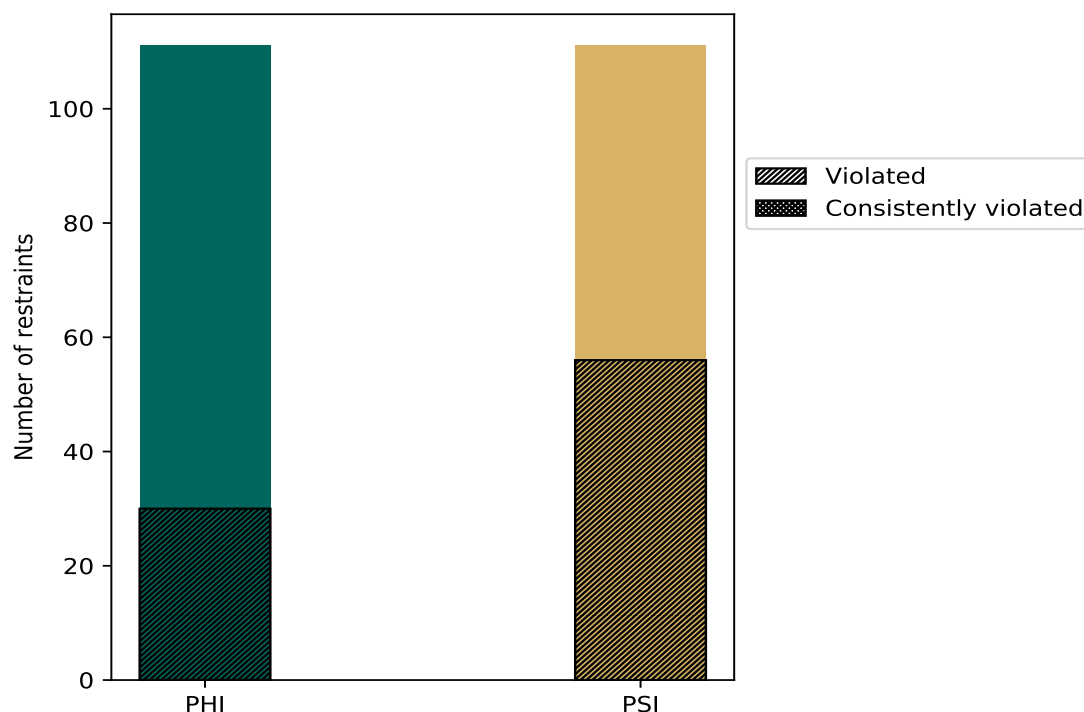
10.1 Summary of dihedral-angle violations

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

Angle type	Count	% ¹	Violated ³			Consistently Violated ⁴		
			Count	% ²	% ¹	Count	% ²	% ¹
PHI	111	50.0	30	27.0	13.5	0	0.0	0.0
PSI	111	50.0	56	50.5	25.2	0	0.0	0.0
Total	222	100.0	86	38.7	38.7	0	0.0	0.0

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

10.1.1 Bar chart : Distribution of dihedral-angles and violations



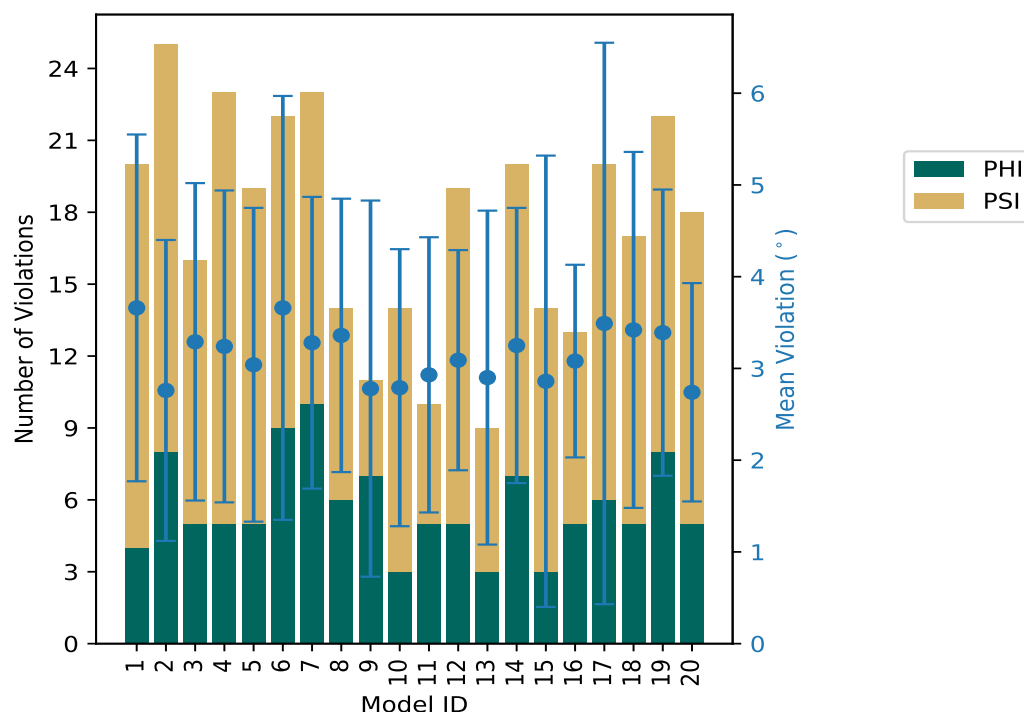
Violated and consistently violated restraints are shown using different hatch patterns in their respective categories

10.2 Dihedral-angle violation statistics in each model

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

Model ID	Number of violations			Mean (°)	Max (°)	Std. deviation (°)
	PHI	PSI	Total			
1	4	16	20	3.66	9.7	1.89
2	8	17	25	2.76	7.5	1.64
3	5	11	16	3.29	7.9	1.73
4	5	18	23	3.24	7.1	1.7
5	5	14	19	3.04	7.3	1.71
6	9	13	22	3.66	11.1	2.31
7	10	13	23	3.28	6.1	1.59
8	6	8	14	3.36	5.6	1.49
9	7	4	11	2.78	7.8	2.05
10	3	11	14	2.79	6.5	1.51
11	5	5	10	2.93	5.4	1.5
12	5	14	19	3.09	5.5	1.2
13	3	6	9	2.9	6.5	1.82
14	7	13	20	3.25	6.7	1.5
15	3	11	14	2.86	11.1	2.46
16	5	8	13	3.08	4.7	1.05
17	6	14	20	3.49	15.2	3.06
18	5	12	17	3.42	7.6	1.94
19	8	14	22	3.39	7.3	1.56
20	5	13	18	2.74	5.2	1.19

10.2.1 Bar graph : Dihedral violation statistics for each model



The mean and the standard deviation are shown in blue with respect to the y axis on the right

10.3 Violation statistics in the ensemble

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

Number of violated restraints			Fraction of the ensemble	
PHI	PSI	Total	Count ¹	%
11	15	26	1	5.0
6	11	17	2	10.0
2	4	6	3	15.0
4	6	10	4	20.0
1	5	6	5	25.0
0	4	4	6	30.0
0	4	4	7	35.0
1	3	4	8	40.0
3	0	3	9	45.0
0	0	0	10	50.0
1	1	2	11	55.0
0	0	0	12	60.0

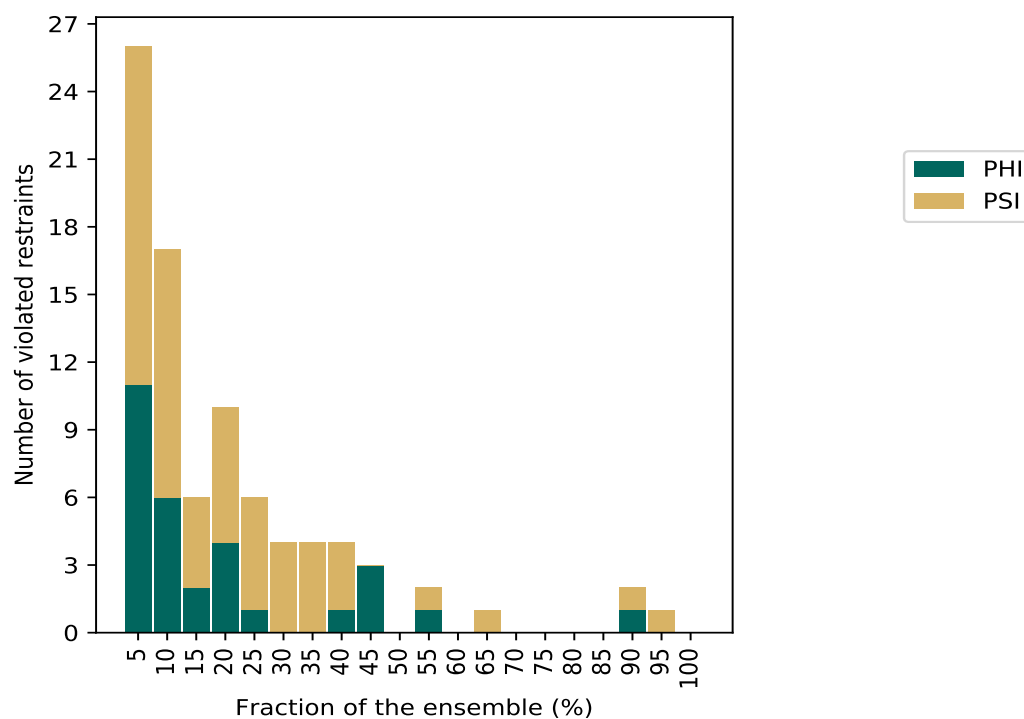
Continued on next page...

Continued from previous page...

Number of violated restraints			Fraction of the ensemble	
PHI	PSI	Total	Count ¹	%
0	1	1	13	65.0
0	0	0	14	70.0
0	0	0	15	75.0
0	0	0	16	80.0
0	0	0	17	85.0
1	1	2	18	90.0
0	1	1	19	95.0
0	0	0	20	100.0

¹ Number of models with violations

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

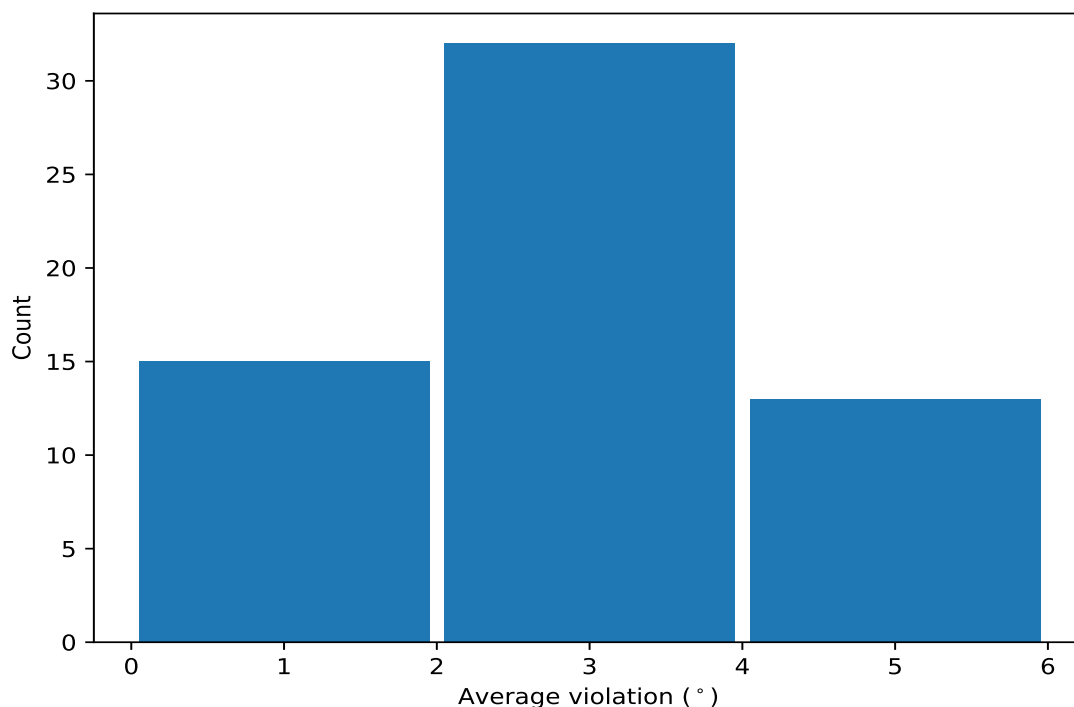


10.4 Most violated dihedral-angle restraints

10.4.1 Histogram : Distribution of mean dihedral-angle violations

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

in the ensemble



10.4.2 Table: Most violated dihedral-angle restraints

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

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Models ¹	Mean (°)	SD ² (°)
(1,122)	1:A:105:GLY:N	1:A:105:GLY:CA	1:A:105:GLY:C	1:A:106:ASP:N	6	4.72	4.93
(1,4)	1:A:8:GLU:N	1:A:8:GLU:CA	1:A:8:GLU:C	1:A:9:ARG:N	7	4.36	2.55
(1,36)	1:A:27:ARG:N	1:A:27:ARG:CA	1:A:27:ARG:C	1:A:28:GLN:N	6	3.77	1.75
(1,104)	1:A:96:GLU:N	1:A:96:GLU:CA	1:A:96:GLU:C	1:A:97:VAL:N	8	3.71	1.79
(1,34)	1:A:26:ILE:N	1:A:26:ILE:CA	1:A:26:ILE:C	1:A:27:ARG:N	18	3.53	1.39
(1,8)	1:A:10:ALA:N	1:A:10:ALA:CA	1:A:10:ALA:C	1:A:11:LEU:N	8	4.34	1.94
(1,38)	1:A:28:GLN:N	1:A:28:GLN:CA	1:A:28:GLN:C	1:A:29:ARG:N	5	4.06	1.48
(1,140)	1:A:115:ALA:N	1:A:115:ALA:CA	1:A:115:ALA:C	1:A:116:THR:N	5	4.7	1.02
(1,110)	1:A:99:LEU:N	1:A:99:LEU:CA	1:A:99:LEU:C	1:A:100:ARG:N	2	4.8	1.0
(1,132)	1:A:111:GLU:N	1:A:111:GLU:CA	1:A:111:GLU:C	1:A:112:LEU:N	19	3.98	1.13
(1,88)	1:A:82:ARG:N	1:A:82:ARG:CA	1:A:82:ARG:C	1:A:83:LEU:N	8	2.76	1.16
(1,30)	1:A:24:ILE:N	1:A:24:ILE:CA	1:A:24:ILE:C	1:A:25:ILE:N	5	2.42	1.59
(1,120)	1:A:104:GLU:N	1:A:104:GLU:CA	1:A:104:GLU:C	1:A:105:GLY:N	3	4.2	0.86
(1,40)	1:A:29:ARG:N	1:A:29:ARG:CA	1:A:29:ARG:C	1:A:30:TYR:N	11	3.27	1.44
(1,124)	1:A:107:GLY:N	1:A:107:GLY:CA	1:A:107:GLY:C	1:A:108:THR:N	2	3.15	2.05
(1,136)	1:A:113:GLU:N	1:A:113:GLU:CA	1:A:113:GLU:C	1:A:114:HIS:N	4	3.13	1.05
(1,138)	1:A:114:HIS:N	1:A:114:HIS:CA	1:A:114:HIS:C	1:A:115:ALA:N	7	2.87	1.0
(1,24)	1:A:20:GLU:N	1:A:20:GLU:CA	1:A:20:GLU:C	1:A:21:ALA:N	2	3.45	1.15
(1,130)	1:A:110:LEU:N	1:A:110:LEU:CA	1:A:110:LEU:C	1:A:111:GLU:N	4	2.28	1.24
(1,92)	1:A:84:THR:N	1:A:84:THR:CA	1:A:84:THR:C	1:A:85:ILE:N	4	3.17	0.83

Continued on next page...

Continued from previous page...

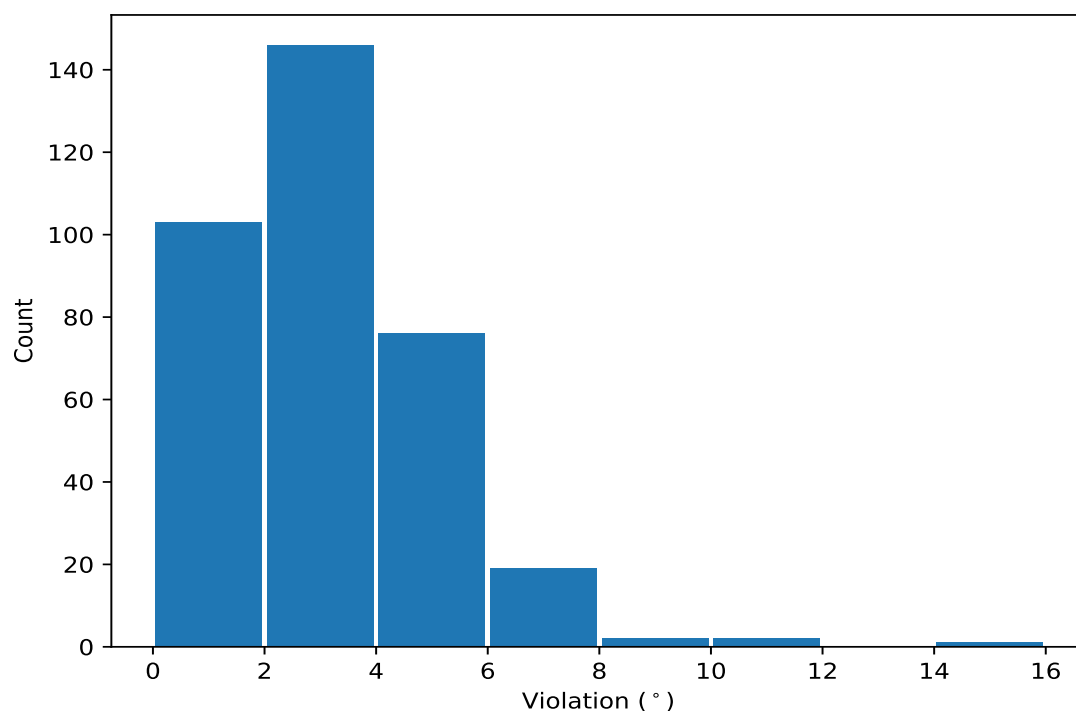
Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Models ¹	Mean (°)	SD ² (°)
(1,16)	1:A:14:ARG:N	1:A:14:ARG:CA	1:A:14:ARG:C	1:A:15:THR:N	7	3.03	1.06
(1,26)	1:A:21:ALA:N	1:A:21:ALA:CA	1:A:21:ALA:C	1:A:22:ARG:N	6	2.63	0.76
(1,108)	1:A:98:GLU:N	1:A:98:GLU:CA	1:A:98:GLU:C	1:A:99:LEU:N	5	2.38	1.2
(1,10)	1:A:11:LEU:N	1:A:11:LEU:CA	1:A:11:LEU:C	1:A:12:GLY:N	3	2.8	0.71
(1,164)	1:A:128:GLY:N	1:A:128:GLY:CA	1:A:128:GLY:C	1:A:129:TRP:N	5	2.6	0.64
(1,48)	1:A:36:GLU:N	1:A:36:GLU:CA	1:A:36:GLU:C	1:A:37:VAL:N	7	2.01	0.76
(1,174)	1:A:133:LEU:N	1:A:133:LEU:CA	1:A:133:LEU:C	1:A:134:ASP:N	3	2.33	0.85
(1,28)	1:A:22:ARG:N	1:A:22:ARG:CA	1:A:22:ARG:C	1:A:23:SER:N	4	2.4	0.75
(1,134)	1:A:112:LEU:N	1:A:112:LEU:CA	1:A:112:LEU:C	1:A:113:GLU:N	2	2.4	0.8
(1,188)	1:A:140:ILE:N	1:A:140:ILE:CA	1:A:140:ILE:C	1:A:141:ARG:N	3	1.87	0.95
(1,100)	1:A:88:VAL:N	1:A:88:VAL:CA	1:A:88:VAL:C	1:A:89:TYR:N	13	1.98	0.65
(1,70)	1:A:62:GLY:N	1:A:62:GLY:CA	1:A:62:GLY:C	1:A:63:ASN:N	4	2.05	0.45
(1,80)	1:A:75:LEU:N	1:A:75:LEU:CA	1:A:75:LEU:C	1:A:76:ARG:N	2	2.5	0.2
(1,90)	1:A:83:LEU:N	1:A:83:LEU:CA	1:A:83:LEU:C	1:A:84:THR:N	6	1.78	0.48
(1,98)	1:A:87:TRP:N	1:A:87:TRP:CA	1:A:87:TRP:C	1:A:88:VAL:N	2	2.45	0.05
(1,58)	1:A:45:ASN:N	1:A:45:ASN:CA	1:A:45:ASN:C	1:A:46:ARG:N	2	1.95	0.45
(1,216)	1:A:175:ALA:N	1:A:175:ALA:CA	1:A:175:ALA:C	1:A:176:ALA:N	2	1.8	0.5
(1,106)	1:A:97:VAL:N	1:A:97:VAL:CA	1:A:97:VAL:C	1:A:98:GLU:N	4	1.58	0.36
(1,84)	1:A:77:CYS:N	1:A:77:CYS:CA	1:A:77:CYS:C	1:A:78:GLU:N	2	1.65	0.15
(1,96)	1:A:86:SER:N	1:A:86:SER:CA	1:A:86:SER:C	1:A:87:TRP:N	2	1.75	0.05
(1,172)	1:A:132:ALA:N	1:A:132:ALA:CA	1:A:132:ALA:C	1:A:133:LEU:N	2	1.1	0.0
(1,9)	1:A:10:ALA:C	1:A:11:LEU:N	1:A:11:LEU:CA	1:A:11:LEU:C	18	5.69	2.47
(1,59)	1:A:45:ASN:C	1:A:46:ARG:N	1:A:46:ARG:CA	1:A:46:ARG:C	5	4.96	3.1
(1,95)	1:A:85:ILE:C	1:A:86:SER:N	1:A:86:SER:CA	1:A:86:SER:C	9	4.0	2.41
(1,203)	1:A:168:GLN:C	1:A:169:GLU:N	1:A:169:GLU:CA	1:A:169:GLU:C	9	4.37	1.42
(1,65)	1:A:51:PHE:C	1:A:52:ILE:N	1:A:52:ILE:CA	1:A:52:ILE:C	11	3.6	1.16
(1,73)	1:A:63:ASN:C	1:A:64:PHE:N	1:A:64:PHE:CA	1:A:64:PHE:C	3	4.03	1.07
(1,173)	1:A:132:ALA:C	1:A:133:LEU:N	1:A:133:LEU:CA	1:A:133:LEU:C	2	4.65	0.35
(1,75)	1:A:64:PHE:C	1:A:65:ALA:N	1:A:65:ALA:CA	1:A:65:ALA:C	9	2.94	1.48
(1,39)	1:A:28:GLN:C	1:A:29:ARG:N	1:A:29:ARG:CA	1:A:29:ARG:C	4	3.8	0.67
(1,201)	1:A:167:SER:C	1:A:168:GLN:N	1:A:168:GLN:CA	1:A:168:GLN:C	4	3.48	0.54
(1,77)	1:A:73:ASP:C	1:A:74:ILE:N	1:A:74:ILE:CA	1:A:74:ILE:C	4	3.2	0.96
(1,13)	1:A:12:GLY:C	1:A:13:ARG:N	1:A:13:ARG:CA	1:A:13:ARG:C	2	3.15	0.65
(1,29)	1:A:23:SER:C	1:A:24:ILE:N	1:A:24:ILE:CA	1:A:24:ILE:C	8	2.1	0.85
(1,37)	1:A:27:ARG:C	1:A:28:GLN:N	1:A:28:GLN:CA	1:A:28:GLN:C	4	1.82	0.68
(1,5)	1:A:8:GLU:C	1:A:9:ARG:N	1:A:9:ARG:CA	1:A:9:ARG:C	2	1.95	0.65
(1,33)	1:A:25:ILE:C	1:A:26:ILE:N	1:A:26:ILE:CA	1:A:26:ILE:C	2	1.65	0.55
(1,107)	1:A:97:VAL:C	1:A:98:GLU:N	1:A:98:GLU:CA	1:A:98:GLU:C	3	1.87	0.25
(1,165)	1:A:128:GLY:C	1:A:129:TRP:N	1:A:129:TRP:CA	1:A:129:TRP:C	2	1.5	0.2
(1,127)	1:A:108:THR:C	1:A:109:LEU:N	1:A:109:LEU:CA	1:A:109:LEU:C	2	1.25	0.05

¹ Number of violated models, ²Standard deviation

10.5 All violated dihedral-angle restraints

10.5.1 Histogram : Distribution of violations

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



10.5.2 Table: All violated dihedral-angle restraints

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

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,122)	1:A:105:GLY:N	1:A:105:GLY:CA	1:A:105:GLY:C	1:A:106:ASP:N	17	15.2
(1,9)	1:A:10:ALA:C	1:A:11:LEU:N	1:A:11:LEU:CA	1:A:11:LEU:C	15	11.1
(1,59)	1:A:45:ASN:C	1:A:46:ARG:N	1:A:46:ARG:CA	1:A:46:ARG:C	6	11.1
(1,4)	1:A:8:GLU:N	1:A:8:GLU:CA	1:A:8:GLU:C	1:A:9:ARG:N	1	9.7
(1,95)	1:A:85:ILE:C	1:A:86:SER:N	1:A:86:SER:CA	1:A:86:SER:C	6	8.2
(1,9)	1:A:10:ALA:C	1:A:11:LEU:N	1:A:11:LEU:CA	1:A:11:LEU:C	3	7.9
(1,9)	1:A:10:ALA:C	1:A:11:LEU:N	1:A:11:LEU:CA	1:A:11:LEU:C	9	7.8
(1,9)	1:A:10:ALA:C	1:A:11:LEU:N	1:A:11:LEU:CA	1:A:11:LEU:C	18	7.6
(1,9)	1:A:10:ALA:C	1:A:11:LEU:N	1:A:11:LEU:CA	1:A:11:LEU:C	2	7.5
(1,9)	1:A:10:ALA:C	1:A:11:LEU:N	1:A:11:LEU:CA	1:A:11:LEU:C	5	7.3
(1,203)	1:A:168:GLN:C	1:A:169:GLU:N	1:A:169:GLU:CA	1:A:169:GLU:C	19	7.3
(1,9)	1:A:10:ALA:C	1:A:11:LEU:N	1:A:11:LEU:CA	1:A:11:LEU:C	17	7.2
(1,36)	1:A:27:ARG:N	1:A:27:ARG:CA	1:A:27:ARG:C	1:A:28:GLN:N	1	7.2
(1,104)	1:A:96:GLU:N	1:A:96:GLU:CA	1:A:96:GLU:C	1:A:97:VAL:N	4	7.1
(1,34)	1:A:26:ILE:N	1:A:26:ILE:CA	1:A:26:ILE:C	1:A:27:ARG:N	18	7.0
(1,8)	1:A:10:ALA:N	1:A:10:ALA:CA	1:A:10:ALA:C	1:A:11:LEU:N	6	6.9
(1,8)	1:A:10:ALA:N	1:A:10:ALA:CA	1:A:10:ALA:C	1:A:11:LEU:N	14	6.7
(1,9)	1:A:10:ALA:C	1:A:11:LEU:N	1:A:11:LEU:CA	1:A:11:LEU:C	10	6.5
(1,9)	1:A:10:ALA:C	1:A:11:LEU:N	1:A:11:LEU:CA	1:A:11:LEU:C	13	6.5
(1,9)	1:A:10:ALA:C	1:A:11:LEU:N	1:A:11:LEU:CA	1:A:11:LEU:C	4	6.2
(1,38)	1:A:28:GLN:N	1:A:28:GLN:CA	1:A:28:GLN:C	1:A:29:ARG:N	5	6.2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,34)	1:A:26:ILE:N	1:A:26:ILE:CA	1:A:26:ILE:C	1:A:27:ARG:N	2	6.2
(1,140)	1:A:115:ALA:N	1:A:115:ALA:CA	1:A:115:ALA:C	1:A:116:THR:N	4	6.2
(1,95)	1:A:85:ILE:C	1:A:86:SER:N	1:A:86:SER:CA	1:A:86:SER:C	7	6.1
(1,8)	1:A:10:ALA:N	1:A:10:ALA:CA	1:A:10:ALA:C	1:A:11:LEU:N	7	5.9
(1,65)	1:A:51:PHE:C	1:A:52:ILE:N	1:A:52:ILE:CA	1:A:52:ILE:C	7	5.9
(1,122)	1:A:105:GLY:N	1:A:105:GLY:CA	1:A:105:GLY:C	1:A:106:ASP:N	7	5.8
(1,110)	1:A:99:LEU:N	1:A:99:LEU:CA	1:A:99:LEU:C	1:A:100:ARG:N	19	5.8
(1,95)	1:A:85:ILE:C	1:A:86:SER:N	1:A:86:SER:CA	1:A:86:SER:C	14	5.6
(1,140)	1:A:115:ALA:N	1:A:115:ALA:CA	1:A:115:ALA:C	1:A:116:THR:N	8	5.6
(1,132)	1:A:111:GLU:N	1:A:111:GLU:CA	1:A:111:GLU:C	1:A:112:LEU:N	17	5.6
(1,88)	1:A:82:ARG:N	1:A:82:ARG:CA	1:A:82:ARG:C	1:A:83:LEU:N	18	5.5
(1,4)	1:A:8:GLU:N	1:A:8:GLU:CA	1:A:8:GLU:C	1:A:9:ARG:N	8	5.5
(1,203)	1:A:168:GLN:C	1:A:169:GLU:N	1:A:169:GLU:CA	1:A:169:GLU:C	2	5.5
(1,132)	1:A:111:GLU:N	1:A:111:GLU:CA	1:A:111:GLU:C	1:A:112:LEU:N	12	5.5
(1,95)	1:A:85:ILE:C	1:A:86:SER:N	1:A:86:SER:CA	1:A:86:SER:C	11	5.4
(1,73)	1:A:63:ASN:C	1:A:64:PHE:N	1:A:64:PHE:CA	1:A:64:PHE:C	12	5.4
(1,30)	1:A:24:ILE:N	1:A:24:ILE:CA	1:A:24:ILE:C	1:A:25:ILE:N	3	5.4
(1,40)	1:A:29:ARG:N	1:A:29:ARG:CA	1:A:29:ARG:C	1:A:30:TYR:N	9	5.3
(1,120)	1:A:104:GLU:N	1:A:104:GLU:CA	1:A:104:GLU:C	1:A:105:GLY:N	4	5.3
(1,9)	1:A:10:ALA:C	1:A:11:LEU:N	1:A:11:LEU:CA	1:A:11:LEU:C	20	5.2
(1,124)	1:A:107:GLY:N	1:A:107:GLY:CA	1:A:107:GLY:C	1:A:108:THR:N	5	5.2
(1,9)	1:A:10:ALA:C	1:A:11:LEU:N	1:A:11:LEU:CA	1:A:11:LEU:C	19	5.1
(1,203)	1:A:168:GLN:C	1:A:169:GLU:N	1:A:169:GLU:CA	1:A:169:GLU:C	1	5.1
(1,40)	1:A:29:ARG:N	1:A:29:ARG:CA	1:A:29:ARG:C	1:A:30:TYR:N	12	5.0
(1,173)	1:A:132:ALA:C	1:A:133:LEU:N	1:A:133:LEU:CA	1:A:133:LEU:C	7	5.0
(1,75)	1:A:64:PHE:C	1:A:65:ALA:N	1:A:65:ALA:CA	1:A:65:ALA:C	10	4.9
(1,38)	1:A:28:GLN:N	1:A:28:GLN:CA	1:A:28:GLN:C	1:A:29:ARG:N	4	4.9
(1,132)	1:A:111:GLU:N	1:A:111:GLU:CA	1:A:111:GLU:C	1:A:112:LEU:N	19	4.9
(1,75)	1:A:64:PHE:C	1:A:65:ALA:N	1:A:65:ALA:CA	1:A:65:ALA:C	6	4.8
(1,65)	1:A:51:PHE:C	1:A:52:ILE:N	1:A:52:ILE:CA	1:A:52:ILE:C	18	4.8
(1,65)	1:A:51:PHE:C	1:A:52:ILE:N	1:A:52:ILE:CA	1:A:52:ILE:C	20	4.8
(1,136)	1:A:113:GLU:N	1:A:113:GLU:CA	1:A:113:GLU:C	1:A:114:HIS:N	3	4.8
(1,132)	1:A:111:GLU:N	1:A:111:GLU:CA	1:A:111:GLU:C	1:A:112:LEU:N	18	4.8
(1,104)	1:A:96:GLU:N	1:A:96:GLU:CA	1:A:96:GLU:C	1:A:97:VAL:N	19	4.8
(1,132)	1:A:111:GLU:N	1:A:111:GLU:CA	1:A:111:GLU:C	1:A:112:LEU:N	13	4.7
(1,132)	1:A:111:GLU:N	1:A:111:GLU:CA	1:A:111:GLU:C	1:A:112:LEU:N	14	4.7
(1,132)	1:A:111:GLU:N	1:A:111:GLU:CA	1:A:111:GLU:C	1:A:112:LEU:N	16	4.7
(1,75)	1:A:64:PHE:C	1:A:65:ALA:N	1:A:65:ALA:CA	1:A:65:ALA:C	14	4.6
(1,34)	1:A:26:ILE:N	1:A:26:ILE:CA	1:A:26:ILE:C	1:A:27:ARG:N	16	4.6
(1,24)	1:A:20:GLU:N	1:A:20:GLU:CA	1:A:20:GLU:C	1:A:21:ALA:N	10	4.6
(1,203)	1:A:168:GLN:C	1:A:169:GLU:N	1:A:169:GLU:CA	1:A:169:GLU:C	5	4.6
(1,138)	1:A:114:HIS:N	1:A:114:HIS:CA	1:A:114:HIS:C	1:A:115:ALA:N	8	4.6
(1,95)	1:A:85:ILE:C	1:A:86:SER:N	1:A:86:SER:CA	1:A:86:SER:C	20	4.5
(1,8)	1:A:10:ALA:N	1:A:10:ALA:CA	1:A:10:ALA:C	1:A:11:LEU:N	11	4.5
(1,8)	1:A:10:ALA:N	1:A:10:ALA:CA	1:A:10:ALA:C	1:A:11:LEU:N	16	4.5
(1,65)	1:A:51:PHE:C	1:A:52:ILE:N	1:A:52:ILE:CA	1:A:52:ILE:C	12	4.5
(1,40)	1:A:29:ARG:N	1:A:29:ARG:CA	1:A:29:ARG:C	1:A:30:TYR:N	3	4.5
(1,4)	1:A:8:GLU:N	1:A:8:GLU:CA	1:A:8:GLU:C	1:A:9:ARG:N	19	4.5
(1,39)	1:A:28:GLN:C	1:A:29:ARG:N	1:A:29:ARG:CA	1:A:29:ARG:C	8	4.5
(1,203)	1:A:168:GLN:C	1:A:169:GLU:N	1:A:169:GLU:CA	1:A:169:GLU:C	13	4.5
(1,132)	1:A:111:GLU:N	1:A:111:GLU:CA	1:A:111:GLU:C	1:A:112:LEU:N	20	4.5

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,104)	1:A:96:GLU:N	1:A:96:GLU:CA	1:A:96:GLU:C	1:A:97:VAL:N	5	4.5
(1,104)	1:A:96:GLU:N	1:A:96:GLU:CA	1:A:96:GLU:C	1:A:97:VAL:N	8	4.5
(1,39)	1:A:28:GLN:C	1:A:29:ARG:N	1:A:29:ARG:CA	1:A:29:ARG:C	1	4.4
(1,34)	1:A:26:ILE:N	1:A:26:ILE:CA	1:A:26:ILE:C	1:A:27:ARG:N	14	4.4
(1,132)	1:A:111:GLU:N	1:A:111:GLU:CA	1:A:111:GLU:C	1:A:112:LEU:N	8	4.4
(1,130)	1:A:110:LEU:N	1:A:110:LEU:CA	1:A:110:LEU:C	1:A:111:GLU:N	15	4.4
(1,92)	1:A:84:THR:N	1:A:84:THR:CA	1:A:84:THR:C	1:A:85:ILE:N	18	4.3
(1,34)	1:A:26:ILE:N	1:A:26:ILE:CA	1:A:26:ILE:C	1:A:27:ARG:N	4	4.3
(1,201)	1:A:167:SER:C	1:A:168:GLN:N	1:A:168:GLN:CA	1:A:168:GLN:C	6	4.3
(1,173)	1:A:132:ALA:C	1:A:133:LEU:N	1:A:133:LEU:CA	1:A:133:LEU:C	14	4.3
(1,77)	1:A:73:ASP:C	1:A:74:ILE:N	1:A:74:ILE:CA	1:A:74:ILE:C	1	4.2
(1,40)	1:A:29:ARG:N	1:A:29:ARG:CA	1:A:29:ARG:C	1:A:30:TYR:N	14	4.2
(1,4)	1:A:8:GLU:N	1:A:8:GLU:CA	1:A:8:GLU:C	1:A:9:ARG:N	4	4.2
(1,38)	1:A:28:GLN:N	1:A:28:GLN:CA	1:A:28:GLN:C	1:A:29:ARG:N	19	4.2
(1,36)	1:A:27:ARG:N	1:A:27:ARG:CA	1:A:27:ARG:C	1:A:28:GLN:N	19	4.2
(1,16)	1:A:14:ARG:N	1:A:14:ARG:CA	1:A:14:ARG:C	1:A:15:THR:N	18	4.2
(1,140)	1:A:115:ALA:N	1:A:115:ALA:CA	1:A:115:ALA:C	1:A:116:THR:N	19	4.2
(1,132)	1:A:111:GLU:N	1:A:111:GLU:CA	1:A:111:GLU:C	1:A:112:LEU:N	11	4.2
(1,9)	1:A:10:ALA:C	1:A:11:LEU:N	1:A:11:LEU:CA	1:A:11:LEU:C	11	4.1
(1,77)	1:A:73:ASP:C	1:A:74:ILE:N	1:A:74:ILE:CA	1:A:74:ILE:C	2	4.1
(1,59)	1:A:45:ASN:C	1:A:46:ARG:N	1:A:46:ARG:CA	1:A:46:ARG:C	14	4.1
(1,16)	1:A:14:ARG:N	1:A:14:ARG:CA	1:A:14:ARG:C	1:A:15:THR:N	7	4.1
(1,132)	1:A:111:GLU:N	1:A:111:GLU:CA	1:A:111:GLU:C	1:A:112:LEU:N	7	4.1
(1,132)	1:A:111:GLU:N	1:A:111:GLU:CA	1:A:111:GLU:C	1:A:112:LEU:N	9	4.1
(1,120)	1:A:104:GLU:N	1:A:104:GLU:CA	1:A:104:GLU:C	1:A:105:GLY:N	1	4.1
(1,140)	1:A:115:ALA:N	1:A:115:ALA:CA	1:A:115:ALA:C	1:A:116:THR:N	1	4.0
(1,138)	1:A:114:HIS:N	1:A:114:HIS:CA	1:A:114:HIS:C	1:A:115:ALA:N	4	4.0
(1,132)	1:A:111:GLU:N	1:A:111:GLU:CA	1:A:111:GLU:C	1:A:112:LEU:N	3	4.0
(1,73)	1:A:63:ASN:C	1:A:64:PHE:N	1:A:64:PHE:CA	1:A:64:PHE:C	7	3.9
(1,26)	1:A:21:ALA:N	1:A:21:ALA:CA	1:A:21:ALA:C	1:A:22:ARG:N	17	3.9
(1,40)	1:A:29:ARG:N	1:A:29:ARG:CA	1:A:29:ARG:C	1:A:30:TYR:N	19	3.8
(1,13)	1:A:12:GLY:C	1:A:13:ARG:N	1:A:13:ARG:CA	1:A:13:ARG:C	8	3.8
(1,110)	1:A:99:LEU:N	1:A:99:LEU:CA	1:A:99:LEU:C	1:A:100:ARG:N	3	3.8
(1,108)	1:A:98:GLU:N	1:A:98:GLU:CA	1:A:98:GLU:C	1:A:99:LEU:N	2	3.8
(1,108)	1:A:98:GLU:N	1:A:98:GLU:CA	1:A:98:GLU:C	1:A:99:LEU:N	16	3.8
(1,10)	1:A:11:LEU:N	1:A:11:LEU:CA	1:A:11:LEU:C	1:A:12:GLY:N	7	3.8
(1,40)	1:A:29:ARG:N	1:A:29:ARG:CA	1:A:29:ARG:C	1:A:30:TYR:N	17	3.7
(1,34)	1:A:26:ILE:N	1:A:26:ILE:CA	1:A:26:ILE:C	1:A:27:ARG:N	5	3.7
(1,34)	1:A:26:ILE:N	1:A:26:ILE:CA	1:A:26:ILE:C	1:A:27:ARG:N	6	3.7
(1,34)	1:A:26:ILE:N	1:A:26:ILE:CA	1:A:26:ILE:C	1:A:27:ARG:N	17	3.7
(1,203)	1:A:168:GLN:C	1:A:169:GLU:N	1:A:169:GLU:CA	1:A:169:GLU:C	3	3.7
(1,164)	1:A:128:GLY:N	1:A:128:GLY:CA	1:A:128:GLY:C	1:A:129:TRP:N	6	3.7
(1,16)	1:A:14:ARG:N	1:A:14:ARG:CA	1:A:14:ARG:C	1:A:15:THR:N	15	3.7
(1,132)	1:A:111:GLU:N	1:A:111:GLU:CA	1:A:111:GLU:C	1:A:112:LEU:N	1	3.7
(1,92)	1:A:84:THR:N	1:A:84:THR:CA	1:A:84:THR:C	1:A:85:ILE:N	14	3.6
(1,75)	1:A:64:PHE:C	1:A:65:ALA:N	1:A:65:ALA:CA	1:A:65:ALA:C	12	3.6
(1,48)	1:A:36:GLU:N	1:A:36:GLU:CA	1:A:36:GLU:C	1:A:37:VAL:N	6	3.6
(1,36)	1:A:27:ARG:N	1:A:27:ARG:CA	1:A:27:ARG:C	1:A:28:GLN:N	17	3.6
(1,65)	1:A:51:PHE:C	1:A:52:ILE:N	1:A:52:ILE:CA	1:A:52:ILE:C	6	3.5
(1,59)	1:A:45:ASN:C	1:A:46:ARG:N	1:A:46:ARG:CA	1:A:46:ARG:C	10	3.5
(1,40)	1:A:29:ARG:N	1:A:29:ARG:CA	1:A:29:ARG:C	1:A:30:TYR:N	6	3.5

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,29)	1:A:23:SER:C	1:A:24:ILE:N	1:A:24:ILE:CA	1:A:24:ILE:C	6	3.5
(1,28)	1:A:22:ARG:N	1:A:22:ARG:CA	1:A:22:ARG:C	1:A:23:SER:N	4	3.5
(1,174)	1:A:133:LEU:N	1:A:133:LEU:CA	1:A:133:LEU:C	1:A:134:ASP:N	1	3.5
(1,140)	1:A:115:ALA:N	1:A:115:ALA:CA	1:A:115:ALA:C	1:A:116:THR:N	17	3.5
(1,9)	1:A:10:ALA:C	1:A:11:LEU:N	1:A:11:LEU:CA	1:A:11:LEU:C	16	3.4
(1,39)	1:A:28:GLN:C	1:A:29:ARG:N	1:A:29:ARG:CA	1:A:29:ARG:C	2	3.4
(1,34)	1:A:26:ILE:N	1:A:26:ILE:CA	1:A:26:ILE:C	1:A:27:ARG:N	7	3.4
(1,34)	1:A:26:ILE:N	1:A:26:ILE:CA	1:A:26:ILE:C	1:A:27:ARG:N	12	3.4
(1,203)	1:A:168:GLN:C	1:A:169:GLU:N	1:A:169:GLU:CA	1:A:169:GLU:C	8	3.4
(1,201)	1:A:167:SER:C	1:A:168:GLN:N	1:A:168:GLN:CA	1:A:168:GLN:C	7	3.4
(1,201)	1:A:167:SER:C	1:A:168:GLN:N	1:A:168:GLN:CA	1:A:168:GLN:C	16	3.4
(1,16)	1:A:14:ARG:N	1:A:14:ARG:CA	1:A:14:ARG:C	1:A:15:THR:N	3	3.4
(1,104)	1:A:96:GLU:N	1:A:96:GLU:CA	1:A:96:GLU:C	1:A:97:VAL:N	1	3.4
(1,9)	1:A:10:ALA:C	1:A:11:LEU:N	1:A:11:LEU:CA	1:A:11:LEU:C	7	3.3
(1,88)	1:A:82:ARG:N	1:A:82:ARG:CA	1:A:82:ARG:C	1:A:83:LEU:N	12	3.3
(1,65)	1:A:51:PHE:C	1:A:52:ILE:N	1:A:52:ILE:CA	1:A:52:ILE:C	14	3.3
(1,59)	1:A:45:ASN:C	1:A:46:ARG:N	1:A:46:ARG:CA	1:A:46:ARG:C	18	3.3
(1,36)	1:A:27:ARG:N	1:A:27:ARG:CA	1:A:27:ARG:C	1:A:28:GLN:N	5	3.3
(1,29)	1:A:23:SER:C	1:A:24:ILE:N	1:A:24:ILE:CA	1:A:24:ILE:C	11	3.3
(1,34)	1:A:26:ILE:N	1:A:26:ILE:CA	1:A:26:ILE:C	1:A:27:ARG:N	1	3.2
(1,210)	1:A:172:GLU:N	1:A:172:GLU:CA	1:A:172:GLU:C	1:A:173:ALA:N	13	3.2
(1,188)	1:A:140:ILE:N	1:A:140:ILE:CA	1:A:140:ILE:C	1:A:141:ARG:N	1	3.2
(1,134)	1:A:112:LEU:N	1:A:112:LEU:CA	1:A:112:LEU:C	1:A:113:GLU:N	12	3.2
(1,132)	1:A:111:GLU:N	1:A:111:GLU:CA	1:A:111:GLU:C	1:A:112:LEU:N	4	3.2
(1,120)	1:A:104:GLU:N	1:A:104:GLU:CA	1:A:104:GLU:C	1:A:105:GLY:N	2	3.2
(1,100)	1:A:88:VAL:N	1:A:88:VAL:CA	1:A:88:VAL:C	1:A:89:TYR:N	2	3.2
(1,38)	1:A:28:GLN:N	1:A:28:GLN:CA	1:A:28:GLN:C	1:A:29:ARG:N	2	3.1
(1,34)	1:A:26:ILE:N	1:A:26:ILE:CA	1:A:26:ILE:C	1:A:27:ARG:N	20	3.1
(1,214)	1:A:174:TRP:N	1:A:174:TRP:CA	1:A:174:TRP:C	1:A:175:ALA:N	6	3.1
(1,82)	1:A:76:ARG:N	1:A:76:ARG:CA	1:A:76:ARG:C	1:A:77:CYS:N	2	3.0
(1,37)	1:A:27:ARG:C	1:A:28:GLN:N	1:A:28:GLN:CA	1:A:28:GLN:C	19	3.0
(1,26)	1:A:21:ALA:N	1:A:21:ALA:CA	1:A:21:ALA:C	1:A:22:ARG:N	6	3.0
(1,138)	1:A:114:HIS:N	1:A:114:HIS:CA	1:A:114:HIS:C	1:A:115:ALA:N	2	3.0
(1,65)	1:A:51:PHE:C	1:A:52:ILE:N	1:A:52:ILE:CA	1:A:52:ILE:C	16	2.9
(1,39)	1:A:28:GLN:C	1:A:29:ARG:N	1:A:29:ARG:CA	1:A:29:ARG:C	17	2.9
(1,164)	1:A:128:GLY:N	1:A:128:GLY:CA	1:A:128:GLY:C	1:A:129:TRP:N	12	2.9
(1,136)	1:A:113:GLU:N	1:A:113:GLU:CA	1:A:113:GLU:C	1:A:114:HIS:N	2	2.9
(1,136)	1:A:113:GLU:N	1:A:113:GLU:CA	1:A:113:GLU:C	1:A:114:HIS:N	19	2.9
(1,100)	1:A:88:VAL:N	1:A:88:VAL:CA	1:A:88:VAL:C	1:A:89:TYR:N	20	2.9
(1,88)	1:A:82:ARG:N	1:A:82:ARG:CA	1:A:82:ARG:C	1:A:83:LEU:N	7	2.8
(1,73)	1:A:63:ASN:C	1:A:64:PHE:N	1:A:64:PHE:CA	1:A:64:PHE:C	6	2.8
(1,70)	1:A:62:GLY:N	1:A:62:GLY:CA	1:A:62:GLY:C	1:A:63:ASN:N	3	2.8
(1,65)	1:A:51:PHE:C	1:A:52:ILE:N	1:A:52:ILE:CA	1:A:52:ILE:C	15	2.8
(1,59)	1:A:45:ASN:C	1:A:46:ARG:N	1:A:46:ARG:CA	1:A:46:ARG:C	7	2.8
(1,4)	1:A:8:GLU:N	1:A:8:GLU:CA	1:A:8:GLU:C	1:A:9:ARG:N	17	2.8
(1,36)	1:A:27:ARG:N	1:A:27:ARG:CA	1:A:27:ARG:C	1:A:28:GLN:N	4	2.8
(1,26)	1:A:21:ALA:N	1:A:21:ALA:CA	1:A:21:ALA:C	1:A:22:ARG:N	1	2.8
(1,201)	1:A:167:SER:C	1:A:168:GLN:N	1:A:168:GLN:CA	1:A:168:GLN:C	12	2.8
(1,16)	1:A:14:ARG:N	1:A:14:ARG:CA	1:A:14:ARG:C	1:A:15:THR:N	14	2.8
(1,132)	1:A:111:GLU:N	1:A:111:GLU:CA	1:A:111:GLU:C	1:A:112:LEU:N	10	2.8
(1,100)	1:A:88:VAL:N	1:A:88:VAL:CA	1:A:88:VAL:C	1:A:89:TYR:N	12	2.8

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,80)	1:A:75:LEU:N	1:A:75:LEU:CA	1:A:75:LEU:C	1:A:76:ARG:N	10	2.7
(1,75)	1:A:64:PHE:C	1:A:65:ALA:N	1:A:65:ALA:CA	1:A:65:ALA:C	16	2.7
(1,30)	1:A:24:ILE:N	1:A:24:ILE:CA	1:A:24:ILE:C	1:A:25:ILE:N	4	2.7
(1,203)	1:A:168:GLN:C	1:A:169:GLU:N	1:A:169:GLU:CA	1:A:169:GLU:C	17	2.7
(1,92)	1:A:84:THR:N	1:A:84:THR:CA	1:A:84:THR:C	1:A:85:ILE:N	7	2.6
(1,90)	1:A:83:LEU:N	1:A:83:LEU:CA	1:A:83:LEU:C	1:A:84:THR:N	2	2.6
(1,9)	1:A:10:ALA:C	1:A:11:LEU:N	1:A:11:LEU:CA	1:A:11:LEU:C	12	2.6
(1,5)	1:A:8:GLU:C	1:A:9:ARG:N	1:A:9:ARG:CA	1:A:9:ARG:C	19	2.6
(1,4)	1:A:8:GLU:N	1:A:8:GLU:CA	1:A:8:GLU:C	1:A:9:ARG:N	5	2.6
(1,34)	1:A:26:ILE:N	1:A:26:ILE:CA	1:A:26:ILE:C	1:A:27:ARG:N	15	2.6
(1,29)	1:A:23:SER:C	1:A:24:ILE:N	1:A:24:ILE:CA	1:A:24:ILE:C	18	2.6
(1,26)	1:A:21:ALA:N	1:A:21:ALA:CA	1:A:21:ALA:C	1:A:22:ARG:N	4	2.6
(1,122)	1:A:105:GLY:N	1:A:105:GLY:CA	1:A:105:GLY:C	1:A:106:ASP:N	9	2.6
(1,98)	1:A:87:TRP:N	1:A:87:TRP:CA	1:A:87:TRP:C	1:A:88:VAL:N	12	2.5
(1,95)	1:A:85:ILE:C	1:A:86:SER:N	1:A:86:SER:CA	1:A:86:SER:C	8	2.5
(1,65)	1:A:51:PHE:C	1:A:52:ILE:N	1:A:52:ILE:CA	1:A:52:ILE:C	9	2.5
(1,28)	1:A:22:ARG:N	1:A:22:ARG:CA	1:A:22:ARG:C	1:A:23:SER:N	20	2.5
(1,208)	1:A:171:GLY:N	1:A:171:GLY:CA	1:A:171:GLY:C	1:A:172:GLU:N	1	2.5
(1,203)	1:A:168:GLN:C	1:A:169:GLU:N	1:A:169:GLU:CA	1:A:169:GLU:C	4	2.5
(1,2)	1:A:7:THR:N	1:A:7:THR:CA	1:A:7:THR:C	1:A:8:GLU:N	18	2.5
(1,190)	1:A:162:GLU:N	1:A:162:GLU:CA	1:A:162:GLU:C	1:A:163:MET:N	5	2.5
(1,138)	1:A:114:HIS:N	1:A:114:HIS:CA	1:A:114:HIS:C	1:A:115:ALA:N	14	2.5
(1,132)	1:A:111:GLU:N	1:A:111:GLU:CA	1:A:111:GLU:C	1:A:112:LEU:N	5	2.5
(1,13)	1:A:12:GLY:C	1:A:13:ARG:N	1:A:13:ARG:CA	1:A:13:ARG:C	6	2.5
(1,109)	1:A:98:GLU:C	1:A:99:LEU:N	1:A:99:LEU:CA	1:A:99:LEU:C	17	2.5
(1,104)	1:A:96:GLU:N	1:A:96:GLU:CA	1:A:96:GLU:C	1:A:97:VAL:N	20	2.5
(1,98)	1:A:87:TRP:N	1:A:87:TRP:CA	1:A:87:TRP:C	1:A:88:VAL:N	15	2.4
(1,88)	1:A:82:ARG:N	1:A:82:ARG:CA	1:A:82:ARG:C	1:A:83:LEU:N	19	2.4
(1,77)	1:A:73:ASP:C	1:A:74:ILE:N	1:A:74:ILE:CA	1:A:74:ILE:C	19	2.4
(1,58)	1:A:45:ASN:N	1:A:45:ASN:CA	1:A:45:ASN:C	1:A:46:ARG:N	12	2.4
(1,34)	1:A:26:ILE:N	1:A:26:ILE:CA	1:A:26:ILE:C	1:A:27:ARG:N	10	2.4
(1,164)	1:A:128:GLY:N	1:A:128:GLY:CA	1:A:128:GLY:C	1:A:129:TRP:N	16	2.4
(1,14)	1:A:13:ARG:N	1:A:13:ARG:CA	1:A:13:ARG:C	1:A:14:ARG:N	15	2.4
(1,138)	1:A:114:HIS:N	1:A:114:HIS:CA	1:A:114:HIS:C	1:A:115:ALA:N	20	2.4
(1,100)	1:A:88:VAL:N	1:A:88:VAL:CA	1:A:88:VAL:C	1:A:89:TYR:N	1	2.4
(1,10)	1:A:11:LEU:N	1:A:11:LEU:CA	1:A:11:LEU:C	1:A:12:GLY:N	16	2.4
(1,90)	1:A:83:LEU:N	1:A:83:LEU:CA	1:A:83:LEU:C	1:A:84:THR:N	7	2.3
(1,88)	1:A:82:ARG:N	1:A:82:ARG:CA	1:A:82:ARG:C	1:A:83:LEU:N	10	2.3
(1,88)	1:A:82:ARG:N	1:A:82:ARG:CA	1:A:82:ARG:C	1:A:83:LEU:N	14	2.3
(1,80)	1:A:75:LEU:N	1:A:75:LEU:CA	1:A:75:LEU:C	1:A:76:ARG:N	14	2.3
(1,65)	1:A:51:PHE:C	1:A:52:ILE:N	1:A:52:ILE:CA	1:A:52:ILE:C	3	2.3
(1,65)	1:A:51:PHE:C	1:A:52:ILE:N	1:A:52:ILE:CA	1:A:52:ILE:C	5	2.3
(1,48)	1:A:36:GLU:N	1:A:36:GLU:CA	1:A:36:GLU:C	1:A:37:VAL:N	20	2.3
(1,34)	1:A:26:ILE:N	1:A:26:ILE:CA	1:A:26:ILE:C	1:A:27:ARG:N	9	2.3
(1,34)	1:A:26:ILE:N	1:A:26:ILE:CA	1:A:26:ILE:C	1:A:27:ARG:N	19	2.3
(1,24)	1:A:20:GLU:N	1:A:20:GLU:CA	1:A:20:GLU:C	1:A:21:ALA:N	1	2.3
(1,216)	1:A:175:ALA:N	1:A:175:ALA:CA	1:A:175:ALA:C	1:A:176:ALA:N	1	2.3
(1,126)	1:A:108:THR:N	1:A:108:THR:CA	1:A:108:THR:C	1:A:109:LEU:N	5	2.3
(1,1)	1:A:6:ALA:C	1:A:7:THR:N	1:A:7:THR:CA	1:A:7:THR:C	11	2.3
(1,92)	1:A:84:THR:N	1:A:84:THR:CA	1:A:84:THR:C	1:A:85:ILE:N	12	2.2
(1,88)	1:A:82:ARG:N	1:A:82:ARG:CA	1:A:82:ARG:C	1:A:83:LEU:N	20	2.2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,8)	1:A:10:ALA:N	1:A:10:ALA:CA	1:A:10:ALA:C	1:A:11:LEU:N	10	2.2
(1,48)	1:A:36:GLU:N	1:A:36:GLU:CA	1:A:36:GLU:C	1:A:37:VAL:N	16	2.2
(1,33)	1:A:25:ILE:C	1:A:26:ILE:N	1:A:26:ILE:CA	1:A:26:ILE:C	20	2.2
(1,28)	1:A:22:ARG:N	1:A:22:ARG:CA	1:A:22:ARG:C	1:A:23:SER:N	6	2.2
(1,132)	1:A:111:GLU:N	1:A:111:GLU:CA	1:A:111:GLU:C	1:A:112:LEU:N	6	2.2
(1,122)	1:A:105:GLY:N	1:A:105:GLY:CA	1:A:105:GLY:C	1:A:106:ASP:N	20	2.2
(1,107)	1:A:97:VAL:C	1:A:98:GLU:N	1:A:98:GLU:CA	1:A:98:GLU:C	20	2.2
(1,100)	1:A:88:VAL:N	1:A:88:VAL:CA	1:A:88:VAL:C	1:A:89:TYR:N	3	2.2
(1,10)	1:A:11:LEU:N	1:A:11:LEU:CA	1:A:11:LEU:C	1:A:12:GLY:N	20	2.2
(1,8)	1:A:10:ALA:N	1:A:10:ALA:CA	1:A:10:ALA:C	1:A:11:LEU:N	18	2.1
(1,77)	1:A:73:ASP:C	1:A:74:ILE:N	1:A:74:ILE:CA	1:A:74:ILE:C	4	2.1
(1,75)	1:A:64:PHE:C	1:A:65:ALA:N	1:A:65:ALA:CA	1:A:65:ALA:C	11	2.1
(1,176)	1:A:134:ASP:N	1:A:134:ASP:CA	1:A:134:ASP:C	1:A:135:PHE:N	4	2.1
(1,164)	1:A:128:GLY:N	1:A:128:GLY:CA	1:A:128:GLY:C	1:A:129:TRP:N	15	2.1
(1,106)	1:A:97:VAL:N	1:A:97:VAL:CA	1:A:97:VAL:C	1:A:98:GLU:N	1	2.1
(1,100)	1:A:88:VAL:N	1:A:88:VAL:CA	1:A:88:VAL:C	1:A:89:TYR:N	19	2.1
(1,34)	1:A:26:ILE:N	1:A:26:ILE:CA	1:A:26:ILE:C	1:A:27:ARG:N	8	2.0
(1,26)	1:A:21:ALA:N	1:A:21:ALA:CA	1:A:21:ALA:C	1:A:22:ARG:N	15	2.0
(1,174)	1:A:133:LEU:N	1:A:133:LEU:CA	1:A:133:LEU:C	1:A:134:ASP:N	3	2.0
(1,133)	1:A:111:GLU:C	1:A:112:LEU:N	1:A:112:LEU:CA	1:A:112:LEU:C	2	2.0
(1,108)	1:A:98:GLU:N	1:A:98:GLU:CA	1:A:98:GLU:C	1:A:99:LEU:N	18	2.0
(1,8)	1:A:10:ALA:N	1:A:10:ALA:CA	1:A:10:ALA:C	1:A:11:LEU:N	12	1.9
(1,78)	1:A:74:ILE:N	1:A:74:ILE:CA	1:A:74:ILE:C	1:A:75:LEU:N	7	1.9
(1,70)	1:A:62:GLY:N	1:A:62:GLY:CA	1:A:62:GLY:C	1:A:63:ASN:N	5	1.9
(1,70)	1:A:62:GLY:N	1:A:62:GLY:CA	1:A:62:GLY:C	1:A:63:ASN:N	13	1.9
(1,48)	1:A:36:GLU:N	1:A:36:GLU:CA	1:A:36:GLU:C	1:A:37:VAL:N	7	1.9
(1,40)	1:A:29:ARG:N	1:A:29:ARG:CA	1:A:29:ARG:C	1:A:30:TYR:N	8	1.9
(1,38)	1:A:28:GLN:N	1:A:28:GLN:CA	1:A:28:GLN:C	1:A:29:ARG:N	17	1.9
(1,29)	1:A:23:SER:C	1:A:24:ILE:N	1:A:24:ILE:CA	1:A:24:ILE:C	2	1.9
(1,164)	1:A:128:GLY:N	1:A:128:GLY:CA	1:A:128:GLY:C	1:A:129:TRP:N	14	1.9
(1,138)	1:A:114:HIS:N	1:A:114:HIS:CA	1:A:114:HIS:C	1:A:115:ALA:N	3	1.9
(1,136)	1:A:113:GLU:N	1:A:113:GLU:CA	1:A:113:GLU:C	1:A:114:HIS:N	4	1.9
(1,113)	1:A:100:ARG:C	1:A:101:LEU:N	1:A:101:LEU:CA	1:A:101:LEU:C	14	1.9
(1,96)	1:A:86:SER:N	1:A:86:SER:CA	1:A:86:SER:C	1:A:87:TRP:N	17	1.8
(1,9)	1:A:10:ALA:C	1:A:11:LEU:N	1:A:11:LEU:CA	1:A:11:LEU:C	14	1.8
(1,84)	1:A:77:CYS:N	1:A:77:CYS:CA	1:A:77:CYS:C	1:A:78:GLU:N	2	1.8
(1,32)	1:A:25:ILE:N	1:A:25:ILE:CA	1:A:25:ILE:C	1:A:26:ILE:N	6	1.8
(1,202)	1:A:168:GLN:N	1:A:168:GLN:CA	1:A:168:GLN:C	1:A:169:GLU:N	1	1.8
(1,17)	1:A:14:ARG:C	1:A:15:THR:N	1:A:15:THR:CA	1:A:15:THR:C	6	1.8
(1,129)	1:A:109:LEU:C	1:A:110:LEU:N	1:A:110:LEU:CA	1:A:110:LEU:C	19	1.8
(1,128)	1:A:109:LEU:N	1:A:109:LEU:CA	1:A:109:LEU:C	1:A:110:LEU:N	10	1.8
(1,107)	1:A:97:VAL:C	1:A:98:GLU:N	1:A:98:GLU:CA	1:A:98:GLU:C	5	1.8
(1,100)	1:A:88:VAL:N	1:A:88:VAL:CA	1:A:88:VAL:C	1:A:89:TYR:N	6	1.8
(1,96)	1:A:86:SER:N	1:A:86:SER:CA	1:A:86:SER:C	1:A:87:TRP:N	5	1.7
(1,60)	1:A:46:ARG:N	1:A:46:ARG:CA	1:A:46:ARG:C	1:A:47:ILE:N	4	1.7
(1,48)	1:A:36:GLU:N	1:A:36:GLU:CA	1:A:36:GLU:C	1:A:37:VAL:N	12	1.7
(1,165)	1:A:128:GLY:C	1:A:129:TRP:N	1:A:129:TRP:CA	1:A:129:TRP:C	19	1.7
(1,138)	1:A:114:HIS:N	1:A:114:HIS:CA	1:A:114:HIS:C	1:A:115:ALA:N	19	1.7
(1,130)	1:A:110:LEU:N	1:A:110:LEU:CA	1:A:110:LEU:C	1:A:111:GLU:N	12	1.7
(1,130)	1:A:110:LEU:N	1:A:110:LEU:CA	1:A:110:LEU:C	1:A:111:GLU:N	14	1.7
(1,70)	1:A:62:GLY:N	1:A:62:GLY:CA	1:A:62:GLY:C	1:A:63:ASN:N	17	1.6

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,40)	1:A:29:ARG:N	1:A:29:ARG:CA	1:A:29:ARG:C	1:A:30:TYR:N	4	1.6
(1,30)	1:A:24:ILE:N	1:A:24:ILE:CA	1:A:24:ILE:C	1:A:25:ILE:N	2	1.6
(1,135)	1:A:112:LEU:C	1:A:113:GLU:N	1:A:113:GLU:CA	1:A:113:GLU:C	16	1.6
(1,134)	1:A:112:LEU:N	1:A:112:LEU:CA	1:A:112:LEU:C	1:A:113:GLU:N	7	1.6
(1,12)	1:A:12:GLY:N	1:A:12:GLY:CA	1:A:12:GLY:C	1:A:13:ARG:N	2	1.6
(1,107)	1:A:97:VAL:C	1:A:98:GLU:N	1:A:98:GLU:CA	1:A:98:GLU:C	3	1.6
(1,106)	1:A:97:VAL:N	1:A:97:VAL:CA	1:A:97:VAL:C	1:A:98:GLU:N	18	1.6
(1,104)	1:A:96:GLU:N	1:A:96:GLU:CA	1:A:96:GLU:C	1:A:97:VAL:N	17	1.6
(1,100)	1:A:88:VAL:N	1:A:88:VAL:CA	1:A:88:VAL:C	1:A:89:TYR:N	4	1.6
(1,100)	1:A:88:VAL:N	1:A:88:VAL:CA	1:A:88:VAL:C	1:A:89:TYR:N	8	1.6
(1,100)	1:A:88:VAL:N	1:A:88:VAL:CA	1:A:88:VAL:C	1:A:89:TYR:N	17	1.6
(1,90)	1:A:83:LEU:N	1:A:83:LEU:CA	1:A:83:LEU:C	1:A:84:THR:N	5	1.5
(1,90)	1:A:83:LEU:N	1:A:83:LEU:CA	1:A:83:LEU:C	1:A:84:THR:N	6	1.5
(1,84)	1:A:77:CYS:N	1:A:77:CYS:CA	1:A:77:CYS:C	1:A:78:GLU:N	17	1.5
(1,75)	1:A:64:PHE:C	1:A:65:ALA:N	1:A:65:ALA:CA	1:A:65:ALA:C	18	1.5
(1,58)	1:A:45:ASN:N	1:A:45:ASN:CA	1:A:45:ASN:C	1:A:46:ARG:N	15	1.5
(1,37)	1:A:27:ARG:C	1:A:28:GLN:N	1:A:28:GLN:CA	1:A:28:GLN:C	2	1.5
(1,37)	1:A:27:ARG:C	1:A:28:GLN:N	1:A:28:GLN:CA	1:A:28:GLN:C	8	1.5
(1,36)	1:A:27:ARG:N	1:A:27:ARG:CA	1:A:27:ARG:C	1:A:28:GLN:N	2	1.5
(1,29)	1:A:23:SER:C	1:A:24:ILE:N	1:A:24:ILE:CA	1:A:24:ILE:C	4	1.5
(1,26)	1:A:21:ALA:N	1:A:21:ALA:CA	1:A:21:ALA:C	1:A:22:ARG:N	18	1.5
(1,174)	1:A:133:LEU:N	1:A:133:LEU:CA	1:A:133:LEU:C	1:A:134:ASP:N	13	1.5
(1,16)	1:A:14:ARG:N	1:A:14:ARG:CA	1:A:14:ARG:C	1:A:15:THR:N	10	1.5
(1,16)	1:A:14:ARG:N	1:A:14:ARG:CA	1:A:14:ARG:C	1:A:15:THR:N	16	1.5
(1,106)	1:A:97:VAL:N	1:A:97:VAL:CA	1:A:97:VAL:C	1:A:98:GLU:N	10	1.5
(1,95)	1:A:85:ILE:C	1:A:86:SER:N	1:A:86:SER:CA	1:A:86:SER:C	9	1.4
(1,90)	1:A:83:LEU:N	1:A:83:LEU:CA	1:A:83:LEU:C	1:A:84:THR:N	13	1.4
(1,90)	1:A:83:LEU:N	1:A:83:LEU:CA	1:A:83:LEU:C	1:A:84:THR:N	19	1.4
(1,40)	1:A:29:ARG:N	1:A:29:ARG:CA	1:A:29:ARG:C	1:A:30:TYR:N	18	1.4
(1,29)	1:A:23:SER:C	1:A:24:ILE:N	1:A:24:ILE:CA	1:A:24:ILE:C	5	1.4
(1,29)	1:A:23:SER:C	1:A:24:ILE:N	1:A:24:ILE:CA	1:A:24:ILE:C	19	1.4
(1,28)	1:A:22:ARG:N	1:A:22:ARG:CA	1:A:22:ARG:C	1:A:23:SER:N	12	1.4
(1,122)	1:A:105:GLY:N	1:A:105:GLY:CA	1:A:105:GLY:C	1:A:106:ASP:N	18	1.4
(1,9)	1:A:10:ALA:C	1:A:11:LEU:N	1:A:11:LEU:CA	1:A:11:LEU:C	1	1.3
(1,88)	1:A:82:ARG:N	1:A:82:ARG:CA	1:A:82:ARG:C	1:A:83:LEU:N	15	1.3
(1,5)	1:A:8:GLU:C	1:A:9:ARG:N	1:A:9:ARG:CA	1:A:9:ARG:C	17	1.3
(1,37)	1:A:27:ARG:C	1:A:28:GLN:N	1:A:28:GLN:CA	1:A:28:GLN:C	17	1.3
(1,34)	1:A:26:ILE:N	1:A:26:ILE:CA	1:A:26:ILE:C	1:A:27:ARG:N	13	1.3
(1,216)	1:A:175:ALA:N	1:A:175:ALA:CA	1:A:175:ALA:C	1:A:176:ALA:N	5	1.3
(1,188)	1:A:140:ILE:N	1:A:140:ILE:CA	1:A:140:ILE:C	1:A:141:ARG:N	10	1.3
(1,165)	1:A:128:GLY:C	1:A:129:TRP:N	1:A:129:TRP:CA	1:A:129:TRP:C	4	1.3
(1,130)	1:A:110:LEU:N	1:A:110:LEU:CA	1:A:110:LEU:C	1:A:111:GLU:N	20	1.3
(1,127)	1:A:108:THR:C	1:A:109:LEU:N	1:A:109:LEU:CA	1:A:109:LEU:C	2	1.3
(1,105)	1:A:96:GLU:C	1:A:97:VAL:N	1:A:97:VAL:CA	1:A:97:VAL:C	7	1.3
(1,104)	1:A:96:GLU:N	1:A:96:GLU:CA	1:A:96:GLU:C	1:A:97:VAL:N	15	1.3
(1,100)	1:A:88:VAL:N	1:A:88:VAL:CA	1:A:88:VAL:C	1:A:89:TYR:N	7	1.3
(1,95)	1:A:85:ILE:C	1:A:86:SER:N	1:A:86:SER:CA	1:A:86:SER:C	3	1.2
(1,75)	1:A:64:PHE:C	1:A:65:ALA:N	1:A:65:ALA:CA	1:A:65:ALA:C	9	1.2
(1,48)	1:A:36:GLU:N	1:A:36:GLU:CA	1:A:36:GLU:C	1:A:37:VAL:N	11	1.2
(1,48)	1:A:36:GLU:N	1:A:36:GLU:CA	1:A:36:GLU:C	1:A:37:VAL:N	15	1.2
(1,4)	1:A:8:GLU:N	1:A:8:GLU:CA	1:A:8:GLU:C	1:A:9:ARG:N	3	1.2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,30)	1:A:24:ILE:N	1:A:24:ILE:CA	1:A:24:ILE:C	1:A:25:ILE:N	5	1.2
(1,30)	1:A:24:ILE:N	1:A:24:ILE:CA	1:A:24:ILE:C	1:A:25:ILE:N	20	1.2
(1,29)	1:A:23:SER:C	1:A:24:ILE:N	1:A:24:ILE:CA	1:A:24:ILE:C	7	1.2
(1,19)	1:A:15:THR:C	1:A:16:ILE:N	1:A:16:ILE:CA	1:A:16:ILE:C	9	1.2
(1,127)	1:A:108:THR:C	1:A:109:LEU:N	1:A:109:LEU:CA	1:A:109:LEU:C	15	1.2
(1,123)	1:A:106:ASP:C	1:A:107:GLY:N	1:A:107:GLY:CA	1:A:107:GLY:C	8	1.2
(1,108)	1:A:98:GLU:N	1:A:98:GLU:CA	1:A:98:GLU:C	1:A:99:LEU:N	4	1.2
(1,100)	1:A:88:VAL:N	1:A:88:VAL:CA	1:A:88:VAL:C	1:A:89:TYR:N	14	1.2
(1,95)	1:A:85:ILE:C	1:A:86:SER:N	1:A:86:SER:CA	1:A:86:SER:C	13	1.1
(1,85)	1:A:77:CYS:C	1:A:78:GLU:N	1:A:78:GLU:CA	1:A:78:GLU:C	9	1.1
(1,75)	1:A:64:PHE:C	1:A:65:ALA:N	1:A:65:ALA:CA	1:A:65:ALA:C	7	1.1
(1,40)	1:A:29:ARG:N	1:A:29:ARG:CA	1:A:29:ARG:C	1:A:30:TYR:N	2	1.1
(1,33)	1:A:25:ILE:C	1:A:26:ILE:N	1:A:26:ILE:CA	1:A:26:ILE:C	9	1.1
(1,188)	1:A:140:ILE:N	1:A:140:ILE:CA	1:A:140:ILE:C	1:A:141:ARG:N	2	1.1
(1,172)	1:A:132:ALA:N	1:A:132:ALA:CA	1:A:132:ALA:C	1:A:133:LEU:N	6	1.1
(1,172)	1:A:132:ALA:N	1:A:132:ALA:CA	1:A:132:ALA:C	1:A:133:LEU:N	14	1.1
(1,132)	1:A:111:GLU:N	1:A:111:GLU:CA	1:A:111:GLU:C	1:A:112:LEU:N	2	1.1
(1,124)	1:A:107:GLY:N	1:A:107:GLY:CA	1:A:107:GLY:C	1:A:108:THR:N	10	1.1
(1,122)	1:A:105:GLY:N	1:A:105:GLY:CA	1:A:105:GLY:C	1:A:106:ASP:N	2	1.1
(1,108)	1:A:98:GLU:N	1:A:98:GLU:CA	1:A:98:GLU:C	1:A:99:LEU:N	11	1.1
(1,106)	1:A:97:VAL:N	1:A:97:VAL:CA	1:A:97:VAL:C	1:A:98:GLU:N	20	1.1
(1,100)	1:A:88:VAL:N	1:A:88:VAL:CA	1:A:88:VAL:C	1:A:89:TYR:N	11	1.1