



# wwPDB NMR Structure Validation Summary Report ⓘ

Apr 2, 2020 – 11:08 AM CDT

PDB ID : 1PQX  
Title : Solution NMR Structure of Staphylococcus aureus protein SAV1430. Northeast Structural Genomics Consortium Target ZR18.  
Authors : Baran, M.C.; Aramini, J.M.; Xiao, R.; Huang, Y.J.; Acton, T.B.; Shih, L.; Montelione, G.T.; Northeast Structural Genomics Consortium (NESG)  
Deposited on : 2003-06-19

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

We welcome your comments at [validation@mail.wwpdb.org](mailto: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

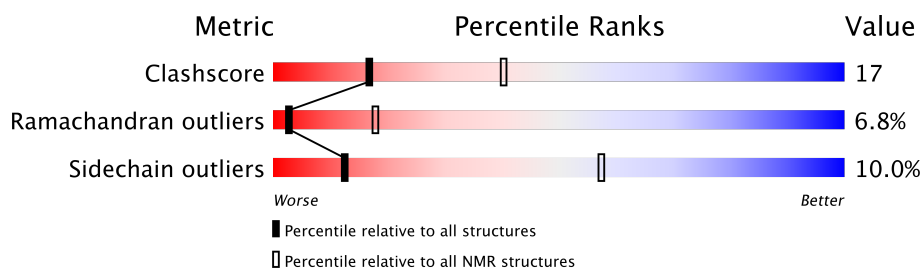
# 1 Overall quality at a glance

The following experimental techniques were used to determine the structure:

*SOLUTION NMR*

The overall completeness of chemical shifts assignment is 66%.

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  $\geq 3$ , 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	91	<div>48% 29% • 22%</div>

## 2 Ensemble composition and analysis

This entry contains 10 models. Model 1 is the overall representative, medoid model (most similar to other models).

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

Well-defined (core) protein residues			
Well-defined core	Residue range (total)	Backbone RMSD (Å)	Medoid model
1	A:2-A:5, A:13-A:21, A:26-A:83 (71)	0.45	1

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

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

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

Cluster number	Models
1	1, 2, 4, 10
2	3, 6, 7, 8
3	5, 9

### 3 Entry composition

There is only 1 type of molecule in this entry. The entry contains 1444 atoms, of which 708 are hydrogens and 0 are deuteriums.

- Molecule 1 is a protein called conserved hypothetical protein.

Mol	Chain	Residues	Atoms						Trace
1	A	91	Total	C	H	N	O	S	0
			1444	462	708	124	146	4	

There are 8 discrepancies between the modelled and reference sequences:

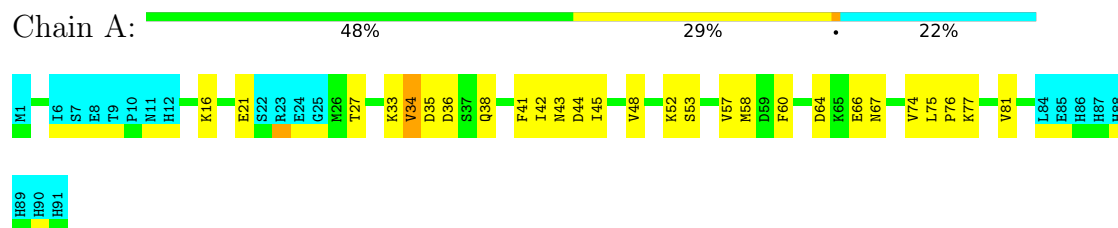
Chain	Residue	Modelled	Actual	Comment	Reference
A	84	LEU	-	EXPRESSION TAG	UNP Q99U58
A	85	GLU	-	EXPRESSION TAG	UNP Q99U58
A	86	HIS	-	EXPRESSION TAG	UNP Q99U58
A	87	HIS	-	EXPRESSION TAG	UNP Q99U58
A	88	HIS	-	EXPRESSION TAG	UNP Q99U58
A	89	HIS	-	EXPRESSION TAG	UNP Q99U58
A	90	HIS	-	EXPRESSION TAG	UNP Q99U58
A	91	HIS	-	EXPRESSION TAG	UNP Q99U58

## 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.

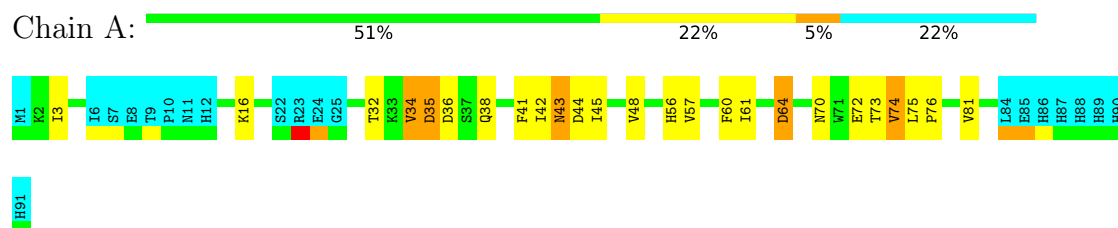
- Molecule 1: conserved hypothetical protein



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

The representative model is number 1. Colouring as in section 4.1 above.

- Molecule 1: conserved hypothetical protein



## 5 Refinement protocol and experimental data overview

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

Of the 56 calculated structures, 10 were deposited, based on the following criterion: *overall energy*.

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

Software name	Classification	Version
X-PLOR	structure solution	
X-PLOR	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)	1pqx_nmr.cif
Number of chemical shift lists	1
Total number of shifts	1077
Number of shifts mapped to atoms	684
Number of unparsed shifts	119
Number of shifts with mapping errors	0
Number of shifts with mapping warnings	274
Assignment completeness (well-defined parts)	66%

No validations of the models with respect to experimental NMR restraints is performed at this time.

## 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	565	562	562	19±3
All	All	5650	5620	5620	189

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 17.

5 of 94 unique clashes are listed below, sorted by their clash magnitude.

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:42:ILE:HD13	1:A:45:ILE:HD12	0.83	1.50	1	10
1:A:48:VAL:O	1:A:51:VAL:HG22	0.82	1.75	3	1
1:A:51:VAL:O	1:A:53:SER:N	0.76	2.18	3	3
1:A:45:ILE:HD11	1:A:81:VAL:HG21	0.71	1.62	3	6
1:A:51:VAL:O	1:A:64:ASP:O	0.68	2.11	3	3

### 6.3 Torsion angles [i](#)

#### 6.3.1 Protein backbone [i](#)

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

Mol	Chain	Analysed	Favoured	Allowed	Outliers	Percentiles	
1	A	71/91 (78%)	53±2 (75±2%)	13±2 (18±3%)	5±2 (7±2%)	3	18
All	All	710/910 (78%)	534 (75%)	128 (18%)	48 (7%)	3	18

5 of 14 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	34	VAL	10
1	A	36	ASP	6
1	A	35	ASP	6
1	A	27	THR	5
1	A	58	MET	3

### 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	67/86 (78%)	60±1 (90±2%)	7±1 (10±2%)	12	57
All	All	670/860 (78%)	603 (90%)	67 (10%)	12	57

5 of 31 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	74	VAL	8
1	A	64	ASP	4
1	A	30	THR	4
1	A	77	LYS	3
1	A	75	LEU	3

### 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 66% for the well-defined parts and 60% for the entire structure.

### 7.1 Chemical shift list 1

File name: 1pqx\_nmr.cif

Chemical shift list name: *nef\_chemical\_shift\_list\_1pqx.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	1077
Number of shifts mapped to atoms	684
Number of unparsed shifts	119
Number of shifts with mapping errors	0
Number of shifts with mapping warnings	274
Number of shift outliers (ShiftChecker)	1

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

- Chemical shift has been reported more than once. First 5 (of 119) occurrences are reported below.

Shift ID	Chain	Res	Type	Atom	Shift Data		
					Value	Uncertainty	Ambiguity
32	A	3	ILE	HG2%	0.595	0.020	1
33	A	3	ILE	HG2%	0.595	0.020	1
35	A	3	ILE	HD1%	0.775	0.020	1
36	A	3	ILE	HD1%	0.775	0.020	1
50	A	4	ILE	HG2%	0.802	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 274) occurrences are reported below.

Chain	Res	Type	Atom	Shift Data		
				Value	Uncertainty	Ambiguity
A	59	ASP	HBx	2.431	0.02	2
A	53	SER	HBx	3.881	0.02	2

*Continued on next page...*

Continued from previous page...

Chain	Res	Type	Atom	Shift Data		
				Value	Uncertainty	Ambiguity
A	25	GLY	HAx	3.981	0.02	2
A	7	SER	HBx	3.622	0.02	2
A	35	ASP	HBx	2.535	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
$^{13}\text{C}_\alpha$	87	$-0.23 \pm 0.27$	None needed ( $< 0.5$ ppm)
$^{13}\text{C}_\beta$	85	$0.19 \pm 0.24$	None needed ( $< 0.5$ ppm)
$^{13}\text{C}'$	82	$-0.02 \pm 0.25$	None needed ( $< 0.5$ ppm)
$^{15}\text{N}$	82	$-0.11 \pm 0.51$	None needed ( $< 0.5$ ppm)

### 7.1.3 Completeness of resonance assignments [i](#)

The following table shows the completeness of the chemical shift assignments for the well-defined regions of the structure. The overall completeness is 66%, i.e. 568 atoms were assigned a chemical shift out of a possible 862. 11 out of 11 assigned methyl groups (LEU and VAL) were assigned stereospecifically.

	Total	$^1\text{H}$	$^{13}\text{C}$	$^{15}\text{N}$
Backbone	348/351 (99%)	139/140 (99%)	140/142 (99%)	69/69 (100%)
Sidechain	182/448 (41%)	24/258 (9%)	153/178 (86%)	5/12 (42%)
Aromatic	38/63 (60%)	19/34 (56%)	18/27 (67%)	1/2 (50%)
Overall	568/862 (66%)	182/432 (42%)	311/347 (90%)	75/83 (90%)

### 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.

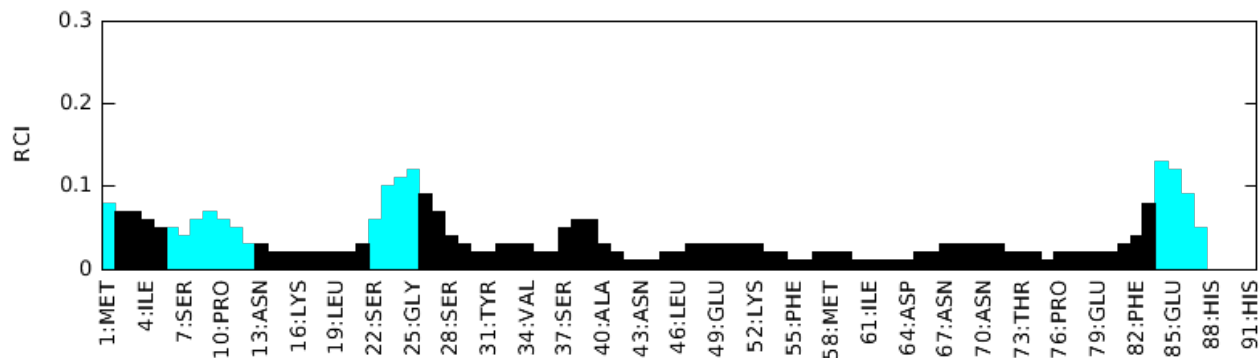
Mol	Chain	Res	Type	Atom	Shift, ppm	Expected range, ppm	Z-score
1	A	64	ASP	HA	6.21	6.15 – 3.05	5.2

### 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 Distance restraints analysis

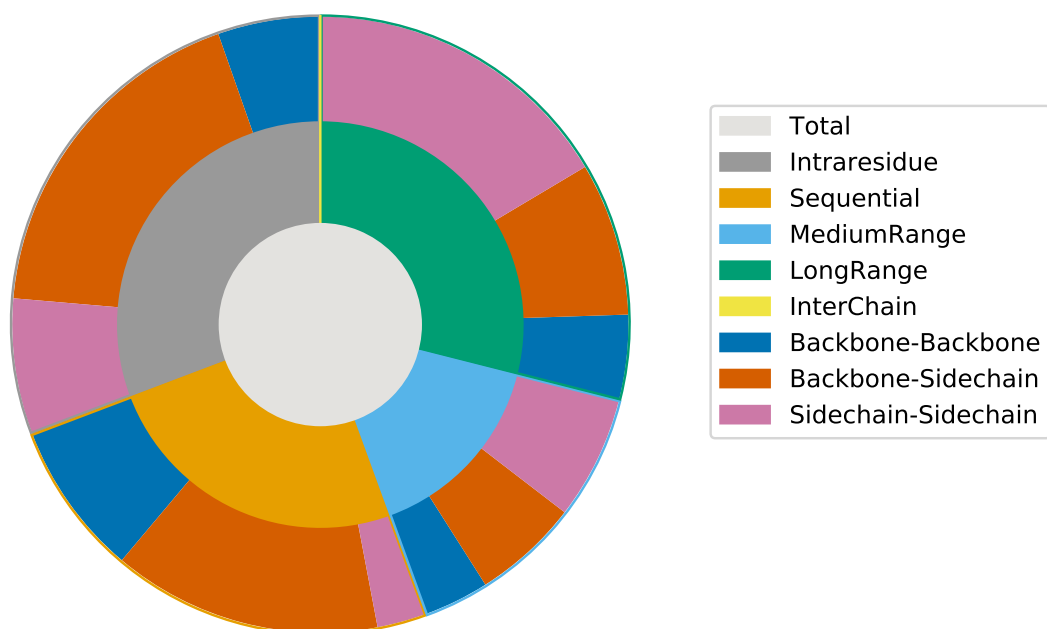
### 8.1 Distance restraints summary

Restraints are counted in different categories based on the atoms involved in each restraint.

Restraints type	B-B <sup>1</sup> (H <sup>4</sup> )	B-S <sup>2</sup> (H <sup>4</sup> )	S-S <sup>3</sup> (H <sup>4</sup> )	Total		
				Total(H <sup>4</sup> )	RR <sup>5</sup>	% <sup>6</sup>
Intraresidue ( $ i-j =0$ )	83(0)	282(0)	110(0)	475(0)	5.7	30.8
Sequential ( $ i-j =1$ )	125(0)	218(0)	40(0)	383(0)	4.6	24.8
Medium range ( $ i-j >1$ and $ i-j <5$ )	53(22)	86(0)	100(0)	239(22)	2.9	15.5
Long range ( $ i-j \geq 5$ )	69(32)	124(0)	254(0)	447(32)	5.4	29.0
Inter chain	0(0)	0(0)	0(0)	0(0)	0.0	0.0
Total	330(54)	710(0)	504(0)	1544(54)	18.6	100.0

<sup>1</sup>number of backbone to backbone restraints, <sup>2</sup>number of backbone to sidechain restraints, <sup>3</sup>number of sidechain to sidechain restraints, <sup>4</sup>number of hydrogen bonds in that category, <sup>5</sup>number of restraints per residue, <sup>6</sup>percentage of restraints in that category. There are 0 unmapped restraints

#### 8.1.1 Pie chart : Distance restraints summary



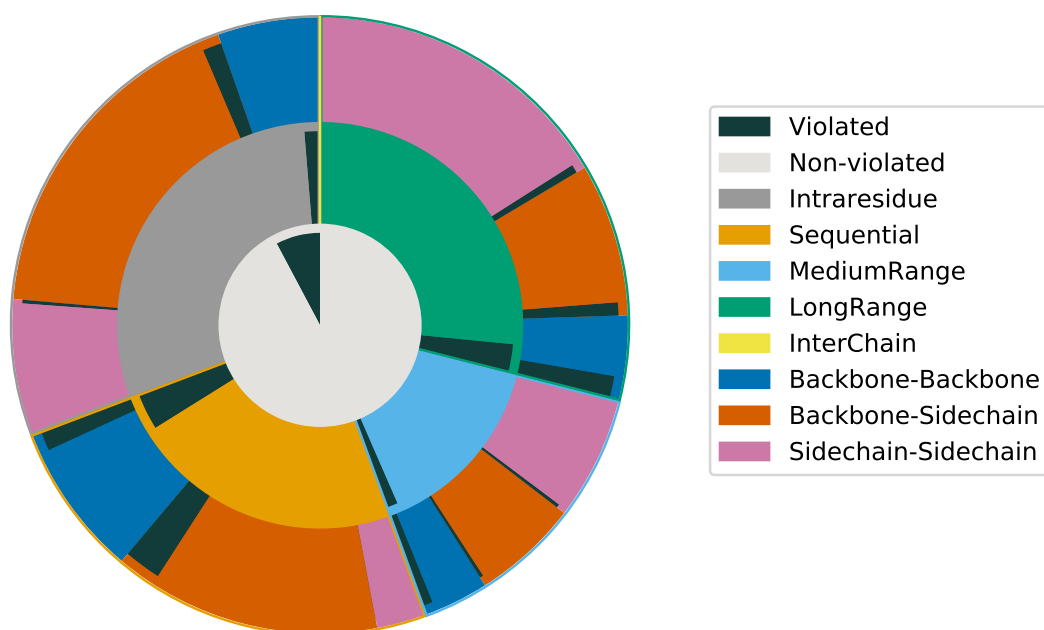
## 8.2 Distance violations summary

The following table provides the summary of violated restraints. Restraints that are violated at least in one model are counted as violated.

Restrains type	B-B <sup>1</sup> (% <sup>4</sup> )	B-S <sup>2</sup> (% <sup>4</sup> )	S-S <sup>3</sup> (% <sup>4</sup> )	Total		
				Total(% <sup>4</sup> )	RR <sup>5</sup>	% <sup>6</sup>
Intraresidue ( $ i-j =0$ )	1(1.2)	16(5.7)	3(2.7)	20(4.2)	0.2	16.7
Sequential ( $ i-j =1$ )	17(13.6)	31(14.2)	0(0.0)	48(12.5)	0.6	40.0
Medium range ( $ i-j >1$ and $ i-j <5$ )	9(17.0)	3(3.5)	3(3.0)	15(6.3)	0.2	12.5
Long range ( $ i-j \geq 5$ )	19(27.5)	11(8.9)	7(2.8)	37(8.3)	0.4	30.8
Inter chain	0(0.0)	0(0.0)	0(0.0)	0(0.0)	0.0	0.0
Total	46(13.9)	61(8.6)	13(2.6)	120(7.8)	1.4	100.0

<sup>1</sup>number of backbone to backbone restraints, <sup>2</sup>number of backbone to sidechain restraints, <sup>3</sup>number of sidechain to sidechain restraints, <sup>4</sup>percentage of violations with respect to total restrains in that category, <sup>5</sup>number of restraints per residue, <sup>6</sup>percentage of violation with respect to total violations.

### 8.2.1 Pie-chart : Distance violations summary



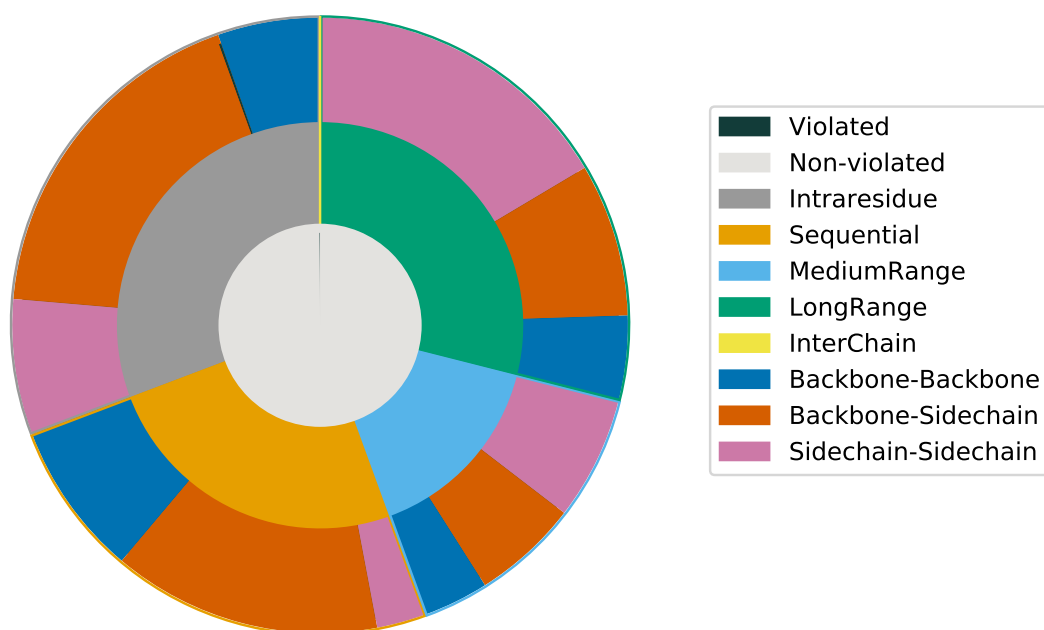
### 8.3 Consistent distance violations summary

The following table provides the summary of consistently violated restraints. Restraints that are violated in all models are counted as consistently violated.

Restrains type	B-B <sup>1</sup> (% <sup>4</sup> )	B-S <sup>2</sup> (% <sup>4</sup> )	S-S <sup>3</sup> (% <sup>4</sup> )	Total		
				Total(% <sup>4</sup> )	RR <sup>5</sup>	% <sup>6</sup>
Intraresidue ( $ i-j =0$ )	0(0.0)	2(0.7)	0(0.0)	2(0.4)	0.0	100.0
Sequential ( $ i-j =1$ )	0(0.0)	0(0.0)	0(0.0)	0(0.0)	0.0	0.0
Medium range ( $ i-j >1$ and $ i-j <5$ )	0(0.0)	0(0.0)	0(0.0)	0(0.0)	0.0	0.0
Long range ( $ i-j \geq 5$ )	0(0.0)	0(0.0)	0(0.0)	0(0.0)	0.0	0.0
Inter chain	0(0.0)	0(0.0)	0(0.0)	0(0.0)	0.0	0.0
Total	0(0.0)	2(0.3)	0(0.0)	2(0.1)	0.0	100.0

<sup>1</sup>number of backbone to backbone restraints, <sup>2</sup>number of backbone to sidechain restraints, <sup>3</sup>number of sidechain to sidechain restraints, <sup>4</sup>percentage of violations with respect to total restrains in that category, <sup>5</sup>number of restraints per residue, <sup>6</sup>percentage of violation with respect to total violations

#### 8.3.1 Pie-chart : Consistent distance violations



## 8.4 Residual distance violations

Violation are counted in different bin sizes and listed below

Range (Å)	Avg. No. of violated restraints per model	Max violation (Å)
0-0.2	30.9	0.2
0.2-0.5	1.3	0.46
0.5-1.0	0.1	0.54
1.0-2.0	None	None
2.0-5.0	None	None
5.0<	None	None

## 8.5 Distance violations in ensemble

The restraints are grouped based on the number of violated models and listed here.

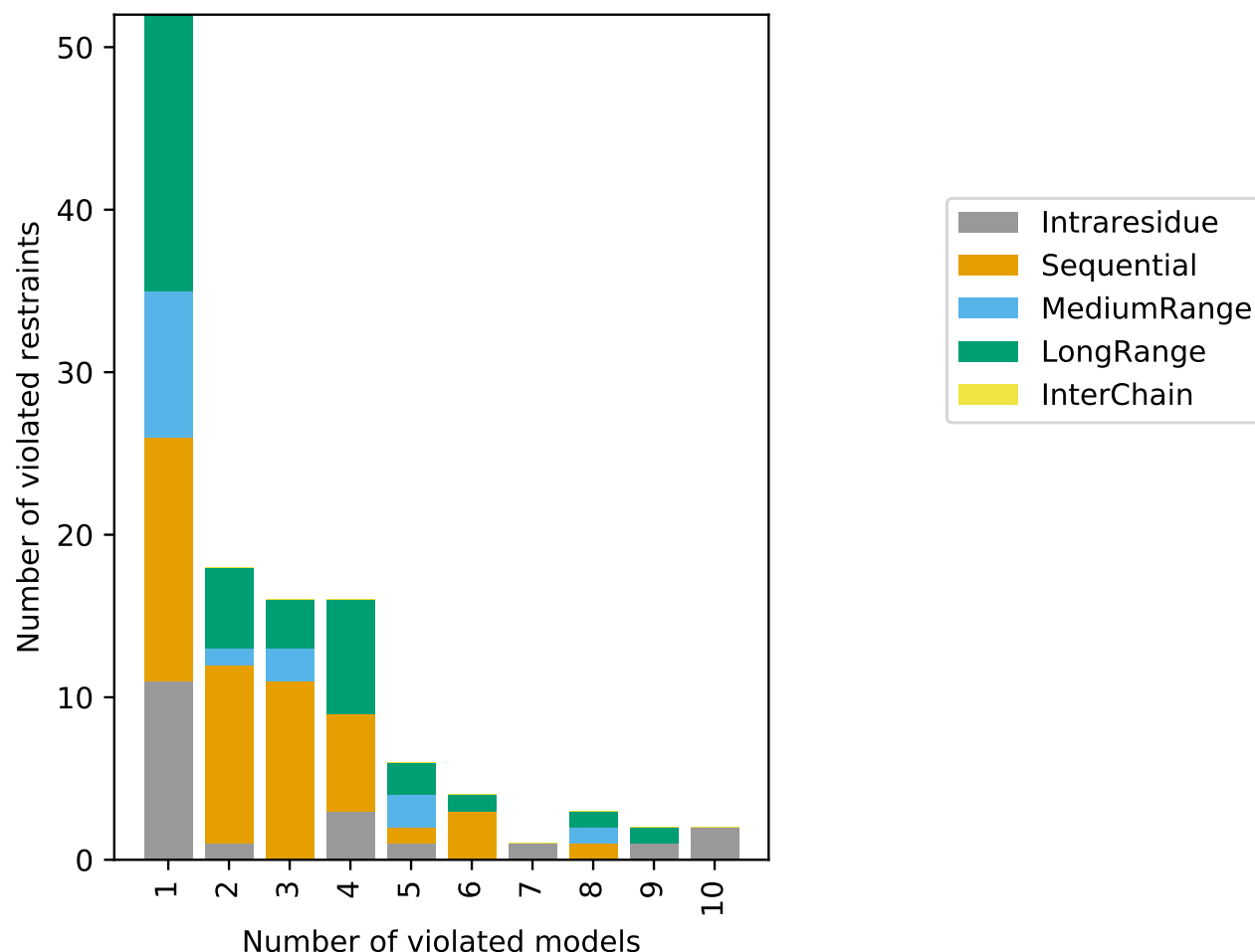
No. of violated restraints						No. of violated models
IR <sup>1</sup>	SQ <sup>2</sup>	MR <sup>3</sup>	LR <sup>4</sup>	IC <sup>5</sup>	Total	
11	15	9	17	0	52	1
1	11	1	5	0	18	2
0	11	2	3	0	16	3
3	6	0	7	0	16	4
1	1	2	2	0	6	5
0	3	0	1	0	4	6
1	0	0	0	0	1	7
0	1	1	1	0	3	8
1	0	0	1	0	2	9
2	0	0	0	0	2	10

<sup>1</sup>intraresidue restraints, <sup>2</sup>sequential restraints, <sup>3</sup>medium range restraints, <sup>4</sup>long range restraints,

<sup>5</sup>inter chain restraints



### 8.5.1 Bar graph : No. of models vs No. of violations



455 intraresidue restraints, 335 sequential restraints, 224 medium range restraints, 410 long range restraints and 0 inter chain restraints are not violated. In total, 1424 restraints are not violated in any of the models

## 8.6 Violations in each model

The following table lists the violation count in each model in the ensemble

Model ID	No. of violations					Total	Mean (Å)	Max (Å)
	IR <sup>1</sup>	SQ <sup>2</sup>	MR <sup>3</sup>	LR <sup>4</sup>	IC <sup>5</sup>			
1	10	11	2	9	0	32	0.05	0.14
2	6	13	3	7	0	29	0.06	0.36
3	7	10	5	11	0	33	0.07	0.33
4	4	14	4	9	0	31	0.06	0.31
5	7	14	6	8	0	35	0.05	0.18

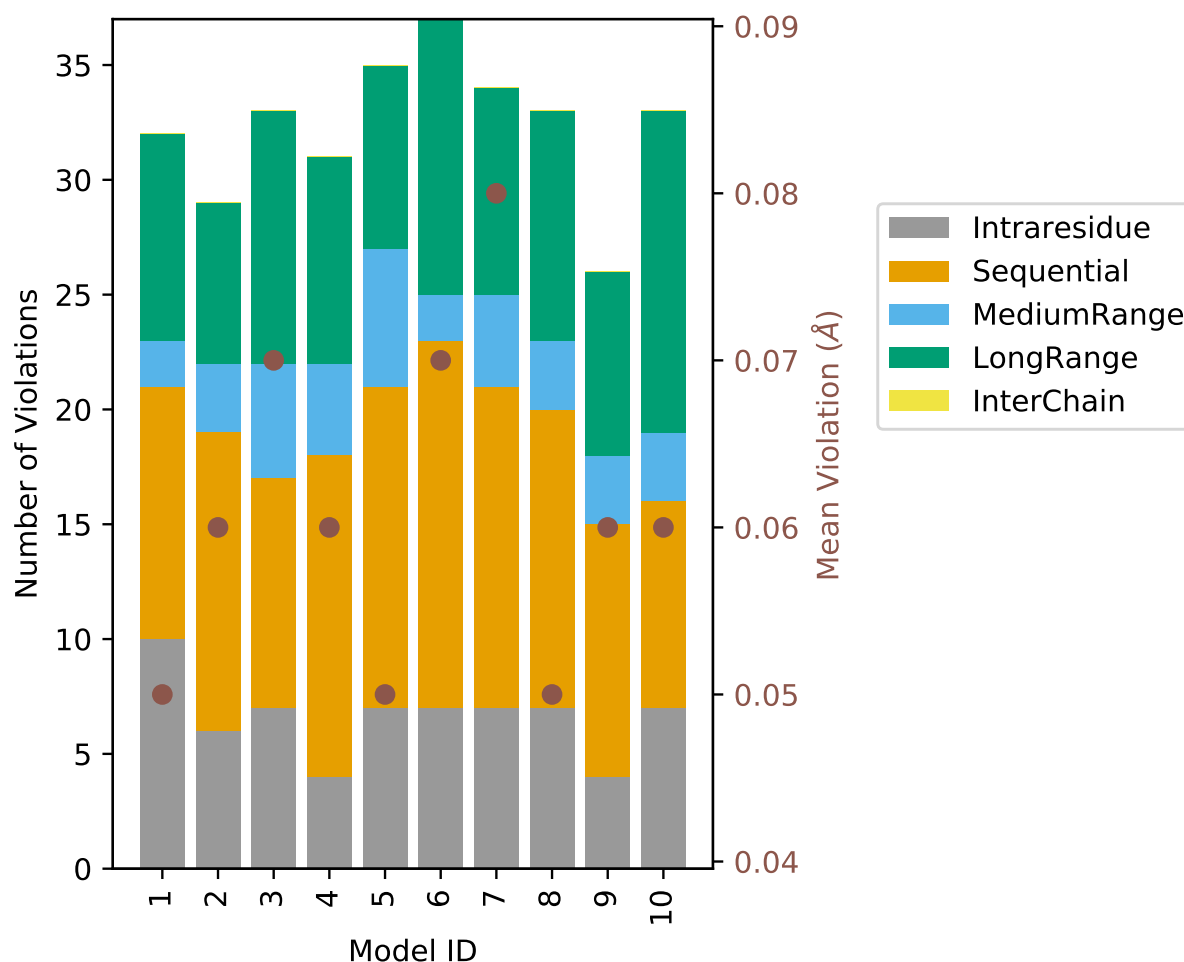
*Continued on next page...*

Continued from previous page...

Model ID	No. of violations						Mean (Å)	Max (Å)
	IR <sup>1</sup>	SQ <sup>2</sup>	MR <sup>3</sup>	LR <sup>4</sup>	IC <sup>5</sup>	Total		
6	7	16	2	12	0	37	0.07	0.46
7	7	14	4	9	0	34	0.08	0.33
8	7	13	3	10	0	33	0.05	0.44
9	4	11	3	8	0	26	0.06	0.24
10	7	9	3	14	0	33	0.06	0.54

<sup>1</sup>intraresidue restraints, <sup>2</sup>iequential restraints, <sup>3</sup>iedium range restraints, <sup>4</sup>long range restraints, <sup>5</sup>inter chain restraints

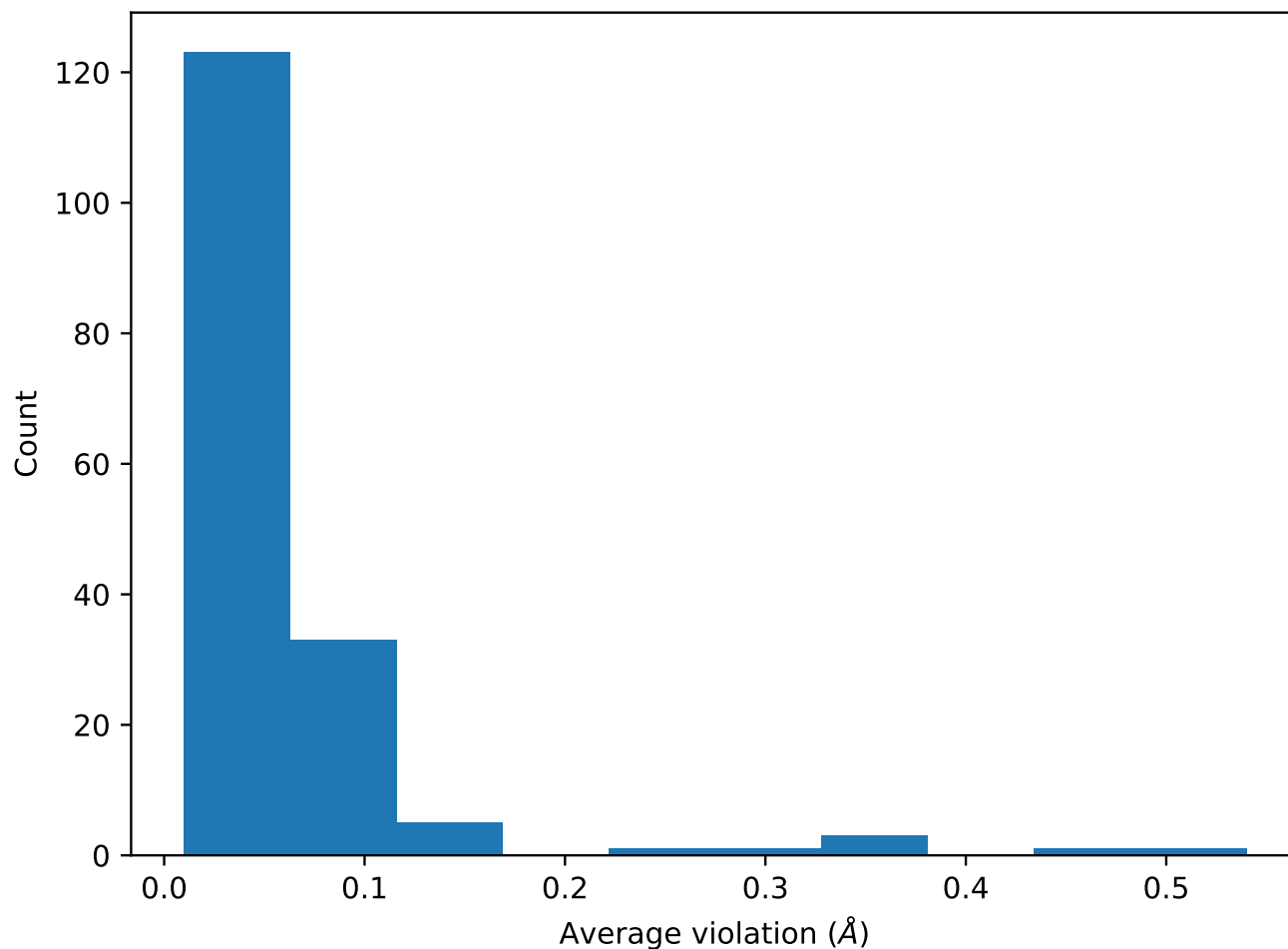
### 8.6.1 Bar graph : Violations in each model



## 8.7 Most violated distance restraints

### 8.7.1 Histogram : Distribution of mean distance violations

The following histogram shows the distribution of average violations of each restraint.



### 8.7.2 Table: Most violated distance restraints

The following table lists the average violation of each restraint sorted by number of violated models

Key	Atom-1	Atom-2	Models	Mean (Å)	Max (Å)
(1,794)	1:A:43:ASN:H	1:A:43:ASN:HB3	10	0.09	0.1
(1,1495)	1:A:82:PHE:H	1:A:82:PHE:HZ	10	0.05	0.08
(1,48)	1:A:64:ASP:O	1:A:53:SER:H	9	0.1	0.25
(1,422)	1:A:22:SER:H	1:A:22:SER:HA	9	0.02	0.03
(1,701)	1:A:39:PRO:HD3	1:A:42:ILE:HG12	8	0.02	0.05
(1,46)	1:A:63:VAL:O	1:A:15:MET:H	8	0.04	0.06

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Models	Mean (Å)	Max (Å)
(1,209)	1:A:8:GLU:HB2	1:A:9:THR:H	8	0.07	0.15
(1,589)	1:A:34:VAL:H	1:A:34:VAL:HB	7	0.07	0.13
(1,601)	1:A:34:VAL:HG11	1:A:35:ASP:H	6	0.1	0.14
(1,601)	1:A:34:VAL:HG12	1:A:35:ASP:H	6	0.1	0.14
(1,601)	1:A:34:VAL:HG13	1:A:35:ASP:H	6	0.1	0.14
(1,501)	1:A:29:ASP:HB3	1:A:56:HIS:H	6	0.03	0.07
(1,409)	1:A:20:SER:H	1:A:21:GLU:HA	6	0.1	0.13
(1,210)	1:A:8:GLU:HB3	1:A:9:THR:H	6	0.06	0.12
(1,47)	1:A:64:ASP:O	1:A:53:SER:N	5	0.11	0.24
(1,40)	1:A:60:PHE:O	1:A:57:VAL:H	5	0.02	0.05
(1,267)	1:A:14:THR:HB	1:A:64:ASP:HB2	5	0.16	0.23
(1,26)	1:A:48:VAL:O	1:A:51:VAL:H	5	0.05	0.08
(1,208)	1:A:8:GLU:HA	1:A:9:THR:H	5	0.3	0.36
(1,1478)	1:A:81:VAL:H	1:A:81:VAL:HG21	5	0.04	0.07
(1,1478)	1:A:81:VAL:H	1:A:81:VAL:HG22	5	0.04	0.07
(1,1478)	1:A:81:VAL:H	1:A:81:VAL:HG23	5	0.04	0.07
(1,855)	1:A:45:ILE:HG21	1:A:45:ILE:HD11	4	0.02	0.04
(1,855)	1:A:45:ILE:HG21	1:A:45:ILE:HD12	4	0.02	0.04
(1,855)	1:A:45:ILE:HG21	1:A:45:ILE:HD13	4	0.02	0.04
(1,855)	1:A:45:ILE:HG22	1:A:45:ILE:HD11	4	0.02	0.04
(1,855)	1:A:45:ILE:HG22	1:A:45:ILE:HD12	4	0.02	0.04
(1,855)	1:A:45:ILE:HG22	1:A:45:ILE:HD13	4	0.02	0.04
(1,855)	1:A:45:ILE:HG23	1:A:45:ILE:HD11	4	0.02	0.04
(1,855)	1:A:45:ILE:HG23	1:A:45:ILE:HD12	4	0.02	0.04
(1,855)	1:A:45:ILE:HG23	1:A:45:ILE:HD13	4	0.02	0.04
(1,8)	1:A:17:ILE:O	1:A:61:ILE:H	4	0.03	0.05
(1,584)	1:A:33:LYS:HA	1:A:34:VAL:H	4	0.15	0.44
(1,540)	1:A:31:TYR:HB3	1:A:54:ILE:H	4	0.04	0.09
(1,349)	1:A:17:ILE:HG12	1:A:61:ILE:HB	4	0.03	0.05
(1,348)	1:A:17:ILE:HG13	1:A:18:THR:H	4	0.03	0.05
(1,28)	1:A:50:GLY:O	1:A:66:GLU:H	4	0.03	0.04
(1,251)	1:A:13:ASN:HB2	1:A:65:LYS:H	4	0.06	0.1
(1,242)	1:A:13:ASN:H	1:A:14:THR:H	4	0.06	0.09
(1,231)	1:A:11:ASN:H	1:A:11:ASN:HB2	4	0.08	0.14
(1,214)	1:A:9:THR:H	1:A:10:PRO:HA	4	0.06	0.16
(1,205)	1:A:8:GLU:H	1:A:8:GLU:HB3	4	0.1	0.18
(1,2)	1:A:5:SER:O	1:A:18:THR:H	4	0.04	0.08
(1,183)	1:A:6:ILE:HG21	1:A:7:SER:H	4	0.14	0.16
(1,183)	1:A:6:ILE:HG22	1:A:7:SER:H	4	0.14	0.16
(1,183)	1:A:6:ILE:HG23	1:A:7:SER:H	4	0.14	0.16
(1,1130)	1:A:58:MET:HB2	1:A:59:ASP:H	4	0.07	0.1
(1,1130)	1:A:58:MET:HB3	1:A:59:ASP:H	4	0.07	0.1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Models	Mean (Å)	Max (Å)
(1,1027)	1:A:53:SER:H	1:A:64:ASP:HB3	4	0.05	0.08
(1,733)	1:A:41:PHE:HB2	1:A:81:VAL:HG11	3	0.02	0.03
(1,733)	1:A:41:PHE:HB2	1:A:81:VAL:HG12	3	0.02	0.03
(1,733)	1:A:41:PHE:HB2	1:A:81:VAL:HG13	3	0.02	0.03
(1,733)	1:A:41:PHE:HB3	1:A:81:VAL:HG11	3	0.02	0.03
(1,733)	1:A:41:PHE:HB3	1:A:81:VAL:HG12	3	0.02	0.03
(1,733)	1:A:41:PHE:HB3	1:A:81:VAL:HG13	3	0.02	0.03
(1,648)	1:A:38:GLN:H	1:A:39:PRO:HD2	3	0.03	0.04
(1,50)	1:A:71:TRP:O	1:A:75:LEU:H	3	0.02	0.04
(1,469)	1:A:27:THR:HG21	1:A:28:SER:H	3	0.08	0.11
(1,469)	1:A:27:THR:HG22	1:A:28:SER:H	3	0.08	0.11
(1,469)	1:A:27:THR:HG23	1:A:28:SER:H	3	0.08	0.11
(1,448)	1:A:24:GLU:HB2	1:A:25:GLY:H	3	0.04	0.08
(1,448)	1:A:24:GLU:HB3	1:A:25:GLY:H	3	0.04	0.08
(1,290)	1:A:15:MET:HG3	1:A:16:LYS:H	3	0.08	0.09
(1,24)	1:A:45:ILE:O	1:A:48:VAL:H	3	0.03	0.05
(1,238)	1:A:12:HIS:HD2	1:A:71:TRP:HE1	3	0.03	0.06
(1,226)	1:A:10:PRO:HG3	1:A:11:ASN:H	3	0.05	0.11
(1,215)	1:A:9:THR:H	1:A:10:PRO:HD2	3	0.04	0.05
(1,1522)	1:A:84:LEU:H	1:A:85:GLU:H	3	0.04	0.09
(1,1512)	1:A:83:GLU:HA	1:A:84:LEU:H	3	0.03	0.04
(1,1508)	1:A:83:GLU:H	1:A:84:LEU:H	3	0.04	0.07
(1,14)	1:A:31:TYR:O	1:A:54:ILE:H	3	0.04	0.06
(1,1341)	1:A:73:THR:H	1:A:74:VAL:HA	3	0.01	0.02
(1,1003)	1:A:52:LYS:H	1:A:53:SER:H	3	0.25	0.27
(1,79)	1:A:3:ILE:H	1:A:3:ILE:HB	2	0.07	0.09
(1,71)	1:A:2:LYS:HB2	1:A:3:ILE:H	2	0.04	0.04
(1,71)	1:A:2:LYS:HB3	1:A:3:ILE:H	2	0.04	0.04
(1,669)	1:A:38:GLN:HE21	1:A:42:ILE:HG21	2	0.04	0.05
(1,669)	1:A:38:GLN:HE21	1:A:42:ILE:HG22	2	0.04	0.05
(1,669)	1:A:38:GLN:HE21	1:A:42:ILE:HG23	2	0.04	0.05
(1,627)	1:A:35:ASP:H	1:A:43:ASN:HD22	2	0.06	0.07
(1,566)	1:A:32:THR:H	1:A:33:LYS:H	2	0.07	0.12
(1,461)	1:A:26:MET:HB2	1:A:27:THR:H	2	0.06	0.07
(1,461)	1:A:26:MET:HB3	1:A:27:THR:H	2	0.06	0.07
(1,42)	1:A:61:ILE:O	1:A:17:ILE:H	2	0.04	0.04
(1,30)	1:A:53:SER:O	1:A:64:ASP:H	2	0.06	0.1
(1,216)	1:A:9:THR:H	1:A:10:PRO:HD3	2	0.01	0.02
(1,197)	1:A:7:SER:HA	1:A:8:GLU:H	2	0.06	0.07
(1,165)	1:A:5:SER:H	1:A:18:THR:HA	2	0.02	0.03
(1,163)	1:A:5:SER:H	1:A:17:ILE:HA	2	0.01	0.01
(1,1539)	1:A:85:GLU:HB2	1:A:86:HIS:H	2	0.07	0.09

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Models	Mean (Å)	Max (Å)
(1,1539)	1:A:85:GLU:HB3	1:A:86:HIS:H	2	0.07	0.09
(1,1531)	1:A:84:LEU:HB2	1:A:85:GLU:H	2	0.06	0.08
(1,1526)	1:A:84:LEU:HA	1:A:85:GLU:H	2	0.03	0.05
(1,146)	1:A:4:ILE:HG13	1:A:5:SER:H	2	0.04	0.04
(1,1349)	1:A:73:THR:HG21	1:A:74:VAL:H	2	0.02	0.02
(1,1349)	1:A:73:THR:HG22	1:A:74:VAL:H	2	0.02	0.02
(1,1349)	1:A:73:THR:HG23	1:A:74:VAL:H	2	0.02	0.02
(1,1116)	1:A:57:VAL:HG21	1:A:58:MET:H	2	0.09	0.11
(1,1116)	1:A:57:VAL:HG22	1:A:58:MET:H	2	0.09	0.11
(1,1116)	1:A:57:VAL:HG23	1:A:58:MET:H	2	0.09	0.11
(1,984)	1:A:51:VAL:H	1:A:51:VAL:HG21	1	0.33	0.33
(1,984)	1:A:51:VAL:H	1:A:51:VAL:HG22	1	0.33	0.33
(1,984)	1:A:51:VAL:H	1:A:51:VAL:HG23	1	0.33	0.33
(1,960)	1:A:49:GLU:H	1:A:49:GLU:HG2	1	0.06	0.06
(1,960)	1:A:49:GLU:H	1:A:49:GLU:HG3	1	0.06	0.06
(1,92)	1:A:3:ILE:HA	1:A:4:ILE:HB	1	0.01	0.01
(1,716)	1:A:40:ALA:HA	1:A:44:ASP:H	1	0.02	0.02
(1,673)	1:A:38:GLN:HE22	1:A:46:LEU:HD11	1	0.1	0.1
(1,673)	1:A:38:GLN:HE22	1:A:46:LEU:HD12	1	0.1	0.1
(1,673)	1:A:38:GLN:HE22	1:A:46:LEU:HD13	1	0.1	0.1
(1,67)	1:A:2:LYS:H	1:A:20:SER:H	1	0.01	0.01
(1,668)	1:A:38:GLN:HG2	1:A:43:ASN:HD22	1	0.06	0.06
(1,668)	1:A:38:GLN:HG3	1:A:43:ASN:HD22	1	0.06	0.06
(1,665)	1:A:38:GLN:HB3	1:A:43:ASN:HD22	1	0.01	0.01
(1,654)	1:A:38:GLN:HB3	1:A:38:GLN:HE22	1	0.01	0.01
(1,652)	1:A:38:GLN:HB2	1:A:38:GLN:HE22	1	0.09	0.09
(1,649)	1:A:38:GLN:H	1:A:39:PRO:HD3	1	0.01	0.01
(1,646)	1:A:38:GLN:H	1:A:38:GLN:HG2	1	0.03	0.03
(1,646)	1:A:38:GLN:H	1:A:38:GLN:HG3	1	0.03	0.03
(1,638)	1:A:37:SER:H	1:A:38:GLN:H	1	0.05	0.05
(1,634)	1:A:36:ASP:HB2	1:A:37:SER:H	1	0.03	0.03
(1,634)	1:A:36:ASP:HB3	1:A:37:SER:H	1	0.03	0.03
(1,625)	1:A:35:ASP:H	1:A:38:GLN:HE21	1	0.05	0.05
(1,6)	1:A:15:MET:O	1:A:63:VAL:H	1	0.01	0.01
(1,504)	1:A:30:THR:H	1:A:30:THR:HB	1	0.02	0.02
(1,494)	1:A:29:ASP:HA	1:A:56:HIS:H	1	0.02	0.02
(1,490)	1:A:29:ASP:H	1:A:56:HIS:HB3	1	0.04	0.04
(1,447)	1:A:24:GLU:HA	1:A:25:GLY:H	1	0.05	0.05
(1,44)	1:A:62:SER:O	1:A:55:PHE:H	1	0.02	0.02
(1,438)	1:A:23:ARG:HB2	1:A:24:GLU:H	1	0.05	0.05
(1,424)	1:A:22:SER:HA	1:A:23:ARG:H	1	0.46	0.46
(1,38)	1:A:57:VAL:O	1:A:60:PHE:H	1	0.02	0.02

*Continued on next page...*

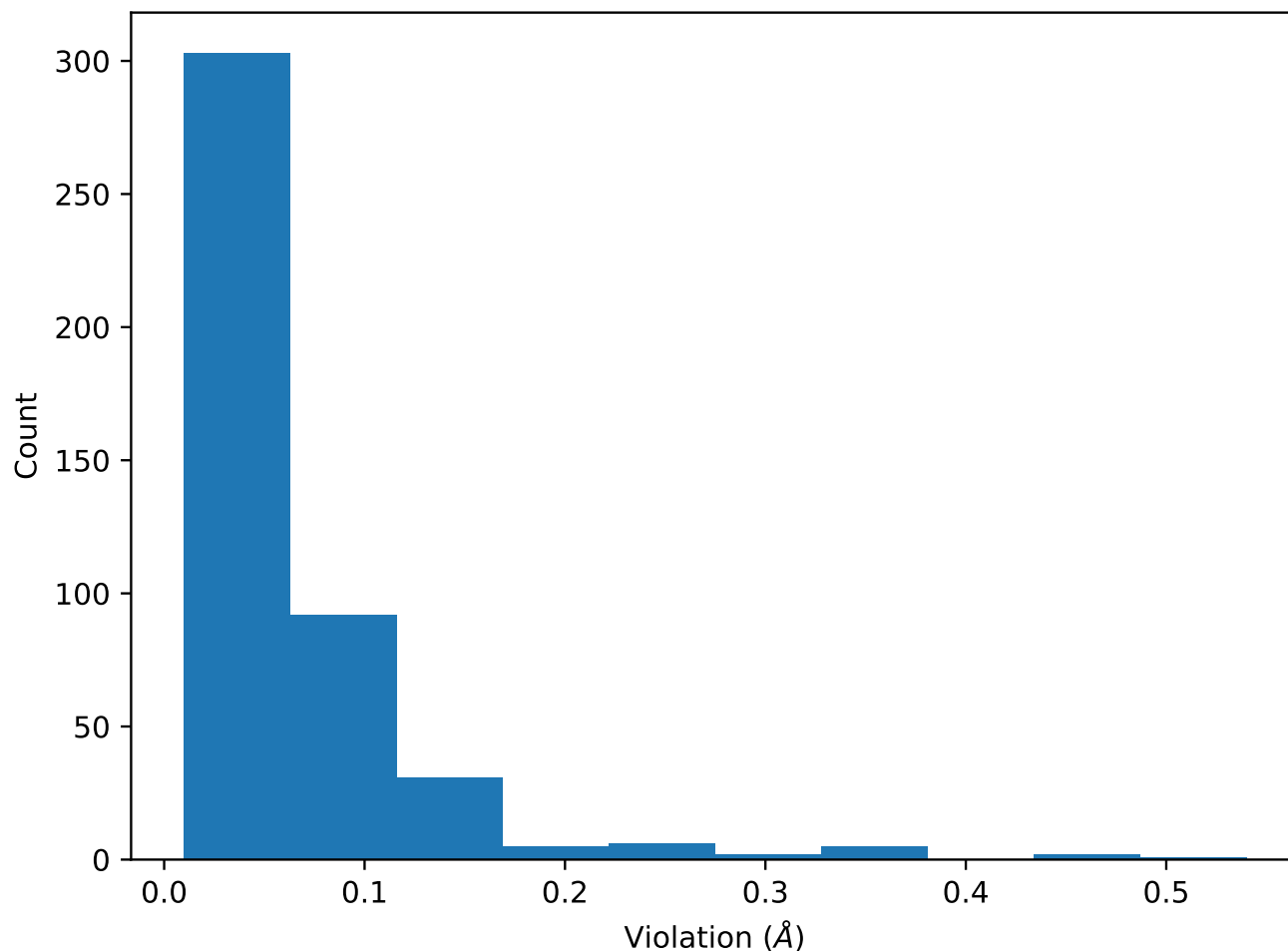
*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Models	Mean (Å)	Max (Å)
(1,319)	1:A:16:LYS:HG2	1:A:17:ILE:H	1	0.08	0.08
(1,319)	1:A:16:LYS:HG3	1:A:17:ILE:H	1	0.08	0.08
(1,311)	1:A:16:LYS:HA	1:A:62:SER:H	1	0.02	0.02
(1,29)	1:A:53:SER:O	1:A:64:ASP:N	1	0.01	0.01
(1,289)	1:A:15:MET:HG2	1:A:16:LYS:H	1	0.04	0.04
(1,254)	1:A:13:ASN:HD22	1:A:67:ASN:HA	1	0.02	0.02
(1,245)	1:A:13:ASN:HA	1:A:71:TRP:HE1	1	0.04	0.04
(1,235)	1:A:12:HIS:HA	1:A:14:THR:H	1	0.04	0.04
(1,232)	1:A:11:ASN:H	1:A:11:ASN:HB3	1	0.03	0.03
(1,22)	1:A:43:ASN:O	1:A:47:LYS:H	1	0.02	0.02
(1,217)	1:A:9:THR:HB	1:A:11:ASN:H	1	0.07	0.07
(1,206)	1:A:8:GLU:H	1:A:8:GLU:HG2	1	0.03	0.03
(1,206)	1:A:8:GLU:H	1:A:8:GLU:HG3	1	0.03	0.03
(1,204)	1:A:8:GLU:H	1:A:8:GLU:HB2	1	0.08	0.08
(1,20)	1:A:42:ILE:O	1:A:46:LEU:H	1	0.01	0.01
(1,176)	1:A:6:ILE:HA	1:A:7:SER:H	1	0.54	0.54
(1,166)	1:A:5:SER:H	1:A:18:THR:HB	1	0.02	0.02
(1,1536)	1:A:85:GLU:H	1:A:85:GLU:HG2	1	0.02	0.02
(1,1536)	1:A:85:GLU:H	1:A:85:GLU:HG3	1	0.02	0.02
(1,150)	1:A:4:ILE:HG13	1:A:20:SER:H	1	0.01	0.01
(1,145)	1:A:4:ILE:HG12	1:A:5:SER:H	1	0.11	0.11
(1,140)	1:A:4:ILE:HB	1:A:5:SER:H	1	0.03	0.03
(1,1339)	1:A:73:THR:H	1:A:73:THR:HG21	1	0.05	0.05
(1,1339)	1:A:73:THR:H	1:A:73:THR:HG22	1	0.05	0.05
(1,1339)	1:A:73:THR:H	1:A:73:THR:HG23	1	0.05	0.05
(1,13)	1:A:31:TYR:O	1:A:54:ILE:N	1	0.02	0.02
(1,1295)	1:A:70:ASN:HB2	1:A:72:GLU:H	1	0.02	0.02
(1,1283)	1:A:69:ALA:HB1	1:A:70:ASN:H	1	0.02	0.02
(1,1283)	1:A:69:ALA:HB2	1:A:70:ASN:H	1	0.02	0.02
(1,1283)	1:A:69:ALA:HB3	1:A:70:ASN:H	1	0.02	0.02
(1,1260)	1:A:66:GLU:HB2	1:A:67:ASN:H	1	0.01	0.01
(1,1260)	1:A:66:GLU:HB3	1:A:67:ASN:H	1	0.01	0.01
(1,1223)	1:A:65:LYS:HB2	1:A:66:GLU:H	1	0.02	0.02
(1,1214)	1:A:65:LYS:H	1:A:71:TRP:HH2	1	0.01	0.01
(1,1114)	1:A:57:VAL:HB	1:A:60:PHE:HZ	1	0.02	0.02
(1,10)	1:A:18:THR:O	1:A:4:ILE:H	1	0.03	0.03

## 8.8 All distance violations

### 8.8.1 Histogram : Distribution of distance violations

The following histogram shows the distribution of violations in the ensemble.



### 8.8.2 Table : All distance violations

The following table lists the violations in the ensemble sorted by violation value

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,176)	1:A:6:ILE:HA	1:A:7:SER:H	10	0.54
(1,424)	1:A:22:SER:HA	1:A:23:ARG:H	6	0.46
(1,584)	1:A:33:LYS:HA	1:A:34:VAL:H	8	0.44
(1,208)	1:A:8:GLU:HA	1:A:9:THR:H	2	0.36
(1,984)	1:A:51:VAL:H	1:A:51:VAL:HG21	3	0.33
(1,984)	1:A:51:VAL:H	1:A:51:VAL:HG22	3	0.33
(1,984)	1:A:51:VAL:H	1:A:51:VAL:HG23	3	0.33

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,208)	1:A:8:GLU:HA	1:A:9:THR:H	7	0.33
(1,208)	1:A:8:GLU:HA	1:A:9:THR:H	6	0.32
(1,208)	1:A:8:GLU:HA	1:A:9:THR:H	4	0.31
(1,1003)	1:A:52:LYS:H	1:A:53:SER:H	7	0.27
(1,48)	1:A:64:ASP:O	1:A:53:SER:H	3	0.25
(1,47)	1:A:64:ASP:O	1:A:53:SER:N	3	0.24
(1,1003)	1:A:52:LYS:H	1:A:53:SER:H	3	0.24
(1,1003)	1:A:52:LYS:H	1:A:53:SER:H	9	0.24
(1,267)	1:A:14:THR:HB	1:A:64:ASP:HB2	7	0.23
(1,267)	1:A:14:THR:HB	1:A:64:ASP:HB2	9	0.2
(1,48)	1:A:64:ASP:O	1:A:53:SER:H	9	0.18
(1,205)	1:A:8:GLU:H	1:A:8:GLU:HB3	5	0.18
(1,48)	1:A:64:ASP:O	1:A:53:SER:H	7	0.17
(1,208)	1:A:8:GLU:HA	1:A:9:THR:H	5	0.17
(1,214)	1:A:9:THR:H	1:A:10:PRO:HA	7	0.16
(1,183)	1:A:6:ILE:HG21	1:A:7:SER:H	6	0.16
(1,183)	1:A:6:ILE:HG22	1:A:7:SER:H	6	0.16
(1,183)	1:A:6:ILE:HG23	1:A:7:SER:H	6	0.16
(1,183)	1:A:6:ILE:HG21	1:A:7:SER:H	8	0.16
(1,183)	1:A:6:ILE:HG22	1:A:7:SER:H	8	0.16
(1,183)	1:A:6:ILE:HG23	1:A:7:SER:H	8	0.16
(1,47)	1:A:64:ASP:O	1:A:53:SER:N	7	0.15
(1,209)	1:A:8:GLU:HB2	1:A:9:THR:H	7	0.15
(1,183)	1:A:6:ILE:HG21	1:A:7:SER:H	2	0.15
(1,183)	1:A:6:ILE:HG22	1:A:7:SER:H	2	0.15
(1,183)	1:A:6:ILE:HG23	1:A:7:SER:H	2	0.15
(1,601)	1:A:34:VAL:HG11	1:A:35:ASP:H	1	0.14
(1,601)	1:A:34:VAL:HG12	1:A:35:ASP:H	1	0.14
(1,601)	1:A:34:VAL:HG13	1:A:35:ASP:H	1	0.14
(1,601)	1:A:34:VAL:HG11	1:A:35:ASP:H	7	0.14
(1,601)	1:A:34:VAL:HG12	1:A:35:ASP:H	7	0.14
(1,601)	1:A:34:VAL:HG13	1:A:35:ASP:H	7	0.14
(1,267)	1:A:14:THR:HB	1:A:64:ASP:HB2	3	0.14
(1,231)	1:A:11:ASN:H	1:A:11:ASN:HB2	6	0.14
(1,589)	1:A:34:VAL:H	1:A:34:VAL:HB	3	0.13
(1,409)	1:A:20:SER:H	1:A:21:GLU:HA	9	0.13
(1,601)	1:A:34:VAL:HG11	1:A:35:ASP:H	6	0.12
(1,601)	1:A:34:VAL:HG12	1:A:35:ASP:H	6	0.12
(1,601)	1:A:34:VAL:HG13	1:A:35:ASP:H	6	0.12
(1,566)	1:A:32:THR:H	1:A:33:LYS:H	2	0.12
(1,47)	1:A:64:ASP:O	1:A:53:SER:N	9	0.12
(1,409)	1:A:20:SER:H	1:A:21:GLU:HA	1	0.12

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,409)	1:A:20:SER:H	1:A:21:GLU:HA	5	0.12
(1,267)	1:A:14:THR:HB	1:A:64:ASP:HB2	6	0.12
(1,210)	1:A:8:GLU:HB3	1:A:9:THR:H	6	0.12
(1,469)	1:A:27:THR:HG21	1:A:28:SER:H	4	0.11
(1,469)	1:A:27:THR:HG22	1:A:28:SER:H	4	0.11
(1,469)	1:A:27:THR:HG23	1:A:28:SER:H	4	0.11
(1,409)	1:A:20:SER:H	1:A:21:GLU:HA	4	0.11
(1,226)	1:A:10:PRO:HG3	1:A:11:ASN:H	4	0.11
(1,145)	1:A:4:ILE:HG12	1:A:5:SER:H	4	0.11
(1,1116)	1:A:57:VAL:HG21	1:A:58:MET:H	10	0.11
(1,1116)	1:A:57:VAL:HG22	1:A:58:MET:H	10	0.11
(1,1116)	1:A:57:VAL:HG23	1:A:58:MET:H	10	0.11
(1,794)	1:A:43:ASN:H	1:A:43:ASN:HB3	7	0.1
(1,673)	1:A:38:GLN:HE22	1:A:46:LEU:HD11	10	0.1
(1,673)	1:A:38:GLN:HE22	1:A:46:LEU:HD12	10	0.1
(1,673)	1:A:38:GLN:HE22	1:A:46:LEU:HD13	10	0.1
(1,409)	1:A:20:SER:H	1:A:21:GLU:HA	7	0.1
(1,30)	1:A:53:SER:O	1:A:64:ASP:H	5	0.1
(1,267)	1:A:14:THR:HB	1:A:64:ASP:HB2	1	0.1
(1,251)	1:A:13:ASN:HB2	1:A:65:LYS:H	8	0.1
(1,209)	1:A:8:GLU:HB2	1:A:9:THR:H	4	0.1
(1,1130)	1:A:58:MET:HB2	1:A:59:ASP:H	2	0.1
(1,1130)	1:A:58:MET:HB3	1:A:59:ASP:H	2	0.1
(1,794)	1:A:43:ASN:H	1:A:43:ASN:HB3	1	0.09
(1,794)	1:A:43:ASN:H	1:A:43:ASN:HB3	2	0.09
(1,794)	1:A:43:ASN:H	1:A:43:ASN:HB3	3	0.09
(1,794)	1:A:43:ASN:H	1:A:43:ASN:HB3	4	0.09
(1,794)	1:A:43:ASN:H	1:A:43:ASN:HB3	6	0.09
(1,794)	1:A:43:ASN:H	1:A:43:ASN:HB3	8	0.09
(1,794)	1:A:43:ASN:H	1:A:43:ASN:HB3	9	0.09
(1,794)	1:A:43:ASN:H	1:A:43:ASN:HB3	10	0.09
(1,79)	1:A:3:ILE:H	1:A:3:ILE:HB	7	0.09
(1,652)	1:A:38:GLN:HB2	1:A:38:GLN:HE22	2	0.09
(1,601)	1:A:34:VAL:HG11	1:A:35:ASP:H	9	0.09
(1,601)	1:A:34:VAL:HG12	1:A:35:ASP:H	9	0.09
(1,601)	1:A:34:VAL:HG13	1:A:35:ASP:H	9	0.09
(1,540)	1:A:31:TYR:HB3	1:A:54:ILE:H	10	0.09
(1,290)	1:A:15:MET:HG3	1:A:16:LYS:H	2	0.09
(1,242)	1:A:13:ASN:H	1:A:14:THR:H	6	0.09
(1,209)	1:A:8:GLU:HB2	1:A:9:THR:H	2	0.09
(1,209)	1:A:8:GLU:HB2	1:A:9:THR:H	6	0.09
(1,1539)	1:A:85:GLU:HB2	1:A:86:HIS:H	5	0.09

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,1539)	1:A:85:GLU:HB3	1:A:86:HIS:H	5	0.09
(1,1522)	1:A:84:LEU:H	1:A:85:GLU:H	4	0.09
(1,1130)	1:A:58:MET:HB2	1:A:59:ASP:H	3	0.09
(1,1130)	1:A:58:MET:HB3	1:A:59:ASP:H	3	0.09
(1,794)	1:A:43:ASN:H	1:A:43:ASN:HB3	5	0.08
(1,589)	1:A:34:VAL:H	1:A:34:VAL:HB	1	0.08
(1,589)	1:A:34:VAL:H	1:A:34:VAL:HB	7	0.08
(1,584)	1:A:33:LYS:HA	1:A:34:VAL:H	6	0.08
(1,584)	1:A:33:LYS:HA	1:A:34:VAL:H	7	0.08
(1,48)	1:A:64:ASP:O	1:A:53:SER:H	2	0.08
(1,448)	1:A:24:GLU:HB2	1:A:25:GLY:H	7	0.08
(1,448)	1:A:24:GLU:HB3	1:A:25:GLY:H	7	0.08
(1,319)	1:A:16:LYS:HG2	1:A:17:ILE:H	6	0.08
(1,319)	1:A:16:LYS:HG3	1:A:17:ILE:H	6	0.08
(1,290)	1:A:15:MET:HG3	1:A:16:LYS:H	3	0.08
(1,26)	1:A:48:VAL:O	1:A:51:VAL:H	7	0.08
(1,205)	1:A:8:GLU:H	1:A:8:GLU:HB3	7	0.08
(1,204)	1:A:8:GLU:H	1:A:8:GLU:HB2	10	0.08
(1,2)	1:A:5:SER:O	1:A:18:THR:H	10	0.08
(1,183)	1:A:6:ILE:HG21	1:A:7:SER:H	1	0.08
(1,183)	1:A:6:ILE:HG22	1:A:7:SER:H	1	0.08
(1,183)	1:A:6:ILE:HG23	1:A:7:SER:H	1	0.08
(1,1531)	1:A:84:LEU:HB2	1:A:85:GLU:H	5	0.08
(1,1495)	1:A:82:PHE:H	1:A:82:PHE:HZ	1	0.08
(1,1027)	1:A:53:SER:H	1:A:64:ASP:HB3	10	0.08
(1,627)	1:A:35:ASP:H	1:A:43:ASN:HD22	4	0.07
(1,601)	1:A:34:VAL:HG11	1:A:35:ASP:H	5	0.07
(1,601)	1:A:34:VAL:HG12	1:A:35:ASP:H	5	0.07
(1,601)	1:A:34:VAL:HG13	1:A:35:ASP:H	5	0.07
(1,501)	1:A:29:ASP:HB3	1:A:56:HIS:H	1	0.07
(1,469)	1:A:27:THR:HG21	1:A:28:SER:H	8	0.07
(1,469)	1:A:27:THR:HG22	1:A:28:SER:H	8	0.07
(1,469)	1:A:27:THR:HG23	1:A:28:SER:H	8	0.07
(1,469)	1:A:27:THR:HG21	1:A:28:SER:H	9	0.07
(1,469)	1:A:27:THR:HG22	1:A:28:SER:H	9	0.07
(1,469)	1:A:27:THR:HG23	1:A:28:SER:H	9	0.07
(1,461)	1:A:26:MET:HB2	1:A:27:THR:H	9	0.07
(1,461)	1:A:26:MET:HB3	1:A:27:THR:H	9	0.07
(1,26)	1:A:48:VAL:O	1:A:51:VAL:H	3	0.07
(1,251)	1:A:13:ASN:HB2	1:A:65:LYS:H	1	0.07
(1,231)	1:A:11:ASN:H	1:A:11:ASN:HB2	8	0.07
(1,231)	1:A:11:ASN:H	1:A:11:ASN:HB2	10	0.07

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,217)	1:A:9:THR:HB	1:A:11:ASN:H	5	0.07
(1,210)	1:A:8:GLU:HB3	1:A:9:THR:H	5	0.07
(1,205)	1:A:8:GLU:H	1:A:8:GLU:HB3	3	0.07
(1,197)	1:A:7:SER:HA	1:A:8:GLU:H	4	0.07
(1,1508)	1:A:83:GLU:H	1:A:84:LEU:H	5	0.07
(1,1478)	1:A:81:VAL:H	1:A:81:VAL:HG21	1	0.07
(1,1478)	1:A:81:VAL:H	1:A:81:VAL:HG22	1	0.07
(1,1478)	1:A:81:VAL:H	1:A:81:VAL:HG23	1	0.07
(1,1116)	1:A:57:VAL:HG21	1:A:58:MET:H	2	0.07
(1,1116)	1:A:57:VAL:HG22	1:A:58:MET:H	2	0.07
(1,1116)	1:A:57:VAL:HG23	1:A:58:MET:H	2	0.07
(1,960)	1:A:49:GLU:H	1:A:49:GLU:HG2	1	0.06
(1,960)	1:A:49:GLU:H	1:A:49:GLU:HG3	1	0.06
(1,668)	1:A:38:GLN:HG2	1:A:43:ASN:HD22	7	0.06
(1,668)	1:A:38:GLN:HG3	1:A:43:ASN:HD22	7	0.06
(1,601)	1:A:34:VAL:HG11	1:A:35:ASP:H	3	0.06
(1,601)	1:A:34:VAL:HG12	1:A:35:ASP:H	3	0.06
(1,601)	1:A:34:VAL:HG13	1:A:35:ASP:H	3	0.06
(1,589)	1:A:34:VAL:H	1:A:34:VAL:HB	2	0.06
(1,46)	1:A:63:VAL:O	1:A:15:MET:H	1	0.06
(1,290)	1:A:15:MET:HG3	1:A:16:LYS:H	8	0.06
(1,242)	1:A:13:ASN:H	1:A:14:THR:H	4	0.06
(1,242)	1:A:13:ASN:H	1:A:14:THR:H	8	0.06
(1,238)	1:A:12:HIS:HD2	1:A:71:TRP:HE1	8	0.06
(1,210)	1:A:8:GLU:HB3	1:A:9:THR:H	4	0.06
(1,1495)	1:A:82:PHE:H	1:A:82:PHE:HZ	2	0.06
(1,1495)	1:A:82:PHE:H	1:A:82:PHE:HZ	4	0.06
(1,1495)	1:A:82:PHE:H	1:A:82:PHE:HZ	6	0.06
(1,1495)	1:A:82:PHE:H	1:A:82:PHE:HZ	9	0.06
(1,1495)	1:A:82:PHE:H	1:A:82:PHE:HZ	10	0.06
(1,1478)	1:A:81:VAL:H	1:A:81:VAL:HG21	6	0.06
(1,1478)	1:A:81:VAL:H	1:A:81:VAL:HG22	6	0.06
(1,1478)	1:A:81:VAL:H	1:A:81:VAL:HG23	6	0.06
(1,1478)	1:A:81:VAL:H	1:A:81:VAL:HG21	10	0.06
(1,1478)	1:A:81:VAL:H	1:A:81:VAL:HG22	10	0.06
(1,1478)	1:A:81:VAL:H	1:A:81:VAL:HG23	10	0.06
(1,14)	1:A:31:TYR:O	1:A:54:ILE:H	5	0.06
(1,1027)	1:A:53:SER:H	1:A:64:ASP:HB3	8	0.06
(1,8)	1:A:17:ILE:O	1:A:61:ILE:H	1	0.05
(1,79)	1:A:3:ILE:H	1:A:3:ILE:HB	1	0.05
(1,701)	1:A:39:PRO:HD3	1:A:42:ILE:HG12	2	0.05
(1,669)	1:A:38:GLN:HE21	1:A:42:ILE:HG21	4	0.05

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,669)	1:A:38:GLN:HE21	1:A:42:ILE:HG22	4	0.05
(1,669)	1:A:38:GLN:HE21	1:A:42:ILE:HG23	4	0.05
(1,638)	1:A:37:SER:H	1:A:38:GLN:H	7	0.05
(1,625)	1:A:35:ASP:H	1:A:38:GLN:HE21	3	0.05
(1,589)	1:A:34:VAL:H	1:A:34:VAL:HB	5	0.05
(1,589)	1:A:34:VAL:H	1:A:34:VAL:HB	9	0.05
(1,48)	1:A:64:ASP:O	1:A:53:SER:H	4	0.05
(1,48)	1:A:64:ASP:O	1:A:53:SER:H	8	0.05
(1,48)	1:A:64:ASP:O	1:A:53:SER:H	10	0.05
(1,461)	1:A:26:MET:HB2	1:A:27:THR:H	1	0.05
(1,461)	1:A:26:MET:HB3	1:A:27:THR:H	1	0.05
(1,46)	1:A:63:VAL:O	1:A:15:MET:H	4	0.05
(1,447)	1:A:24:GLU:HA	1:A:25:GLY:H	4	0.05
(1,438)	1:A:23:ARG:HB2	1:A:24:GLU:H	5	0.05
(1,409)	1:A:20:SER:H	1:A:21:GLU:HA	6	0.05
(1,40)	1:A:60:PHE:O	1:A:57:VAL:H	5	0.05
(1,349)	1:A:17:ILE:HG12	1:A:61:ILE:HB	10	0.05
(1,348)	1:A:17:ILE:HG13	1:A:18:THR:H	5	0.05
(1,348)	1:A:17:ILE:HG13	1:A:18:THR:H	8	0.05
(1,24)	1:A:45:ILE:O	1:A:48:VAL:H	4	0.05
(1,231)	1:A:11:ASN:H	1:A:11:ASN:HB2	5	0.05
(1,215)	1:A:9:THR:H	1:A:10:PRO:HD2	10	0.05
(1,205)	1:A:8:GLU:H	1:A:8:GLU:HB3	1	0.05
(1,2)	1:A:5:SER:O	1:A:18:THR:H	6	0.05
(1,1539)	1:A:85:GLU:HB2	1:A:86:HIS:H	2	0.05
(1,1539)	1:A:85:GLU:HB3	1:A:86:HIS:H	2	0.05
(1,1526)	1:A:84:LEU:HA	1:A:85:GLU:H	3	0.05
(1,1339)	1:A:73:THR:H	1:A:73:THR:HG21	1	0.05
(1,1339)	1:A:73:THR:H	1:A:73:THR:HG22	1	0.05
(1,1339)	1:A:73:THR:H	1:A:73:THR:HG23	1	0.05
(1,1130)	1:A:58:MET:HB2	1:A:59:ASP:H	10	0.05
(1,1130)	1:A:58:MET:HB3	1:A:59:ASP:H	10	0.05
(1,855)	1:A:45:ILE:HG21	1:A:45:ILE:HD11	5	0.04
(1,855)	1:A:45:ILE:HG21	1:A:45:ILE:HD12	5	0.04
(1,855)	1:A:45:ILE:HG21	1:A:45:ILE:HD13	5	0.04
(1,855)	1:A:45:ILE:HG22	1:A:45:ILE:HD11	5	0.04
(1,855)	1:A:45:ILE:HG22	1:A:45:ILE:HD12	5	0.04
(1,855)	1:A:45:ILE:HG22	1:A:45:ILE:HD13	5	0.04
(1,855)	1:A:45:ILE:HG23	1:A:45:ILE:HD11	5	0.04
(1,855)	1:A:45:ILE:HG23	1:A:45:ILE:HD12	5	0.04
(1,855)	1:A:45:ILE:HG23	1:A:45:ILE:HD13	5	0.04
(1,8)	1:A:17:ILE:O	1:A:61:ILE:H	6	0.04

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,71)	1:A:2:LYS:HB2	1:A:3:ILE:H	4	0.04
(1,71)	1:A:2:LYS:HB3	1:A:3:ILE:H	4	0.04
(1,71)	1:A:2:LYS:HB2	1:A:3:ILE:H	6	0.04
(1,71)	1:A:2:LYS:HB3	1:A:3:ILE:H	6	0.04
(1,701)	1:A:39:PRO:HD3	1:A:42:ILE:HG12	8	0.04
(1,669)	1:A:38:GLN:HE21	1:A:42:ILE:HG21	3	0.04
(1,669)	1:A:38:GLN:HE21	1:A:42:ILE:HG22	3	0.04
(1,669)	1:A:38:GLN:HE21	1:A:42:ILE:HG23	3	0.04
(1,648)	1:A:38:GLN:H	1:A:39:PRO:HD2	1	0.04
(1,648)	1:A:38:GLN:H	1:A:39:PRO:HD2	8	0.04
(1,627)	1:A:35:ASP:H	1:A:43:ASN:HD22	2	0.04
(1,501)	1:A:29:ASP:HB3	1:A:56:HIS:H	4	0.04
(1,50)	1:A:71:TRP:O	1:A:75:LEU:H	10	0.04
(1,490)	1:A:29:ASP:H	1:A:56:HIS:HB3	1	0.04
(1,46)	1:A:63:VAL:O	1:A:15:MET:H	3	0.04
(1,46)	1:A:63:VAL:O	1:A:15:MET:H	6	0.04
(1,46)	1:A:63:VAL:O	1:A:15:MET:H	8	0.04
(1,42)	1:A:61:ILE:O	1:A:17:ILE:H	6	0.04
(1,42)	1:A:61:ILE:O	1:A:17:ILE:H	10	0.04
(1,289)	1:A:15:MET:HG2	1:A:16:LYS:H	6	0.04
(1,28)	1:A:50:GLY:O	1:A:66:GLU:H	3	0.04
(1,28)	1:A:50:GLY:O	1:A:66:GLU:H	6	0.04
(1,26)	1:A:48:VAL:O	1:A:51:VAL:H	9	0.04
(1,245)	1:A:13:ASN:HA	1:A:71:TRP:HE1	6	0.04
(1,235)	1:A:12:HIS:HA	1:A:14:THR:H	4	0.04
(1,215)	1:A:9:THR:H	1:A:10:PRO:HD2	5	0.04
(1,215)	1:A:9:THR:H	1:A:10:PRO:HD2	8	0.04
(1,210)	1:A:8:GLU:HB3	1:A:9:THR:H	9	0.04
(1,209)	1:A:8:GLU:HB2	1:A:9:THR:H	3	0.04
(1,197)	1:A:7:SER:HA	1:A:8:GLU:H	5	0.04
(1,1512)	1:A:83:GLU:HA	1:A:84:LEU:H	8	0.04
(1,1512)	1:A:83:GLU:HA	1:A:84:LEU:H	10	0.04
(1,146)	1:A:4:ILE:HG13	1:A:5:SER:H	2	0.04
(1,146)	1:A:4:ILE:HG13	1:A:5:SER:H	7	0.04
(1,14)	1:A:31:TYR:O	1:A:54:ILE:H	2	0.04
(1,855)	1:A:45:ILE:HG21	1:A:45:ILE:HD11	8	0.03
(1,855)	1:A:45:ILE:HG21	1:A:45:ILE:HD12	8	0.03
(1,855)	1:A:45:ILE:HG21	1:A:45:ILE:HD13	8	0.03
(1,855)	1:A:45:ILE:HG22	1:A:45:ILE:HD11	8	0.03
(1,855)	1:A:45:ILE:HG22	1:A:45:ILE:HD12	8	0.03
(1,855)	1:A:45:ILE:HG22	1:A:45:ILE:HD13	8	0.03
(1,855)	1:A:45:ILE:HG23	1:A:45:ILE:HD11	8	0.03

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,855)	1:A:45:ILE:HG23	1:A:45:ILE:HD12	8	0.03
(1,855)	1:A:45:ILE:HG23	1:A:45:ILE:HD13	8	0.03
(1,8)	1:A:17:ILE:O	1:A:61:ILE:H	10	0.03
(1,733)	1:A:41:PHE:HB2	1:A:81:VAL:HG11	4	0.03
(1,733)	1:A:41:PHE:HB2	1:A:81:VAL:HG12	4	0.03
(1,733)	1:A:41:PHE:HB2	1:A:81:VAL:HG13	4	0.03
(1,733)	1:A:41:PHE:HB3	1:A:81:VAL:HG11	4	0.03
(1,733)	1:A:41:PHE:HB3	1:A:81:VAL:HG12	4	0.03
(1,733)	1:A:41:PHE:HB3	1:A:81:VAL:HG13	4	0.03
(1,646)	1:A:38:GLN:H	1:A:38:GLN:HG2	2	0.03
(1,646)	1:A:38:GLN:H	1:A:38:GLN:HG3	2	0.03
(1,634)	1:A:36:ASP:HB2	1:A:37:SER:H	4	0.03
(1,634)	1:A:36:ASP:HB3	1:A:37:SER:H	4	0.03
(1,540)	1:A:31:TYR:HB3	1:A:54:ILE:H	8	0.03
(1,501)	1:A:29:ASP:HB3	1:A:56:HIS:H	5	0.03
(1,501)	1:A:29:ASP:HB3	1:A:56:HIS:H	6	0.03
(1,48)	1:A:64:ASP:O	1:A:53:SER:H	1	0.03
(1,46)	1:A:63:VAL:O	1:A:15:MET:H	2	0.03
(1,448)	1:A:24:GLU:HB2	1:A:25:GLY:H	1	0.03
(1,448)	1:A:24:GLU:HB3	1:A:25:GLY:H	1	0.03
(1,422)	1:A:22:SER:H	1:A:22:SER:HA	2	0.03
(1,28)	1:A:50:GLY:O	1:A:66:GLU:H	7	0.03
(1,251)	1:A:13:ASN:HB2	1:A:65:LYS:H	9	0.03
(1,251)	1:A:13:ASN:HB2	1:A:65:LYS:H	10	0.03
(1,24)	1:A:45:ILE:O	1:A:48:VAL:H	8	0.03
(1,232)	1:A:11:ASN:H	1:A:11:ASN:HB3	6	0.03
(1,214)	1:A:9:THR:H	1:A:10:PRO:HA	1	0.03
(1,210)	1:A:8:GLU:HB3	1:A:9:THR:H	7	0.03
(1,209)	1:A:8:GLU:HB2	1:A:9:THR:H	9	0.03
(1,209)	1:A:8:GLU:HB2	1:A:9:THR:H	10	0.03
(1,206)	1:A:8:GLU:H	1:A:8:GLU:HG2	8	0.03
(1,206)	1:A:8:GLU:H	1:A:8:GLU:HG3	8	0.03
(1,2)	1:A:5:SER:O	1:A:18:THR:H	2	0.03
(1,165)	1:A:5:SER:H	1:A:18:THR:HA	4	0.03
(1,1531)	1:A:84:LEU:HB2	1:A:85:GLU:H	3	0.03
(1,1508)	1:A:83:GLU:H	1:A:84:LEU:H	7	0.03
(1,1495)	1:A:82:PHE:H	1:A:82:PHE:HZ	3	0.03
(1,1495)	1:A:82:PHE:H	1:A:82:PHE:HZ	7	0.03
(1,140)	1:A:4:ILE:HB	1:A:5:SER:H	10	0.03
(1,1027)	1:A:53:SER:H	1:A:64:ASP:HB3	4	0.03
(1,1027)	1:A:53:SER:H	1:A:64:ASP:HB3	5	0.03
(1,10)	1:A:18:THR:O	1:A:4:ILE:H	10	0.03

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,733)	1:A:41:PHE:HB2	1:A:81:VAL:HG11	3	0.02
(1,733)	1:A:41:PHE:HB2	1:A:81:VAL:HG12	3	0.02
(1,733)	1:A:41:PHE:HB2	1:A:81:VAL:HG13	3	0.02
(1,733)	1:A:41:PHE:HB3	1:A:81:VAL:HG11	3	0.02
(1,733)	1:A:41:PHE:HB3	1:A:81:VAL:HG12	3	0.02
(1,733)	1:A:41:PHE:HB3	1:A:81:VAL:HG13	3	0.02
(1,716)	1:A:40:ALA:HA	1:A:44:ASP:H	3	0.02
(1,701)	1:A:39:PRO:HD3	1:A:42:ILE:HG12	9	0.02
(1,566)	1:A:32:THR:H	1:A:33:LYS:H	9	0.02
(1,504)	1:A:30:THR:H	1:A:30:THR:HB	8	0.02
(1,501)	1:A:29:ASP:HB3	1:A:56:HIS:H	7	0.02
(1,50)	1:A:71:TRP:O	1:A:75:LEU:H	2	0.02
(1,494)	1:A:29:ASP:HA	1:A:56:HIS:H	3	0.02
(1,48)	1:A:64:ASP:O	1:A:53:SER:H	5	0.02
(1,47)	1:A:64:ASP:O	1:A:53:SER:N	2	0.02
(1,46)	1:A:63:VAL:O	1:A:15:MET:H	7	0.02
(1,44)	1:A:62:SER:O	1:A:55:PHE:H	10	0.02
(1,422)	1:A:22:SER:H	1:A:22:SER:HA	1	0.02
(1,422)	1:A:22:SER:H	1:A:22:SER:HA	3	0.02
(1,422)	1:A:22:SER:H	1:A:22:SER:HA	7	0.02
(1,422)	1:A:22:SER:H	1:A:22:SER:HA	8	0.02
(1,422)	1:A:22:SER:H	1:A:22:SER:HA	9	0.02
(1,40)	1:A:60:PHE:O	1:A:57:VAL:H	1	0.02
(1,40)	1:A:60:PHE:O	1:A:57:VAL:H	10	0.02
(1,38)	1:A:57:VAL:O	1:A:60:PHE:H	7	0.02
(1,349)	1:A:17:ILE:HG12	1:A:61:ILE:HB	3	0.02
(1,349)	1:A:17:ILE:HG12	1:A:61:ILE:HB	5	0.02
(1,349)	1:A:17:ILE:HG12	1:A:61:ILE:HB	8	0.02
(1,348)	1:A:17:ILE:HG13	1:A:18:THR:H	10	0.02
(1,311)	1:A:16:LYS:HA	1:A:62:SER:H	7	0.02
(1,28)	1:A:50:GLY:O	1:A:66:GLU:H	9	0.02
(1,26)	1:A:48:VAL:O	1:A:51:VAL:H	5	0.02
(1,26)	1:A:48:VAL:O	1:A:51:VAL:H	8	0.02
(1,254)	1:A:13:ASN:HD22	1:A:67:ASN:HA	9	0.02
(1,242)	1:A:13:ASN:H	1:A:14:THR:H	3	0.02
(1,238)	1:A:12:HIS:HD2	1:A:71:TRP:HE1	9	0.02
(1,226)	1:A:10:PRO:HG3	1:A:11:ASN:H	3	0.02
(1,22)	1:A:43:ASN:O	1:A:47:LYS:H	9	0.02
(1,216)	1:A:9:THR:H	1:A:10:PRO:HD3	5	0.02
(1,214)	1:A:9:THR:H	1:A:10:PRO:HA	9	0.02
(1,209)	1:A:8:GLU:HB2	1:A:9:THR:H	1	0.02
(1,166)	1:A:5:SER:H	1:A:18:THR:HB	10	0.02

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,1536)	1:A:85:GLU:H	1:A:85:GLU:HG2	3	0.02
(1,1536)	1:A:85:GLU:H	1:A:85:GLU:HG3	3	0.02
(1,1512)	1:A:83:GLU:HA	1:A:84:LEU:H	2	0.02
(1,1508)	1:A:83:GLU:H	1:A:84:LEU:H	2	0.02
(1,1495)	1:A:82:PHE:H	1:A:82:PHE:HZ	5	0.02
(1,1495)	1:A:82:PHE:H	1:A:82:PHE:HZ	8	0.02
(1,1478)	1:A:81:VAL:H	1:A:81:VAL:HG21	4	0.02
(1,1478)	1:A:81:VAL:H	1:A:81:VAL:HG22	4	0.02
(1,1478)	1:A:81:VAL:H	1:A:81:VAL:HG23	4	0.02
(1,14)	1:A:31:TYR:O	1:A:54:ILE:H	7	0.02
(1,1349)	1:A:73:THR:HG21	1:A:74:VAL:H	4	0.02
(1,1349)	1:A:73:THR:HG22	1:A:74:VAL:H	4	0.02
(1,1349)	1:A:73:THR:HG23	1:A:74:VAL:H	4	0.02
(1,1349)	1:A:73:THR:HG21	1:A:74:VAL:H	5	0.02
(1,1349)	1:A:73:THR:HG22	1:A:74:VAL:H	5	0.02
(1,1349)	1:A:73:THR:HG23	1:A:74:VAL:H	5	0.02
(1,1341)	1:A:73:THR:H	1:A:74:VAL:HA	6	0.02
(1,13)	1:A:31:TYR:O	1:A:54:ILE:N	2	0.02
(1,1295)	1:A:70:ASN:HB2	1:A:72:GLU:H	3	0.02
(1,1283)	1:A:69:ALA:HB1	1:A:70:ASN:H	6	0.02
(1,1283)	1:A:69:ALA:HB2	1:A:70:ASN:H	6	0.02
(1,1283)	1:A:69:ALA:HB3	1:A:70:ASN:H	6	0.02
(1,1223)	1:A:65:LYS:HB2	1:A:66:GLU:H	6	0.02
(1,1130)	1:A:58:MET:HB2	1:A:59:ASP:H	9	0.02
(1,1130)	1:A:58:MET:HB3	1:A:59:ASP:H	9	0.02
(1,1114)	1:A:57:VAL:HB	1:A:60:PHE:HZ	6	0.02
(1,92)	1:A:3:ILE:HA	1:A:4:ILE:HB	10	0.01
(1,855)	1:A:45:ILE:HG21	1:A:45:ILE:HD11	1	0.01
(1,855)	1:A:45:ILE:HG21	1:A:45:ILE:HD12	1	0.01
(1,855)	1:A:45:ILE:HG21	1:A:45:ILE:HD13	1	0.01
(1,855)	1:A:45:ILE:HG22	1:A:45:ILE:HD11	1	0.01
(1,855)	1:A:45:ILE:HG22	1:A:45:ILE:HD12	1	0.01
(1,855)	1:A:45:ILE:HG22	1:A:45:ILE:HD13	1	0.01
(1,855)	1:A:45:ILE:HG23	1:A:45:ILE:HD11	1	0.01
(1,855)	1:A:45:ILE:HG23	1:A:45:ILE:HD12	1	0.01
(1,855)	1:A:45:ILE:HG23	1:A:45:ILE:HD13	1	0.01
(1,855)	1:A:45:ILE:HG21	1:A:45:ILE:HD11	10	0.01
(1,855)	1:A:45:ILE:HG21	1:A:45:ILE:HD12	10	0.01
(1,855)	1:A:45:ILE:HG21	1:A:45:ILE:HD13	10	0.01
(1,855)	1:A:45:ILE:HG22	1:A:45:ILE:HD11	10	0.01
(1,855)	1:A:45:ILE:HG22	1:A:45:ILE:HD12	10	0.01
(1,855)	1:A:45:ILE:HG22	1:A:45:ILE:HD13	10	0.01

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,855)	1:A:45:ILE:HG23	1:A:45:ILE:HD11	10	0.01
(1,855)	1:A:45:ILE:HG23	1:A:45:ILE:HD12	10	0.01
(1,855)	1:A:45:ILE:HG23	1:A:45:ILE:HD13	10	0.01
(1,8)	1:A:17:ILE:O	1:A:61:ILE:H	8	0.01
(1,733)	1:A:41:PHE:HB2	1:A:81:VAL:HG11	1	0.01
(1,733)	1:A:41:PHE:HB2	1:A:81:VAL:HG12	1	0.01
(1,733)	1:A:41:PHE:HB2	1:A:81:VAL:HG13	1	0.01
(1,733)	1:A:41:PHE:HB3	1:A:81:VAL:HG11	1	0.01
(1,733)	1:A:41:PHE:HB3	1:A:81:VAL:HG12	1	0.01
(1,733)	1:A:41:PHE:HB3	1:A:81:VAL:HG13	1	0.01
(1,701)	1:A:39:PRO:HD3	1:A:42:ILE:HG12	1	0.01
(1,701)	1:A:39:PRO:HD3	1:A:42:ILE:HG12	4	0.01
(1,701)	1:A:39:PRO:HD3	1:A:42:ILE:HG12	5	0.01
(1,701)	1:A:39:PRO:HD3	1:A:42:ILE:HG12	7	0.01
(1,701)	1:A:39:PRO:HD3	1:A:42:ILE:HG12	10	0.01
(1,67)	1:A:2:LYS:H	1:A:20:SER:H	10	0.01
(1,665)	1:A:38:GLN:HB3	1:A:43:ASN:HD22	6	0.01
(1,654)	1:A:38:GLN:HB3	1:A:38:GLN:HE22	6	0.01
(1,649)	1:A:38:GLN:H	1:A:39:PRO:HD3	2	0.01
(1,648)	1:A:38:GLN:H	1:A:39:PRO:HD2	6	0.01
(1,6)	1:A:15:MET:O	1:A:63:VAL:H	9	0.01
(1,589)	1:A:34:VAL:H	1:A:34:VAL:HB	6	0.01
(1,584)	1:A:33:LYS:HA	1:A:34:VAL:H	3	0.01
(1,540)	1:A:31:TYR:HB3	1:A:54:ILE:H	3	0.01
(1,540)	1:A:31:TYR:HB3	1:A:54:ILE:H	6	0.01
(1,501)	1:A:29:ASP:HB3	1:A:56:HIS:H	3	0.01
(1,50)	1:A:71:TRP:O	1:A:75:LEU:H	5	0.01
(1,47)	1:A:64:ASP:O	1:A:53:SER:N	8	0.01
(1,46)	1:A:63:VAL:O	1:A:15:MET:H	10	0.01
(1,448)	1:A:24:GLU:HB2	1:A:25:GLY:H	9	0.01
(1,448)	1:A:24:GLU:HB3	1:A:25:GLY:H	9	0.01
(1,422)	1:A:22:SER:H	1:A:22:SER:HA	4	0.01
(1,422)	1:A:22:SER:H	1:A:22:SER:HA	5	0.01
(1,422)	1:A:22:SER:H	1:A:22:SER:HA	10	0.01
(1,40)	1:A:60:PHE:O	1:A:57:VAL:H	6	0.01
(1,40)	1:A:60:PHE:O	1:A:57:VAL:H	7	0.01
(1,348)	1:A:17:ILE:HG13	1:A:18:THR:H	1	0.01
(1,30)	1:A:53:SER:O	1:A:64:ASP:H	4	0.01
(1,29)	1:A:53:SER:O	1:A:64:ASP:N	5	0.01
(1,24)	1:A:45:ILE:O	1:A:48:VAL:H	2	0.01
(1,238)	1:A:12:HIS:HD2	1:A:71:TRP:HE1	6	0.01
(1,226)	1:A:10:PRO:HG3	1:A:11:ASN:H	7	0.01

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,216)	1:A:9:THR:H	1:A:10:PRO:HD3	2	0.01
(1,214)	1:A:9:THR:H	1:A:10:PRO:HA	8	0.01
(1,210)	1:A:8:GLU:HB3	1:A:9:THR:H	8	0.01
(1,20)	1:A:42:ILE:O	1:A:46:LEU:H	5	0.01
(1,2)	1:A:5:SER:O	1:A:18:THR:H	1	0.01
(1,165)	1:A:5:SER:H	1:A:18:THR:HA	5	0.01
(1,163)	1:A:5:SER:H	1:A:17:ILE:HA	4	0.01
(1,163)	1:A:5:SER:H	1:A:17:ILE:HA	6	0.01
(1,1526)	1:A:84:LEU:HA	1:A:85:GLU:H	8	0.01
(1,1522)	1:A:84:LEU:H	1:A:85:GLU:H	1	0.01
(1,1522)	1:A:84:LEU:H	1:A:85:GLU:H	5	0.01
(1,150)	1:A:4:ILE:HG13	1:A:20:SER:H	3	0.01
(1,1478)	1:A:81:VAL:H	1:A:81:VAL:HG21	7	0.01
(1,1478)	1:A:81:VAL:H	1:A:81:VAL:HG22	7	0.01
(1,1478)	1:A:81:VAL:H	1:A:81:VAL:HG23	7	0.01
(1,1341)	1:A:73:THR:H	1:A:74:VAL:HA	1	0.01
(1,1341)	1:A:73:THR:H	1:A:74:VAL:HA	7	0.01
(1,1260)	1:A:66:GLU:HB2	1:A:67:ASN:H	8	0.01
(1,1260)	1:A:66:GLU:HB3	1:A:67:ASN:H	8	0.01
(1,1214)	1:A:65:LYS:H	1:A:71:TRP:HH2	8	0.01

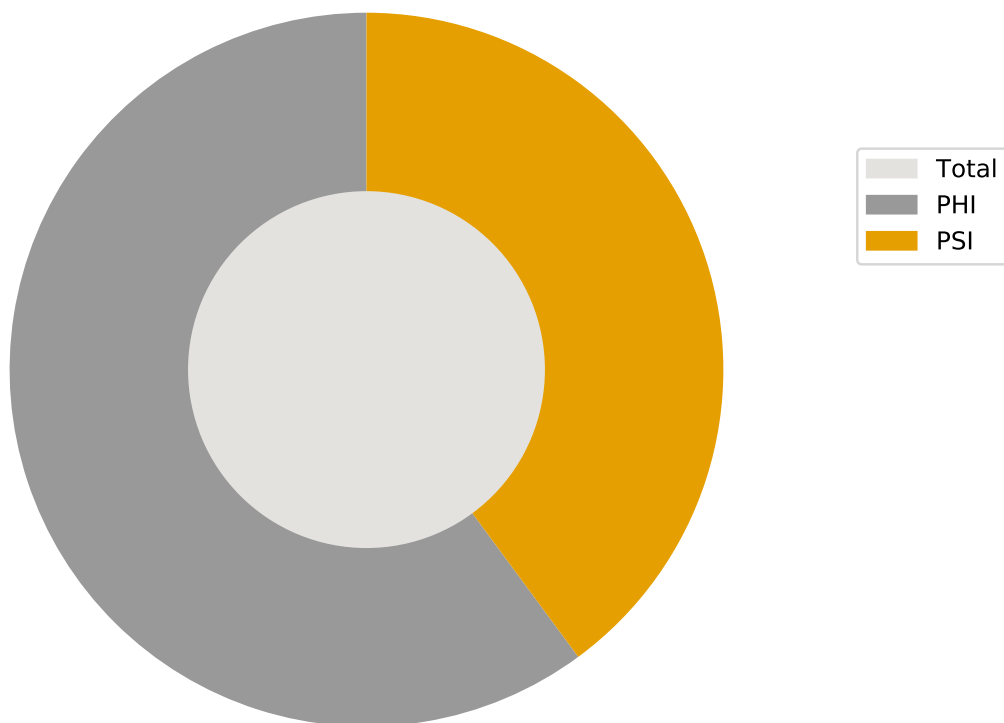
## 9 Dihedral angle restraints analysis

### 9.1 Dihedral angle restraints summary

Angle name	Count	%
PHI	107	60.1
PSI	71	39.9
Total	178	100.0

#### 9.1.1 Pie chart : Dihedral angle restraints

There are 0 unmapped restraints



### 9.2 Dihedral angle violations

The following table provides the summary of violated restraints. Restraints that are violated at least in one model are counted as violated.

Angle name	Count	% <sup>1</sup>	% <sup>2</sup>
PHI	31	29.0	47.7
PSI	34	47.9	52.3

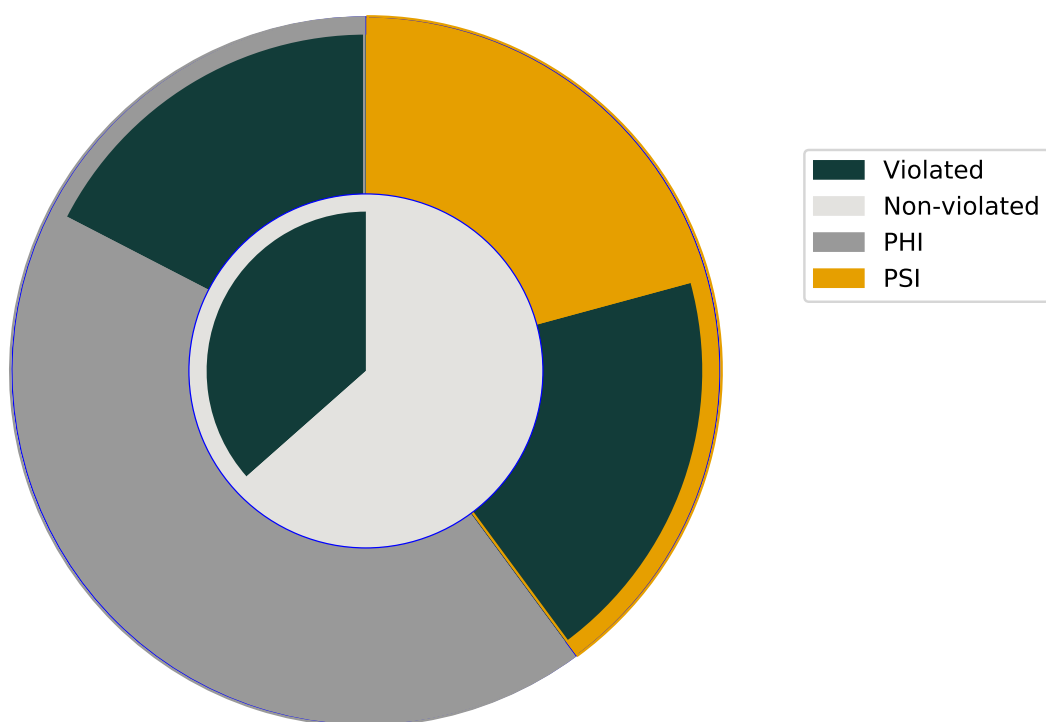
*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Angle name	Count	% <sup>1</sup>	% <sup>2</sup>
Total	65	36.5	100.0

<sup>1</sup>percentage of violated restraints in that particular angle type, <sup>2</sup>percentage of violation in total violations.

### 9.2.1 Pie chart : Dihedral angle violations



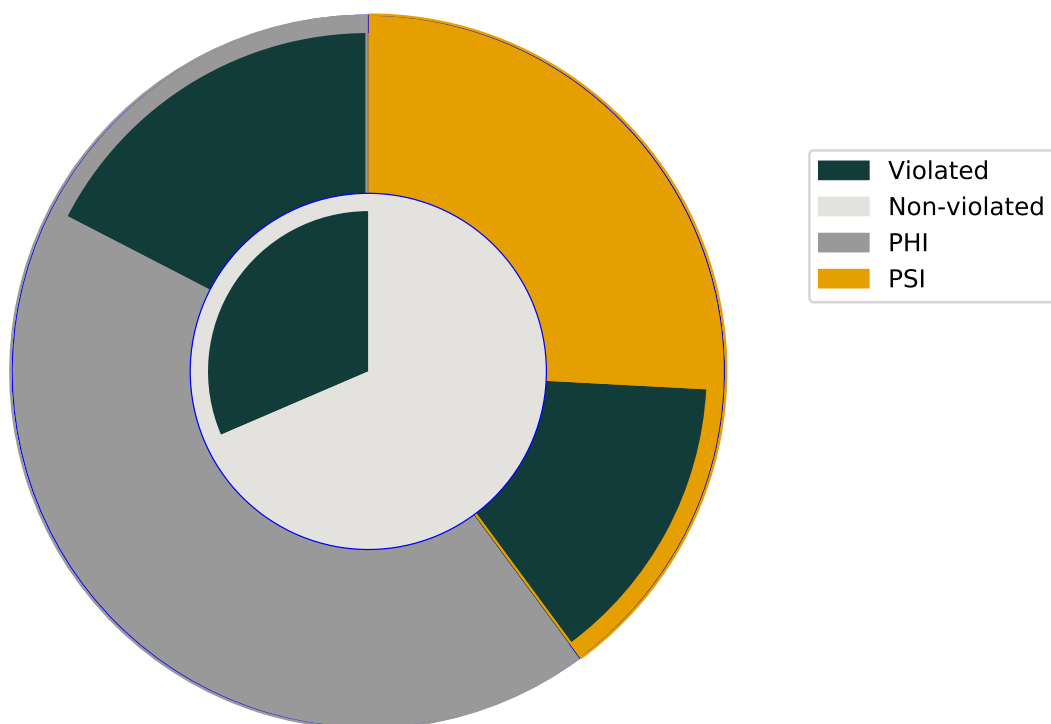
## 9.3 Consistent dihedral angle violations

The following table provides the summary of consistently violated restraints. Restraints that are violated in all models are counted as consistently violated.

Angle name	Count	% <sup>1</sup>	% <sup>2</sup>
PHI	31	29.0	55.4
PSI	25	35.2	44.6
Total	56	31.5	100.0

<sup>1</sup>percentage of violated restraints in that particular angle type, <sup>2</sup>percentage of violation in total violations.

### 9.3.1 Pie chart : Consistent dihedral angle violations



## 9.4 Residual dihedral angle violations

Violation are counted in different bin sizes and listed below

Range ( ° )	Avg. No. of violated restraints per model	Max violation ( ° )
0.0-5.0	7.5	4.89
5.0-10.0	2.3	9.84
10.0-20.0	5.5	19.78
20.0-40.0	7.4	39.97
40.0-80.0	22.7	79.42
80.0<	16.3	144.85

## 9.5 Dihedral angle violations in the ensemble

The restraints are grouped based on the number of violated models and listed here.

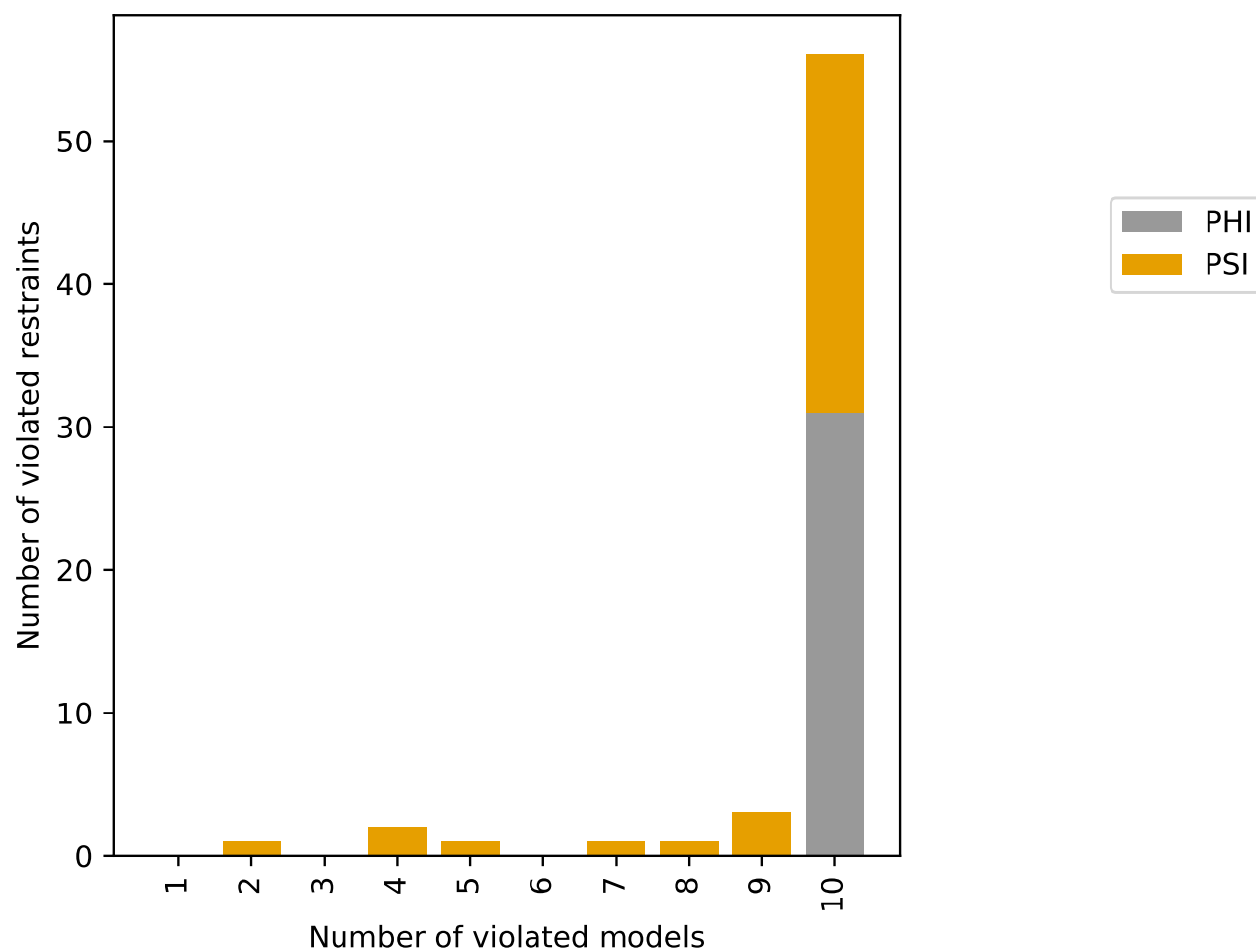
No. of violated restraints			No. of violated models
PHI	PSI	Total	
0	0	0	1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

No. of violated restraints			No. of violated models
PHI	PSI	Total	
0	1	1	2
0	0	0	3
0	2	2	4
0	1	1	5
0	0	0	6
0	1	1	7
0	1	1	8
0	3	3	9
31	25	56	10

#### 9.5.1 Bar graph : No. of models vs No. of violations

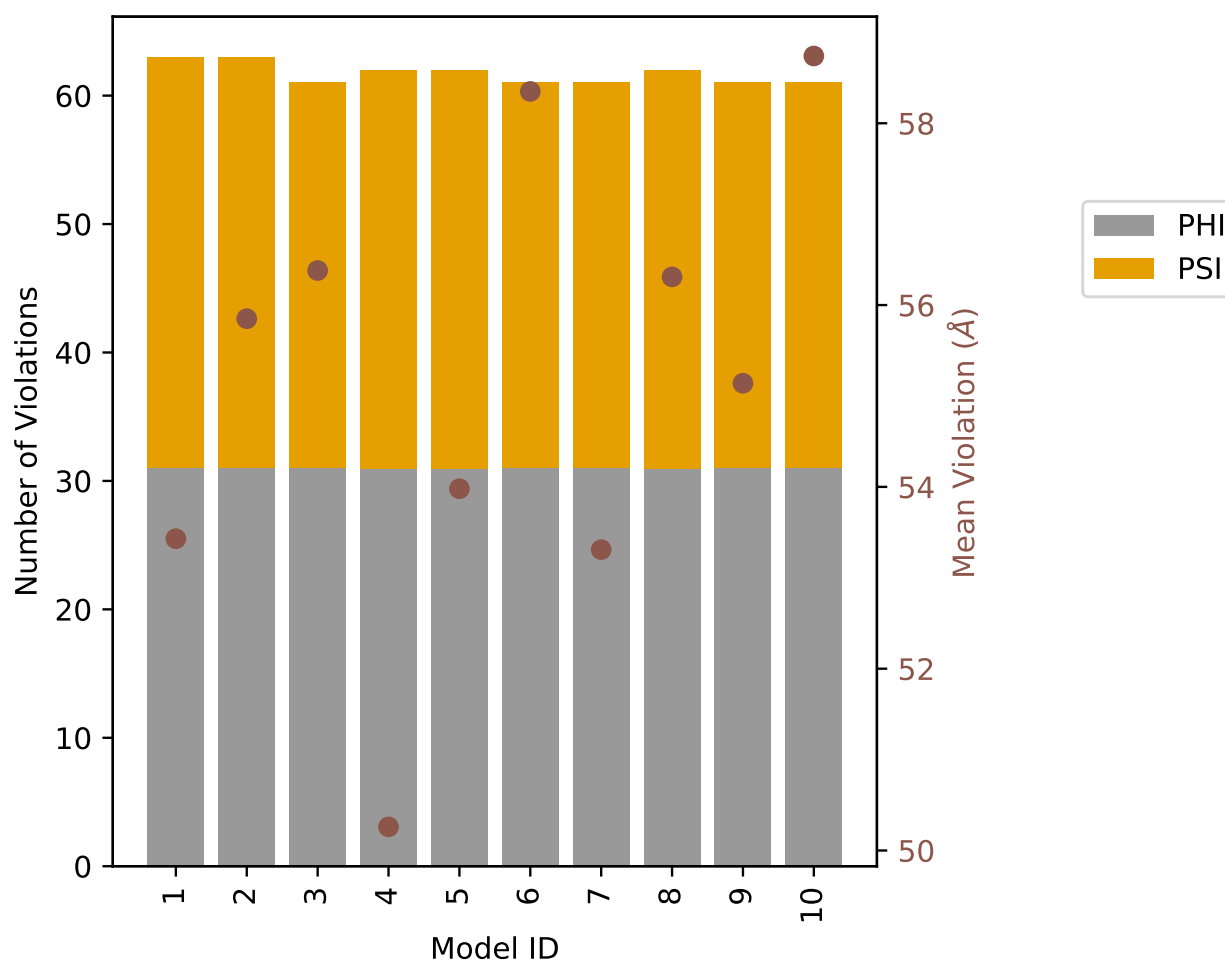


## 9.6 Violations in each model

The following table lists the violation count in each model in the ensemble

Model ID	No. of violations			Mean ( ° )	Max ( ° )
	PHI	PSI	Total		
1	31	32	63	53.43	141.04
2	31	32	63	55.85	122.65
3	31	30	61	56.38	144.85
4	31	31	62	50.26	140.68
5	31	31	62	53.98	133.68
6	31	30	61	58.35	143.17
7	31	30	61	53.31	130.2
8	31	31	62	56.31	144.78
9	31	30	61	55.14	139.75
10	31	30	61	58.74	134.0

### 9.6.1 Bar graph : Violations in each model

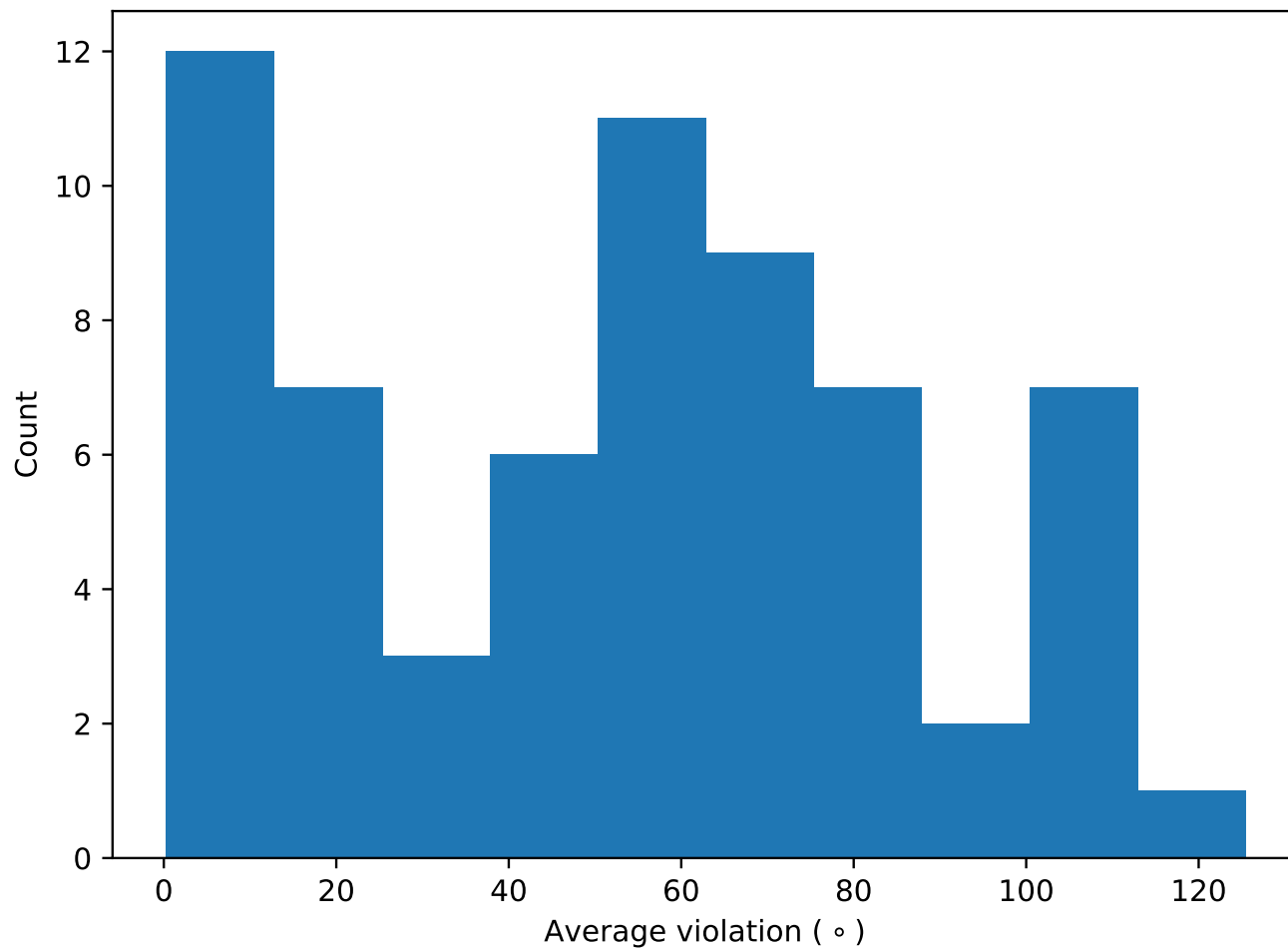




## 9.7 Most violated dihedral angle restraints

### 9.7.1 Histogram : Distribution of mean dihedral angle violations

The following histogram shows the distribution of average violation of each restraint



### 9.7.2 Table: Most violated dihedral angle restraints

The following table lists the average violation of each restraint sorted by number of violated models

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Models	Mean ( ° )	Max ( ° )
(1,98)	1:A:2:LYS:N	1:A:2:LYS:CA	1:A:2:LYS:C	1:A:3:ILE:N	10	108.41	144.85
(1,119)	1:A:38:GLN:N	1:A:38:GLN:CA	1:A:38:GLN:C	1:A:39:PRO:N	10	125.44	144.78
(1,157)	1:A:70:ASN:N	1:A:70:ASN:CA	1:A:70:ASN:C	1:A:71:TRP:N	10	107.37	138.35
(1,151)	1:A:66:GLU:N	1:A:66:GLU:CA	1:A:66:GLU:C	1:A:67:ASN:N	10	80.19	127.19
(1,114)	1:A:22:SER:N	1:A:22:SER:CA	1:A:22:SER:C	1:A:23:ARG:N	9	78.62	126.2
(1,141)	1:A:57:VAL:N	1:A:57:VAL:CA	1:A:57:VAL:C	1:A:58:MET:N	10	100.49	117.14
(1,135)	1:A:54:ILE:N	1:A:54:ILE:CA	1:A:54:ILE:C	1:A:55:PHE:N	10	112.49	116.81
(1,178)	1:A:86:HIS:N	1:A:86:HIS:CA	1:A:86:HIS:C	1:A:87:HIS:N	10	82.59	113.81
(1,102)	1:A:6:ILE:N	1:A:6:ILE:CA	1:A:6:ILE:C	1:A:7:SER:N	10	74.64	105.9
(1,115)	1:A:29:ASP:N	1:A:29:ASP:CA	1:A:29:ASP:C	1:A:30:THR:N	10	74.75	94.24

*Continued on next page...*

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Models	Mean ( ° )	Max ( ° )
(1,100)	1:A:5:SER:N	1:A:5:SER:CA	1:A:5:SER:C	1:A:6:ILE:N	10	71.49	91.65
(1,143)	1:A:60:PHE:N	1:A:60:PHE:CA	1:A:60:PHE:C	1:A:61:ILE:N	10	74.14	80.51
(1,108)	1:A:16:LYS:N	1:A:16:LYS:CA	1:A:16:LYS:C	1:A:17:ILE:N	10	46.47	79.42
(1,117)	1:A:30:THR:N	1:A:30:THR:CA	1:A:30:THR:C	1:A:31:TYR:N	10	58.55	77.5
(1,145)	1:A:61:ILE:N	1:A:61:ILE:CA	1:A:61:ILE:C	1:A:62:SER:N	10	67.74	77.04
(1,104)	1:A:14:THR:N	1:A:14:THR:CA	1:A:14:THR:C	1:A:15:MET:N	10	50.04	75.19
(1,106)	1:A:15:MET:N	1:A:15:MET:CA	1:A:15:MET:C	1:A:16:LYS:N	10	62.24	75.06
(1,149)	1:A:64:ASP:N	1:A:64:ASP:CA	1:A:64:ASP:C	1:A:65:LYS:N	10	61.42	74.85
(1,133)	1:A:51:VAL:N	1:A:51:VAL:CA	1:A:51:VAL:C	1:A:52:LYS:N	7	68.78	74.06
(1,139)	1:A:56:HIS:N	1:A:56:HIS:CA	1:A:56:HIS:C	1:A:57:VAL:N	10	60.57	68.9
(1,112)	1:A:18:THR:N	1:A:18:THR:CA	1:A:18:THR:C	1:A:19:LEU:N	10	50.99	66.5
(1,131)	1:A:48:VAL:N	1:A:48:VAL:CA	1:A:48:VAL:C	1:A:49:GLU:N	10	52.75	61.11
(1,147)	1:A:63:VAL:N	1:A:63:VAL:CA	1:A:63:VAL:C	1:A:64:ASP:N	10	28.1	34.06
(1,110)	1:A:17:ILE:N	1:A:17:ILE:CA	1:A:17:ILE:C	1:A:18:THR:N	10	19.75	28.58
(1,137)	1:A:55:PHE:N	1:A:55:PHE:CA	1:A:55:PHE:C	1:A:56:HIS:N	10	18.25	24.74
(1,129)	1:A:46:LEU:N	1:A:46:LEU:CA	1:A:46:LEU:C	1:A:47:LYS:N	8	1.77	4.89
(1,54)	1:A:53:SER:N	1:A:53:SER:CA	1:A:53:SER:C	1:A:54:ILE:N	2	1.79	3.06
(1,161)	1:A:73:THR:N	1:A:73:THR:CA	1:A:73:THR:C	1:A:74:VAL:N	10	1.48	2.63
(1,163)	1:A:74:VAL:N	1:A:74:VAL:CA	1:A:74:VAL:C	1:A:75:LEU:N	10	1.16	2.27
(1,159)	1:A:72:GLU:N	1:A:72:GLU:CA	1:A:72:GLU:C	1:A:73:THR:N	9	1.17	2.15
(1,174)	1:A:80:ALA:N	1:A:80:ALA:CA	1:A:80:ALA:C	1:A:81:VAL:N	9	1.62	2.07
(1,155)	1:A:68:ASP:N	1:A:68:ASP:CA	1:A:68:ASP:C	1:A:69:ALA:N	5	0.97	1.33
(1,168)	1:A:77:LYS:N	1:A:77:LYS:CA	1:A:77:LYS:C	1:A:78:VAL:N	4	0.52	1.31
(1,166)	1:A:76:PRO:N	1:A:76:PRO:CA	1:A:76:PRO:C	1:A:77:LYS:N	4	0.31	0.56
(1,35)	1:A:33:LYS:C	1:A:34:VAL:N	1:A:34:VAL:CA	1:A:34:VAL:C	10	110.73	134.85
(1,96)	1:A:84:LEU:C	1:A:85:GLU:N	1:A:85:GLU:CA	1:A:85:GLU:C	10	77.37	109.58
(1,22)	1:A:22:SER:C	1:A:23:ARG:N	1:A:23:ARG:CA	1:A:23:ARG:C	10	57.3	109.25
(1,25)	1:A:26:MET:C	1:A:27:THR:N	1:A:27:THR:CA	1:A:27:THR:C	10	61.41	106.41
(1,95)	1:A:83:GLU:C	1:A:84:LEU:N	1:A:84:LEU:CA	1:A:84:LEU:C	10	59.99	106.01
(1,3)	1:A:4:ILE:C	1:A:5:SER:N	1:A:5:SER:CA	1:A:5:SER:C	10	19.88	105.22
(1,49)	1:A:47:LYS:C	1:A:48:VAL:N	1:A:48:VAL:CA	1:A:48:VAL:C	10	102.5	104.61
(1,19)	1:A:19:LEU:C	1:A:20:SER:N	1:A:20:SER:CA	1:A:20:SER:C	10	17.43	103.35
(1,51)	1:A:50:GLY:C	1:A:51:VAL:N	1:A:51:VAL:CA	1:A:51:VAL:C	10	100.62	102.34
(1,99)	1:A:4:ILE:C	1:A:5:SER:N	1:A:5:SER:CA	1:A:5:SER:C	10	88.08	96.86
(1,148)	1:A:63:VAL:C	1:A:64:ASP:N	1:A:64:ASP:CA	1:A:64:ASP:C	10	89.83	95.55
(1,107)	1:A:15:MET:C	1:A:16:LYS:N	1:A:16:LYS:CA	1:A:16:LYS:C	10	82.44	90.95
(1,109)	1:A:16:LYS:C	1:A:17:ILE:N	1:A:17:ILE:CA	1:A:17:ILE:C	10	81.9	87.26
(1,111)	1:A:17:ILE:C	1:A:18:THR:N	1:A:18:THR:CA	1:A:18:THR:C	10	83.56	85.51
(1,101)	1:A:5:SER:C	1:A:6:ILE:N	1:A:6:ILE:CA	1:A:6:ILE:C	10	72.53	78.41
(1,138)	1:A:55:PHE:C	1:A:56:HIS:N	1:A:56:HIS:CA	1:A:56:HIS:C	10	72.26	76.36
(1,144)	1:A:60:PHE:C	1:A:61:ILE:N	1:A:61:ILE:CA	1:A:61:ILE:C	10	68.49	75.16
(1,23)	1:A:23:ARG:C	1:A:24:GLU:N	1:A:24:GLU:CA	1:A:24:GLU:C	10	57.23	72.44
(1,62)	1:A:57:VAL:C	1:A:58:MET:N	1:A:58:MET:CA	1:A:58:MET:C	10	59.41	72.04
(1,142)	1:A:59:ASP:C	1:A:60:PHE:N	1:A:60:PHE:CA	1:A:60:PHE:C	10	40.5	59.53
(1,97)	1:A:1:MET:C	1:A:2:LYS:N	1:A:2:LYS:CA	1:A:2:LYS:C	10	36.82	58.79
(1,136)	1:A:54:ILE:C	1:A:55:PHE:N	1:A:55:PHE:CA	1:A:55:PHE:C	10	46.92	57.51
(1,140)	1:A:56:HIS:C	1:A:57:VAL:N	1:A:57:VAL:CA	1:A:57:VAL:C	10	48.11	50.0
(1,146)	1:A:62:SER:C	1:A:63:VAL:N	1:A:63:VAL:CA	1:A:63:VAL:C	10	41.0	45.69
(1,70)	1:A:63:VAL:C	1:A:64:ASP:N	1:A:64:ASP:CA	1:A:64:ASP:C	10	31.03	39.1
(1,50)	1:A:48:VAL:C	1:A:49:GLU:N	1:A:49:GLU:CA	1:A:49:GLU:C	10	23.49	28.08
(1,27)	1:A:28:SER:C	1:A:29:ASP:N	1:A:29:ASP:CA	1:A:29:ASP:C	10	21.07	25.99

Continued on next page...

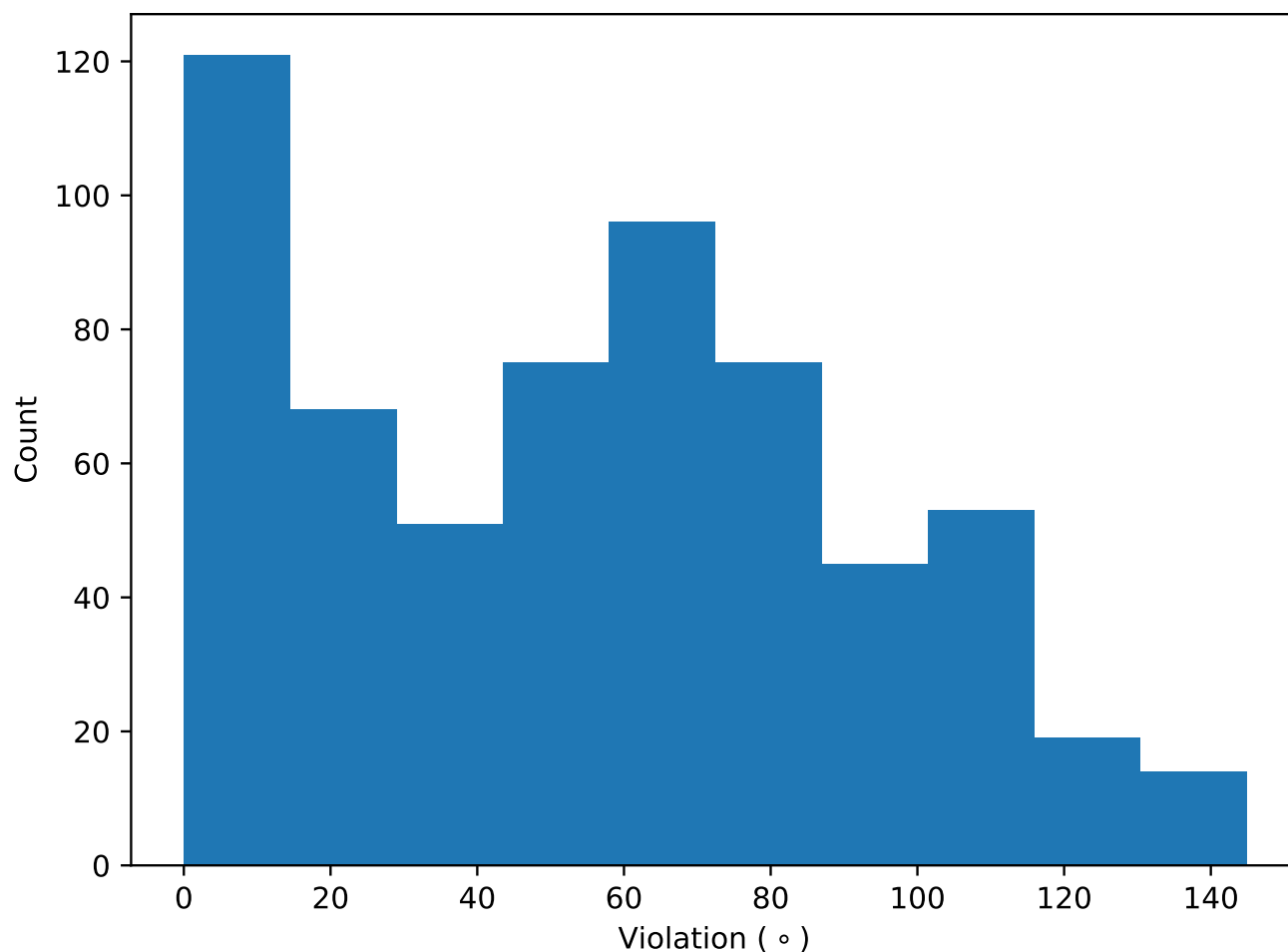
Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Models	Mean ( ° )	Max ( ° )
(1,92)	1:A:80:ALA:C	1:A:81:VAL:N	1:A:81:VAL:CA	1:A:81:VAL:C	10	16.55	21.77
(1,53)	1:A:52:LYS:C	1:A:53:SER:N	1:A:53:SER:CA	1:A:53:SER:C	10	8.01	18.81
(1,38)	1:A:40:ALA:C	1:A:41:PHE:N	1:A:41:PHE:CA	1:A:41:PHE:C	10	10.5	12.31
(1,164)	1:A:74:VAL:C	1:A:75:LEU:N	1:A:75:LEU:CA	1:A:75:LEU:C	10	1.02	1.95

## 9.8 All violated dihedral angle restraints

### 9.8.1 Histogram : Distribution of violations

The following histogram shows the distribution of violations in the ensemble.



### 9.8.2 Table: All violated dihedral angle restraints

The following table lists the violations in the ensemble sorted by violation value

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	Violation ( ° )
(1,98)	1:A:2:LYS:N	1:A:2:LYS:CA	1:A:2:LYS:C	1:A:3:ILE:N	3	144.85
(1,119)	1:A:38:GLN:N	1:A:38:GLN:CA	1:A:38:GLN:C	1:A:39:PRO:N	8	144.78

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	Violation ( ° )
(1,119)	1:A:38:GLN:N	1:A:38:GLN:CA	1:A:38:GLN:C	1:A:39:PRO:N	6	143.17
(1,119)	1:A:38:GLN:N	1:A:38:GLN:CA	1:A:38:GLN:C	1:A:39:PRO:N	1	141.04
(1,98)	1:A:2:LYS:N	1:A:2:LYS:CA	1:A:2:LYS:C	1:A:3:ILE:N	4	140.68
(1,98)	1:A:2:LYS:N	1:A:2:LYS:CA	1:A:2:LYS:C	1:A:3:ILE:N	6	140.53
(1,98)	1:A:2:LYS:N	1:A:2:LYS:CA	1:A:2:LYS:C	1:A:3:ILE:N	9	139.75
(1,157)	1:A:70:ASN:N	1:A:70:ASN:CA	1:A:70:ASN:C	1:A:71:TRP:N	1	138.35
(1,35)	1:A:33:LYS:C	1:A:34:VAL:N	1:A:34:VAL:CA	1:A:34:VAL:C	6	134.85
(1,98)	1:A:2:LYS:N	1:A:2:LYS:CA	1:A:2:LYS:C	1:A:3:ILE:N	10	134.0
(1,35)	1:A:33:LYS:C	1:A:34:VAL:N	1:A:34:VAL:CA	1:A:34:VAL:C	5	133.68
(1,35)	1:A:33:LYS:C	1:A:34:VAL:N	1:A:34:VAL:CA	1:A:34:VAL:C	9	132.68
(1,35)	1:A:33:LYS:C	1:A:34:VAL:N	1:A:34:VAL:CA	1:A:34:VAL:C	1	131.57
(1,157)	1:A:70:ASN:N	1:A:70:ASN:CA	1:A:70:ASN:C	1:A:71:TRP:N	4	131.19
(1,35)	1:A:33:LYS:C	1:A:34:VAL:N	1:A:34:VAL:CA	1:A:34:VAL:C	7	130.2
(1,157)	1:A:70:ASN:N	1:A:70:ASN:CA	1:A:70:ASN:C	1:A:71:TRP:N	5	127.74
(1,157)	1:A:70:ASN:N	1:A:70:ASN:CA	1:A:70:ASN:C	1:A:71:TRP:N	10	127.37
(1,151)	1:A:66:GLU:N	1:A:66:GLU:CA	1:A:66:GLU:C	1:A:67:ASN:N	8	127.19
(1,35)	1:A:33:LYS:C	1:A:34:VAL:N	1:A:34:VAL:CA	1:A:34:VAL:C	3	126.29
(1,114)	1:A:22:SER:N	1:A:22:SER:CA	1:A:22:SER:C	1:A:23:ARG:N	7	126.2
(1,151)	1:A:66:GLU:N	1:A:66:GLU:CA	1:A:66:GLU:C	1:A:67:ASN:N	6	125.48
(1,98)	1:A:2:LYS:N	1:A:2:LYS:CA	1:A:2:LYS:C	1:A:3:ILE:N	5	125.21
(1,119)	1:A:38:GLN:N	1:A:38:GLN:CA	1:A:38:GLN:C	1:A:39:PRO:N	3	122.76
(1,119)	1:A:38:GLN:N	1:A:38:GLN:CA	1:A:38:GLN:C	1:A:39:PRO:N	2	122.65
(1,114)	1:A:22:SER:N	1:A:22:SER:CA	1:A:22:SER:C	1:A:23:ARG:N	8	120.49
(1,141)	1:A:57:VAL:N	1:A:57:VAL:CA	1:A:57:VAL:C	1:A:58:MET:N	10	117.14
(1,157)	1:A:70:ASN:N	1:A:70:ASN:CA	1:A:70:ASN:C	1:A:71:TRP:N	2	116.9
(1,119)	1:A:38:GLN:N	1:A:38:GLN:CA	1:A:38:GLN:C	1:A:39:PRO:N	10	116.85
(1,135)	1:A:54:ILE:N	1:A:54:ILE:CA	1:A:54:ILE:C	1:A:55:PHE:N	4	116.81
(1,119)	1:A:38:GLN:N	1:A:38:GLN:CA	1:A:38:GLN:C	1:A:39:PRO:N	7	116.77
(1,98)	1:A:2:LYS:N	1:A:2:LYS:CA	1:A:2:LYS:C	1:A:3:ILE:N	8	116.56
(1,119)	1:A:38:GLN:N	1:A:38:GLN:CA	1:A:38:GLN:C	1:A:39:PRO:N	5	116.49
(1,119)	1:A:38:GLN:N	1:A:38:GLN:CA	1:A:38:GLN:C	1:A:39:PRO:N	9	116.03
(1,135)	1:A:54:ILE:N	1:A:54:ILE:CA	1:A:54:ILE:C	1:A:55:PHE:N	8	115.67
(1,135)	1:A:54:ILE:N	1:A:54:ILE:CA	1:A:54:ILE:C	1:A:55:PHE:N	6	115.33
(1,135)	1:A:54:ILE:N	1:A:54:ILE:CA	1:A:54:ILE:C	1:A:55:PHE:N	10	114.57
(1,135)	1:A:54:ILE:N	1:A:54:ILE:CA	1:A:54:ILE:C	1:A:55:PHE:N	2	114.52
(1,119)	1:A:38:GLN:N	1:A:38:GLN:CA	1:A:38:GLN:C	1:A:39:PRO:N	4	113.87
(1,178)	1:A:86:HIS:N	1:A:86:HIS:CA	1:A:86:HIS:C	1:A:87:HIS:N	8	113.81
(1,135)	1:A:54:ILE:N	1:A:54:ILE:CA	1:A:54:ILE:C	1:A:55:PHE:N	1	113.71
(1,98)	1:A:2:LYS:N	1:A:2:LYS:CA	1:A:2:LYS:C	1:A:3:ILE:N	2	113.31
(1,157)	1:A:70:ASN:N	1:A:70:ASN:CA	1:A:70:ASN:C	1:A:71:TRP:N	9	112.36
(1,135)	1:A:54:ILE:N	1:A:54:ILE:CA	1:A:54:ILE:C	1:A:55:PHE:N	3	111.95
(1,135)	1:A:54:ILE:N	1:A:54:ILE:CA	1:A:54:ILE:C	1:A:55:PHE:N	9	111.67
(1,141)	1:A:57:VAL:N	1:A:57:VAL:CA	1:A:57:VAL:C	1:A:58:MET:N	2	110.93
(1,114)	1:A:22:SER:N	1:A:22:SER:CA	1:A:22:SER:C	1:A:23:ARG:N	9	110.56
(1,35)	1:A:33:LYS:C	1:A:34:VAL:N	1:A:34:VAL:CA	1:A:34:VAL:C	10	109.62
(1,96)	1:A:84:LEU:C	1:A:85:GLU:N	1:A:85:GLU:CA	1:A:85:GLU:C	8	109.58
(1,135)	1:A:54:ILE:N	1:A:54:ILE:CA	1:A:54:ILE:C	1:A:55:PHE:N	7	109.38
(1,22)	1:A:22:SER:C	1:A:23:ARG:N	1:A:23:ARG:CA	1:A:23:ARG:C	2	109.25
(1,96)	1:A:84:LEU:C	1:A:85:GLU:N	1:A:85:GLU:CA	1:A:85:GLU:C	10	109.08
(1,114)	1:A:22:SER:N	1:A:22:SER:CA	1:A:22:SER:C	1:A:23:ARG:N	10	108.1
(1,96)	1:A:84:LEU:C	1:A:85:GLU:N	1:A:85:GLU:CA	1:A:85:GLU:C	6	107.98

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	Violation ( ° )
(1,22)	1:A:22:SER:C	1:A:23:ARG:N	1:A:23:ARG:CA	1:A:23:ARG:C	8	107.08
(1,35)	1:A:33:LYS:C	1:A:34:VAL:N	1:A:34:VAL:CA	1:A:34:VAL:C	4	106.56
(1,151)	1:A:66:GLU:N	1:A:66:GLU:CA	1:A:66:GLU:C	1:A:67:ASN:N	10	106.56
(1,25)	1:A:26:MET:C	1:A:27:THR:N	1:A:27:THR:CA	1:A:27:THR:C	5	106.41
(1,141)	1:A:57:VAL:N	1:A:57:VAL:CA	1:A:57:VAL:C	1:A:58:MET:N	8	106.32
(1,95)	1:A:83:GLU:C	1:A:84:LEU:N	1:A:84:LEU:CA	1:A:84:LEU:C	3	106.01
(1,102)	1:A:6:ILE:N	1:A:6:ILE:CA	1:A:6:ILE:C	1:A:7:SER:N	6	105.9
(1,102)	1:A:6:ILE:N	1:A:6:ILE:CA	1:A:6:ILE:C	1:A:7:SER:N	8	105.64
(1,102)	1:A:6:ILE:N	1:A:6:ILE:CA	1:A:6:ILE:C	1:A:7:SER:N	2	105.52
(1,3)	1:A:4:ILE:C	1:A:5:SER:N	1:A:5:SER:CA	1:A:5:SER:C	10	105.22
(1,49)	1:A:47:LYS:C	1:A:48:VAL:N	1:A:48:VAL:CA	1:A:48:VAL:C	10	104.61
(1,25)	1:A:26:MET:C	1:A:27:THR:N	1:A:27:THR:CA	1:A:27:THR:C	1	104.53
(1,141)	1:A:57:VAL:N	1:A:57:VAL:CA	1:A:57:VAL:C	1:A:58:MET:N	4	104.33
(1,25)	1:A:26:MET:C	1:A:27:THR:N	1:A:27:THR:CA	1:A:27:THR:C	6	104.09
(1,96)	1:A:84:LEU:C	1:A:85:GLU:N	1:A:85:GLU:CA	1:A:85:GLU:C	3	104.01
(1,49)	1:A:47:LYS:C	1:A:48:VAL:N	1:A:48:VAL:CA	1:A:48:VAL:C	1	103.7
(1,49)	1:A:47:LYS:C	1:A:48:VAL:N	1:A:48:VAL:CA	1:A:48:VAL:C	6	103.7
(1,95)	1:A:83:GLU:C	1:A:84:LEU:N	1:A:84:LEU:CA	1:A:84:LEU:C	9	103.57
(1,95)	1:A:83:GLU:C	1:A:84:LEU:N	1:A:84:LEU:CA	1:A:84:LEU:C	7	103.42
(1,19)	1:A:19:LEU:C	1:A:20:SER:N	1:A:20:SER:CA	1:A:20:SER:C	10	103.35
(1,25)	1:A:26:MET:C	1:A:27:THR:N	1:A:27:THR:CA	1:A:27:THR:C	2	103.27
(1,49)	1:A:47:LYS:C	1:A:48:VAL:N	1:A:48:VAL:CA	1:A:48:VAL:C	2	102.94
(1,49)	1:A:47:LYS:C	1:A:48:VAL:N	1:A:48:VAL:CA	1:A:48:VAL:C	9	102.87
(1,102)	1:A:6:ILE:N	1:A:6:ILE:CA	1:A:6:ILE:C	1:A:7:SER:N	1	102.81
(1,49)	1:A:47:LYS:C	1:A:48:VAL:N	1:A:48:VAL:CA	1:A:48:VAL:C	7	102.71
(1,95)	1:A:83:GLU:C	1:A:84:LEU:N	1:A:84:LEU:CA	1:A:84:LEU:C	6	102.54
(1,151)	1:A:66:GLU:N	1:A:66:GLU:CA	1:A:66:GLU:C	1:A:67:ASN:N	7	102.44
(1,178)	1:A:86:HIS:N	1:A:86:HIS:CA	1:A:86:HIS:C	1:A:87:HIS:N	10	102.37
(1,51)	1:A:50:GLY:C	1:A:51:VAL:N	1:A:51:VAL:CA	1:A:51:VAL:C	10	102.34
(1,114)	1:A:22:SER:N	1:A:22:SER:CA	1:A:22:SER:C	1:A:23:ARG:N	1	102.15
(1,49)	1:A:47:LYS:C	1:A:48:VAL:N	1:A:48:VAL:CA	1:A:48:VAL:C	3	102.09
(1,49)	1:A:47:LYS:C	1:A:48:VAL:N	1:A:48:VAL:CA	1:A:48:VAL:C	8	101.79
(1,51)	1:A:50:GLY:C	1:A:51:VAL:N	1:A:51:VAL:CA	1:A:51:VAL:C	2	101.71
(1,51)	1:A:50:GLY:C	1:A:51:VAL:N	1:A:51:VAL:CA	1:A:51:VAL:C	4	101.38
(1,51)	1:A:50:GLY:C	1:A:51:VAL:N	1:A:51:VAL:CA	1:A:51:VAL:C	6	101.29
(1,135)	1:A:54:ILE:N	1:A:54:ILE:CA	1:A:54:ILE:C	1:A:55:PHE:N	5	101.29
(1,51)	1:A:50:GLY:C	1:A:51:VAL:N	1:A:51:VAL:CA	1:A:51:VAL:C	3	101.2
(1,178)	1:A:86:HIS:N	1:A:86:HIS:CA	1:A:86:HIS:C	1:A:87:HIS:N	5	100.66
(1,51)	1:A:50:GLY:C	1:A:51:VAL:N	1:A:51:VAL:CA	1:A:51:VAL:C	1	100.53
(1,49)	1:A:47:LYS:C	1:A:48:VAL:N	1:A:48:VAL:CA	1:A:48:VAL:C	4	100.48
(1,51)	1:A:50:GLY:C	1:A:51:VAL:N	1:A:51:VAL:CA	1:A:51:VAL:C	8	100.28
(1,51)	1:A:50:GLY:C	1:A:51:VAL:N	1:A:51:VAL:CA	1:A:51:VAL:C	5	100.25
(1,102)	1:A:6:ILE:N	1:A:6:ILE:CA	1:A:6:ILE:C	1:A:7:SER:N	9	100.17
(1,141)	1:A:57:VAL:N	1:A:57:VAL:CA	1:A:57:VAL:C	1:A:58:MET:N	6	100.16
(1,49)	1:A:47:LYS:C	1:A:48:VAL:N	1:A:48:VAL:CA	1:A:48:VAL:C	5	100.14
(1,51)	1:A:50:GLY:C	1:A:51:VAL:N	1:A:51:VAL:CA	1:A:51:VAL:C	7	99.59
(1,141)	1:A:57:VAL:N	1:A:57:VAL:CA	1:A:57:VAL:C	1:A:58:MET:N	1	98.32
(1,141)	1:A:57:VAL:N	1:A:57:VAL:CA	1:A:57:VAL:C	1:A:58:MET:N	5	98.0
(1,51)	1:A:50:GLY:C	1:A:51:VAL:N	1:A:51:VAL:CA	1:A:51:VAL:C	9	97.66
(1,99)	1:A:4:ILE:C	1:A:5:SER:N	1:A:5:SER:CA	1:A:5:SER:C	8	96.86
(1,35)	1:A:33:LYS:C	1:A:34:VAL:N	1:A:34:VAL:CA	1:A:34:VAL:C	2	95.57

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	Violation ( ° )
(1,148)	1:A:63:VAL:C	1:A:64:ASP:N	1:A:64:ASP:CA	1:A:64:ASP:C	1	95.55
(1,99)	1:A:4:ILE:C	1:A:5:SER:N	1:A:5:SER:CA	1:A:5:SER:C	2	95.18
(1,99)	1:A:4:ILE:C	1:A:5:SER:N	1:A:5:SER:CA	1:A:5:SER:C	4	94.92
(1,99)	1:A:4:ILE:C	1:A:5:SER:N	1:A:5:SER:CA	1:A:5:SER:C	7	94.73
(1,141)	1:A:57:VAL:N	1:A:57:VAL:CA	1:A:57:VAL:C	1:A:58:MET:N	3	94.69
(1,148)	1:A:63:VAL:C	1:A:64:ASP:N	1:A:64:ASP:CA	1:A:64:ASP:C	2	94.62
(1,115)	1:A:29:ASP:N	1:A:29:ASP:CA	1:A:29:ASP:C	1:A:30:THR:N	2	94.24
(1,148)	1:A:63:VAL:C	1:A:64:ASP:N	1:A:64:ASP:CA	1:A:64:ASP:C	5	93.65
(1,148)	1:A:63:VAL:C	1:A:64:ASP:N	1:A:64:ASP:CA	1:A:64:ASP:C	10	92.9
(1,99)	1:A:4:ILE:C	1:A:5:SER:N	1:A:5:SER:CA	1:A:5:SER:C	5	92.81
(1,99)	1:A:4:ILE:C	1:A:5:SER:N	1:A:5:SER:CA	1:A:5:SER:C	9	91.72
(1,99)	1:A:4:ILE:C	1:A:5:SER:N	1:A:5:SER:CA	1:A:5:SER:C	3	91.67
(1,100)	1:A:5:SER:N	1:A:5:SER:CA	1:A:5:SER:C	1:A:6:ILE:N	4	91.65
(1,148)	1:A:63:VAL:C	1:A:64:ASP:N	1:A:64:ASP:CA	1:A:64:ASP:C	6	91.64
(1,107)	1:A:15:MET:C	1:A:16:LYS:N	1:A:16:LYS:CA	1:A:16:LYS:C	8	90.95
(1,99)	1:A:4:ILE:C	1:A:5:SER:N	1:A:5:SER:CA	1:A:5:SER:C	6	90.7
(1,99)	1:A:4:ILE:C	1:A:5:SER:N	1:A:5:SER:CA	1:A:5:SER:C	1	90.21
(1,148)	1:A:63:VAL:C	1:A:64:ASP:N	1:A:64:ASP:CA	1:A:64:ASP:C	9	90.07
(1,115)	1:A:29:ASP:N	1:A:29:ASP:CA	1:A:29:ASP:C	1:A:30:THR:N	1	89.78
(1,141)	1:A:57:VAL:N	1:A:57:VAL:CA	1:A:57:VAL:C	1:A:58:MET:N	7	89.6
(1,157)	1:A:70:ASN:N	1:A:70:ASN:CA	1:A:70:ASN:C	1:A:71:TRP:N	6	89.13
(1,148)	1:A:63:VAL:C	1:A:64:ASP:N	1:A:64:ASP:CA	1:A:64:ASP:C	4	88.4
(1,151)	1:A:66:GLU:N	1:A:66:GLU:CA	1:A:66:GLU:C	1:A:67:ASN:N	3	87.92
(1,109)	1:A:16:LYS:C	1:A:17:ILE:N	1:A:17:ILE:CA	1:A:17:ILE:C	4	87.26
(1,148)	1:A:63:VAL:C	1:A:64:ASP:N	1:A:64:ASP:CA	1:A:64:ASP:C	3	87.22
(1,100)	1:A:5:SER:N	1:A:5:SER:CA	1:A:5:SER:C	1:A:6:ILE:N	9	87.2
(1,109)	1:A:16:LYS:C	1:A:17:ILE:N	1:A:17:ILE:CA	1:A:17:ILE:C	9	87.15
(1,178)	1:A:86:HIS:N	1:A:86:HIS:CA	1:A:86:HIS:C	1:A:87:HIS:N	6	86.54
(1,109)	1:A:16:LYS:C	1:A:17:ILE:N	1:A:17:ILE:CA	1:A:17:ILE:C	1	86.46
(1,107)	1:A:15:MET:C	1:A:16:LYS:N	1:A:16:LYS:CA	1:A:16:LYS:C	4	86.23
(1,115)	1:A:29:ASP:N	1:A:29:ASP:CA	1:A:29:ASP:C	1:A:30:THR:N	8	86.22
(1,109)	1:A:16:LYS:C	1:A:17:ILE:N	1:A:17:ILE:CA	1:A:17:ILE:C	3	86.22
(1,109)	1:A:16:LYS:C	1:A:17:ILE:N	1:A:17:ILE:CA	1:A:17:ILE:C	7	85.68
(1,111)	1:A:17:ILE:C	1:A:18:THR:N	1:A:18:THR:CA	1:A:18:THR:C	10	85.51
(1,148)	1:A:63:VAL:C	1:A:64:ASP:N	1:A:64:ASP:CA	1:A:64:ASP:C	8	85.49
(1,111)	1:A:17:ILE:C	1:A:18:THR:N	1:A:18:THR:CA	1:A:18:THR:C	4	85.43
(1,141)	1:A:57:VAL:N	1:A:57:VAL:CA	1:A:57:VAL:C	1:A:58:MET:N	9	85.42
(1,111)	1:A:17:ILE:C	1:A:18:THR:N	1:A:18:THR:CA	1:A:18:THR:C	5	85.06
(1,111)	1:A:17:ILE:C	1:A:18:THR:N	1:A:18:THR:CA	1:A:18:THR:C	9	84.69
(1,109)	1:A:16:LYS:C	1:A:17:ILE:N	1:A:17:ILE:CA	1:A:17:ILE:C	8	84.4
(1,109)	1:A:16:LYS:C	1:A:17:ILE:N	1:A:17:ILE:CA	1:A:17:ILE:C	2	84.04
(1,107)	1:A:15:MET:C	1:A:16:LYS:N	1:A:16:LYS:CA	1:A:16:LYS:C	9	83.9
(1,111)	1:A:17:ILE:C	1:A:18:THR:N	1:A:18:THR:CA	1:A:18:THR:C	8	83.72
(1,157)	1:A:70:ASN:N	1:A:70:ASN:CA	1:A:70:ASN:C	1:A:71:TRP:N	8	83.64
(1,107)	1:A:15:MET:C	1:A:16:LYS:N	1:A:16:LYS:CA	1:A:16:LYS:C	10	83.57
(1,111)	1:A:17:ILE:C	1:A:18:THR:N	1:A:18:THR:CA	1:A:18:THR:C	3	83.32
(1,107)	1:A:15:MET:C	1:A:16:LYS:N	1:A:16:LYS:CA	1:A:16:LYS:C	2	82.95
(1,111)	1:A:17:ILE:C	1:A:18:THR:N	1:A:18:THR:CA	1:A:18:THR:C	1	82.46
(1,100)	1:A:5:SER:N	1:A:5:SER:CA	1:A:5:SER:C	1:A:6:ILE:N	6	82.29
(1,111)	1:A:17:ILE:C	1:A:18:THR:N	1:A:18:THR:CA	1:A:18:THR:C	7	82.13
(1,178)	1:A:86:HIS:N	1:A:86:HIS:CA	1:A:86:HIS:C	1:A:87:HIS:N	4	81.93

Continued on next page...



Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	Violation ( ° )
(1,111)	1:A:17:ILE:C	1:A:18:THR:N	1:A:18:THR:CA	1:A:18:THR:C	6	81.83
(1,107)	1:A:15:MET:C	1:A:16:LYS:N	1:A:16:LYS:CA	1:A:16:LYS:C	3	81.8
(1,109)	1:A:16:LYS:C	1:A:17:ILE:N	1:A:17:ILE:CA	1:A:17:ILE:C	5	81.72
(1,111)	1:A:17:ILE:C	1:A:18:THR:N	1:A:18:THR:CA	1:A:18:THR:C	2	81.41
(1,102)	1:A:6:ILE:N	1:A:6:ILE:CA	1:A:6:ILE:C	1:A:7:SER:N	7	81.24
(1,100)	1:A:5:SER:N	1:A:5:SER:CA	1:A:5:SER:C	1:A:6:ILE:N	3	81.04
(1,107)	1:A:15:MET:C	1:A:16:LYS:N	1:A:16:LYS:CA	1:A:16:LYS:C	7	81.01
(1,143)	1:A:60:PHE:N	1:A:60:PHE:CA	1:A:60:PHE:C	1:A:61:ILE:N	7	80.51
(1,108)	1:A:16:LYS:N	1:A:16:LYS:CA	1:A:16:LYS:C	1:A:17:ILE:N	10	79.42
(1,178)	1:A:86:HIS:N	1:A:86:HIS:CA	1:A:86:HIS:C	1:A:87:HIS:N	3	79.41
(1,107)	1:A:15:MET:C	1:A:16:LYS:N	1:A:16:LYS:CA	1:A:16:LYS:C	1	79.25
(1,102)	1:A:6:ILE:N	1:A:6:ILE:CA	1:A:6:ILE:C	1:A:7:SER:N	3	79.17
(1,143)	1:A:60:PHE:N	1:A:60:PHE:CA	1:A:60:PHE:C	1:A:61:ILE:N	10	79.12
(1,143)	1:A:60:PHE:N	1:A:60:PHE:CA	1:A:60:PHE:C	1:A:61:ILE:N	6	79.08
(1,178)	1:A:86:HIS:N	1:A:86:HIS:CA	1:A:86:HIS:C	1:A:87:HIS:N	7	78.92
(1,157)	1:A:70:ASN:N	1:A:70:ASN:CA	1:A:70:ASN:C	1:A:71:TRP:N	7	78.79
(1,148)	1:A:63:VAL:C	1:A:64:ASP:N	1:A:64:ASP:CA	1:A:64:ASP:C	7	78.79
(1,107)	1:A:15:MET:C	1:A:16:LYS:N	1:A:16:LYS:CA	1:A:16:LYS:C	5	78.47
(1,101)	1:A:5:SER:C	1:A:6:ILE:N	1:A:6:ILE:CA	1:A:6:ILE:C	2	78.41
(1,178)	1:A:86:HIS:N	1:A:86:HIS:CA	1:A:86:HIS:C	1:A:87:HIS:N	2	77.97
(1,143)	1:A:60:PHE:N	1:A:60:PHE:CA	1:A:60:PHE:C	1:A:61:ILE:N	1	77.63
(1,101)	1:A:5:SER:C	1:A:6:ILE:N	1:A:6:ILE:CA	1:A:6:ILE:C	10	77.59
(1,117)	1:A:30:THR:N	1:A:30:THR:CA	1:A:30:THR:C	1:A:31:TYR:N	5	77.5
(1,145)	1:A:61:ILE:N	1:A:61:ILE:CA	1:A:61:ILE:C	1:A:62:SER:N	6	77.04
(1,101)	1:A:5:SER:C	1:A:6:ILE:N	1:A:6:ILE:CA	1:A:6:ILE:C	9	76.95
(1,143)	1:A:60:PHE:N	1:A:60:PHE:CA	1:A:60:PHE:C	1:A:61:ILE:N	5	76.5
(1,143)	1:A:60:PHE:N	1:A:60:PHE:CA	1:A:60:PHE:C	1:A:61:ILE:N	4	76.39
(1,138)	1:A:55:PHE:C	1:A:56:HIS:N	1:A:56:HIS:CA	1:A:56:HIS:C	3	76.36
(1,107)	1:A:15:MET:C	1:A:16:LYS:N	1:A:16:LYS:CA	1:A:16:LYS:C	6	76.23
(1,143)	1:A:60:PHE:N	1:A:60:PHE:CA	1:A:60:PHE:C	1:A:61:ILE:N	2	75.57
(1,117)	1:A:30:THR:N	1:A:30:THR:CA	1:A:30:THR:C	1:A:31:TYR:N	6	75.56
(1,108)	1:A:16:LYS:N	1:A:16:LYS:CA	1:A:16:LYS:C	1:A:17:ILE:N	6	75.27
(1,104)	1:A:14:THR:N	1:A:14:THR:CA	1:A:14:THR:C	1:A:15:MET:N	6	75.19
(1,101)	1:A:5:SER:C	1:A:6:ILE:N	1:A:6:ILE:CA	1:A:6:ILE:C	8	75.18
(1,144)	1:A:60:PHE:C	1:A:61:ILE:N	1:A:61:ILE:CA	1:A:61:ILE:C	8	75.16
(1,117)	1:A:30:THR:N	1:A:30:THR:CA	1:A:30:THR:C	1:A:31:TYR:N	4	75.12
(1,106)	1:A:15:MET:N	1:A:15:MET:CA	1:A:15:MET:C	1:A:16:LYS:N	10	75.06
(1,149)	1:A:64:ASP:N	1:A:64:ASP:CA	1:A:64:ASP:C	1:A:65:LYS:N	3	74.85
(1,138)	1:A:55:PHE:C	1:A:56:HIS:N	1:A:56:HIS:CA	1:A:56:HIS:C	6	74.58
(1,96)	1:A:84:LEU:C	1:A:85:GLU:N	1:A:85:GLU:CA	1:A:85:GLU:C	4	74.39
(1,133)	1:A:51:VAL:N	1:A:51:VAL:CA	1:A:51:VAL:C	1:A:52:LYS:N	2	74.06
(1,101)	1:A:5:SER:C	1:A:6:ILE:N	1:A:6:ILE:CA	1:A:6:ILE:C	1	74.05
(1,138)	1:A:55:PHE:C	1:A:56:HIS:N	1:A:56:HIS:CA	1:A:56:HIS:C	2	73.97
(1,101)	1:A:5:SER:C	1:A:6:ILE:N	1:A:6:ILE:CA	1:A:6:ILE:C	5	73.93
(1,115)	1:A:29:ASP:N	1:A:29:ASP:CA	1:A:29:ASP:C	1:A:30:THR:N	10	73.9
(1,144)	1:A:60:PHE:C	1:A:61:ILE:N	1:A:61:ILE:CA	1:A:61:ILE:C	9	73.65
(1,100)	1:A:5:SER:N	1:A:5:SER:CA	1:A:5:SER:C	1:A:6:ILE:N	1	73.61
(1,101)	1:A:5:SER:C	1:A:6:ILE:N	1:A:6:ILE:CA	1:A:6:ILE:C	7	73.52
(1,115)	1:A:29:ASP:N	1:A:29:ASP:CA	1:A:29:ASP:C	1:A:30:THR:N	7	73.4
(1,144)	1:A:60:PHE:C	1:A:61:ILE:N	1:A:61:ILE:CA	1:A:61:ILE:C	2	73.2
(1,133)	1:A:51:VAL:N	1:A:51:VAL:CA	1:A:51:VAL:C	1:A:52:LYS:N	10	72.51

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	Violation ( ° )
(1,23)	1:A:23:ARG:C	1:A:24:GLU:N	1:A:24:GLU:CA	1:A:24:GLU:C	1	72.44
(1,138)	1:A:55:PHE:C	1:A:56:HIS:N	1:A:56:HIS:CA	1:A:56:HIS:C	8	72.27
(1,101)	1:A:5:SER:C	1:A:6:ILE:N	1:A:6:ILE:CA	1:A:6:ILE:C	6	72.06
(1,62)	1:A:57:VAL:C	1:A:58:MET:N	1:A:58:MET:CA	1:A:58:MET:C	8	72.04
(1,106)	1:A:15:MET:N	1:A:15:MET:CA	1:A:15:MET:C	1:A:16:LYS:N	9	72.0
(1,22)	1:A:22:SER:C	1:A:23:ARG:N	1:A:23:ARG:CA	1:A:23:ARG:C	9	71.96
(1,96)	1:A:84:LEU:C	1:A:85:GLU:N	1:A:85:GLU:CA	1:A:85:GLU:C	7	71.8
(1,138)	1:A:55:PHE:C	1:A:56:HIS:N	1:A:56:HIS:CA	1:A:56:HIS:C	9	71.75
(1,115)	1:A:29:ASP:N	1:A:29:ASP:CA	1:A:29:ASP:C	1:A:30:THR:N	6	71.67
(1,138)	1:A:55:PHE:C	1:A:56:HIS:N	1:A:56:HIS:CA	1:A:56:HIS:C	4	71.64
(1,138)	1:A:55:PHE:C	1:A:56:HIS:N	1:A:56:HIS:CA	1:A:56:HIS:C	10	71.61
(1,133)	1:A:51:VAL:N	1:A:51:VAL:CA	1:A:51:VAL:C	1:A:52:LYS:N	5	71.36
(1,109)	1:A:16:LYS:C	1:A:17:ILE:N	1:A:17:ILE:CA	1:A:17:ILE:C	6	71.2
(1,100)	1:A:5:SER:N	1:A:5:SER:CA	1:A:5:SER:C	1:A:6:ILE:N	5	71.16
(1,133)	1:A:51:VAL:N	1:A:51:VAL:CA	1:A:51:VAL:C	1:A:52:LYS:N	4	71.15
(1,143)	1:A:60:PHE:N	1:A:60:PHE:CA	1:A:60:PHE:C	1:A:61:ILE:N	3	71.11
(1,23)	1:A:23:ARG:C	1:A:24:GLU:N	1:A:24:GLU:CA	1:A:24:GLU:C	9	70.99
(1,101)	1:A:5:SER:C	1:A:6:ILE:N	1:A:6:ILE:CA	1:A:6:ILE:C	3	70.86
(1,138)	1:A:55:PHE:C	1:A:56:HIS:N	1:A:56:HIS:CA	1:A:56:HIS:C	1	70.73
(1,23)	1:A:23:ARG:C	1:A:24:GLU:N	1:A:24:GLU:CA	1:A:24:GLU:C	8	70.56
(1,145)	1:A:61:ILE:N	1:A:61:ILE:CA	1:A:61:ILE:C	1:A:62:SER:N	5	70.35
(1,138)	1:A:55:PHE:C	1:A:56:HIS:N	1:A:56:HIS:CA	1:A:56:HIS:C	7	69.96
(1,138)	1:A:55:PHE:C	1:A:56:HIS:N	1:A:56:HIS:CA	1:A:56:HIS:C	5	69.69
(1,145)	1:A:61:ILE:N	1:A:61:ILE:CA	1:A:61:ILE:C	1:A:62:SER:N	9	69.52
(1,114)	1:A:22:SER:N	1:A:22:SER:CA	1:A:22:SER:C	1:A:23:ARG:N	2	68.93
(1,139)	1:A:56:HIS:N	1:A:56:HIS:CA	1:A:56:HIS:C	1:A:57:VAL:N	8	68.9
(1,145)	1:A:61:ILE:N	1:A:61:ILE:CA	1:A:61:ILE:C	1:A:62:SER:N	4	68.89
(1,106)	1:A:15:MET:N	1:A:15:MET:CA	1:A:15:MET:C	1:A:16:LYS:N	6	68.69
(1,23)	1:A:23:ARG:C	1:A:24:GLU:N	1:A:24:GLU:CA	1:A:24:GLU:C	5	68.64
(1,144)	1:A:60:PHE:C	1:A:61:ILE:N	1:A:61:ILE:CA	1:A:61:ILE:C	3	68.61
(1,22)	1:A:22:SER:C	1:A:23:ARG:N	1:A:23:ARG:CA	1:A:23:ARG:C	5	68.55
(1,133)	1:A:51:VAL:N	1:A:51:VAL:CA	1:A:51:VAL:C	1:A:52:LYS:N	1	68.4
(1,157)	1:A:70:ASN:N	1:A:70:ASN:CA	1:A:70:ASN:C	1:A:71:TRP:N	3	68.22
(1,23)	1:A:23:ARG:C	1:A:24:GLU:N	1:A:24:GLU:CA	1:A:24:GLU:C	7	68.16
(1,115)	1:A:29:ASP:N	1:A:29:ASP:CA	1:A:29:ASP:C	1:A:30:THR:N	4	68.08
(1,145)	1:A:61:ILE:N	1:A:61:ILE:CA	1:A:61:ILE:C	1:A:62:SER:N	8	67.98
(1,143)	1:A:60:PHE:N	1:A:60:PHE:CA	1:A:60:PHE:C	1:A:61:ILE:N	9	67.71
(1,144)	1:A:60:PHE:C	1:A:61:ILE:N	1:A:61:ILE:CA	1:A:61:ILE:C	10	67.5
(1,144)	1:A:60:PHE:C	1:A:61:ILE:N	1:A:61:ILE:CA	1:A:61:ILE:C	6	67.38
(1,149)	1:A:64:ASP:N	1:A:64:ASP:CA	1:A:64:ASP:C	1:A:65:LYS:N	6	67.37
(1,145)	1:A:61:ILE:N	1:A:61:ILE:CA	1:A:61:ILE:C	1:A:62:SER:N	10	67.28
(1,149)	1:A:64:ASP:N	1:A:64:ASP:CA	1:A:64:ASP:C	1:A:65:LYS:N	7	66.98
(1,23)	1:A:23:ARG:C	1:A:24:GLU:N	1:A:24:GLU:CA	1:A:24:GLU:C	10	66.78
(1,145)	1:A:61:ILE:N	1:A:61:ILE:CA	1:A:61:ILE:C	1:A:62:SER:N	1	66.7
(1,178)	1:A:86:HIS:N	1:A:86:HIS:CA	1:A:86:HIS:C	1:A:87:HIS:N	1	66.65
(1,112)	1:A:18:THR:N	1:A:18:THR:CA	1:A:18:THR:C	1:A:19:LEU:N	10	66.5
(1,139)	1:A:56:HIS:N	1:A:56:HIS:CA	1:A:56:HIS:C	1:A:57:VAL:N	9	66.46
(1,145)	1:A:61:ILE:N	1:A:61:ILE:CA	1:A:61:ILE:C	1:A:62:SER:N	7	66.39
(1,106)	1:A:15:MET:N	1:A:15:MET:CA	1:A:15:MET:C	1:A:16:LYS:N	3	66.1
(1,23)	1:A:23:ARG:C	1:A:24:GLU:N	1:A:24:GLU:CA	1:A:24:GLU:C	2	66.06
(1,144)	1:A:60:PHE:C	1:A:61:ILE:N	1:A:61:ILE:CA	1:A:61:ILE:C	5	66.06

Continued on next page...



Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	Violation ( ° )
(1,22)	1:A:22:SER:C	1:A:23:ARG:N	1:A:23:ARG:CA	1:A:23:ARG:C	3	65.72
(1,115)	1:A:29:ASP:N	1:A:29:ASP:CA	1:A:29:ASP:C	1:A:30:THR:N	3	65.6
(1,62)	1:A:57:VAL:C	1:A:58:MET:N	1:A:58:MET:CA	1:A:58:MET:C	10	65.46
(1,115)	1:A:29:ASP:N	1:A:29:ASP:CA	1:A:29:ASP:C	1:A:30:THR:N	9	64.93
(1,109)	1:A:16:LYS:C	1:A:17:ILE:N	1:A:17:ILE:CA	1:A:17:ILE:C	10	64.83
(1,144)	1:A:60:PHE:C	1:A:61:ILE:N	1:A:61:ILE:CA	1:A:61:ILE:C	7	64.56
(1,144)	1:A:60:PHE:C	1:A:61:ILE:N	1:A:61:ILE:CA	1:A:61:ILE:C	1	64.45
(1,144)	1:A:60:PHE:C	1:A:61:ILE:N	1:A:61:ILE:CA	1:A:61:ILE:C	4	64.32
(1,106)	1:A:15:MET:N	1:A:15:MET:CA	1:A:15:MET:C	1:A:16:LYS:N	7	64.26
(1,149)	1:A:64:ASP:N	1:A:64:ASP:CA	1:A:64:ASP:C	1:A:65:LYS:N	4	63.98
(1,145)	1:A:61:ILE:N	1:A:61:ILE:CA	1:A:61:ILE:C	1:A:62:SER:N	3	63.57
(1,22)	1:A:22:SER:C	1:A:23:ARG:N	1:A:23:ARG:CA	1:A:23:ARG:C	7	63.47
(1,139)	1:A:56:HIS:N	1:A:56:HIS:CA	1:A:56:HIS:C	1:A:57:VAL:N	2	63.31
(1,96)	1:A:84:LEU:C	1:A:85:GLU:N	1:A:85:GLU:CA	1:A:85:GLU:C	2	62.78
(1,62)	1:A:57:VAL:C	1:A:58:MET:N	1:A:58:MET:CA	1:A:58:MET:C	4	62.71
(1,62)	1:A:57:VAL:C	1:A:58:MET:N	1:A:58:MET:CA	1:A:58:MET:C	9	62.7
(1,149)	1:A:64:ASP:N	1:A:64:ASP:CA	1:A:64:ASP:C	1:A:65:LYS:N	2	62.56
(1,149)	1:A:64:ASP:N	1:A:64:ASP:CA	1:A:64:ASP:C	1:A:65:LYS:N	1	62.4
(1,117)	1:A:30:THR:N	1:A:30:THR:CA	1:A:30:THR:C	1:A:31:TYR:N	1	62.23
(1,106)	1:A:15:MET:N	1:A:15:MET:CA	1:A:15:MET:C	1:A:16:LYS:N	4	62.18
(1,133)	1:A:51:VAL:N	1:A:51:VAL:CA	1:A:51:VAL:C	1:A:52:LYS:N	6	62.01
(1,133)	1:A:51:VAL:N	1:A:51:VAL:CA	1:A:51:VAL:C	1:A:52:LYS:N	8	61.96
(1,106)	1:A:15:MET:N	1:A:15:MET:CA	1:A:15:MET:C	1:A:16:LYS:N	1	61.87
(1,106)	1:A:15:MET:N	1:A:15:MET:CA	1:A:15:MET:C	1:A:16:LYS:N	8	61.51
(1,25)	1:A:26:MET:C	1:A:27:THR:N	1:A:27:THR:CA	1:A:27:THR:C	3	61.21
(1,131)	1:A:48:VAL:N	1:A:48:VAL:CA	1:A:48:VAL:C	1:A:49:GLU:N	6	61.11
(1,149)	1:A:64:ASP:N	1:A:64:ASP:CA	1:A:64:ASP:C	1:A:65:LYS:N	10	61.03
(1,22)	1:A:22:SER:C	1:A:23:ARG:N	1:A:23:ARG:CA	1:A:23:ARG:C	1	60.9
(1,96)	1:A:84:LEU:C	1:A:85:GLU:N	1:A:85:GLU:CA	1:A:85:GLU:C	5	60.7
(1,100)	1:A:5:SER:N	1:A:5:SER:CA	1:A:5:SER:C	1:A:6:ILE:N	2	60.42
(1,95)	1:A:83:GLU:C	1:A:84:LEU:N	1:A:84:LEU:CA	1:A:84:LEU:C	2	60.28
(1,131)	1:A:48:VAL:N	1:A:48:VAL:CA	1:A:48:VAL:C	1:A:49:GLU:N	8	59.87
(1,139)	1:A:56:HIS:N	1:A:56:HIS:CA	1:A:56:HIS:C	1:A:57:VAL:N	6	59.77
(1,115)	1:A:29:ASP:N	1:A:29:ASP:CA	1:A:29:ASP:C	1:A:30:THR:N	5	59.66
(1,145)	1:A:61:ILE:N	1:A:61:ILE:CA	1:A:61:ILE:C	1:A:62:SER:N	2	59.64
(1,139)	1:A:56:HIS:N	1:A:56:HIS:CA	1:A:56:HIS:C	1:A:57:VAL:N	3	59.62
(1,142)	1:A:59:ASP:C	1:A:60:PHE:N	1:A:60:PHE:CA	1:A:60:PHE:C	3	59.53
(1,149)	1:A:64:ASP:N	1:A:64:ASP:CA	1:A:64:ASP:C	1:A:65:LYS:N	8	59.37
(1,139)	1:A:56:HIS:N	1:A:56:HIS:CA	1:A:56:HIS:C	1:A:57:VAL:N	10	59.22
(1,100)	1:A:5:SER:N	1:A:5:SER:CA	1:A:5:SER:C	1:A:6:ILE:N	8	59.17
(1,62)	1:A:57:VAL:C	1:A:58:MET:N	1:A:58:MET:CA	1:A:58:MET:C	2	58.97
(1,97)	1:A:1:MET:C	1:A:2:LYS:N	1:A:2:LYS:CA	1:A:2:LYS:C	5	58.79
(1,62)	1:A:57:VAL:C	1:A:58:MET:N	1:A:58:MET:CA	1:A:58:MET:C	5	58.73
(1,112)	1:A:18:THR:N	1:A:18:THR:CA	1:A:18:THR:C	1:A:19:LEU:N	7	58.72
(1,139)	1:A:56:HIS:N	1:A:56:HIS:CA	1:A:56:HIS:C	1:A:57:VAL:N	1	58.32
(1,139)	1:A:56:HIS:N	1:A:56:HIS:CA	1:A:56:HIS:C	1:A:57:VAL:N	5	57.92
(1,143)	1:A:60:PHE:N	1:A:60:PHE:CA	1:A:60:PHE:C	1:A:61:ILE:N	8	57.81
(1,136)	1:A:54:ILE:C	1:A:55:PHE:N	1:A:55:PHE:CA	1:A:55:PHE:C	5	57.51
(1,131)	1:A:48:VAL:N	1:A:48:VAL:CA	1:A:48:VAL:C	1:A:49:GLU:N	2	57.3
(1,151)	1:A:66:GLU:N	1:A:66:GLU:CA	1:A:66:GLU:C	1:A:67:ASN:N	2	56.94
(1,142)	1:A:59:ASP:C	1:A:60:PHE:N	1:A:60:PHE:CA	1:A:60:PHE:C	10	56.78

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	Violation ( ° )
(1,100)	1:A:5:SER:N	1:A:5:SER:CA	1:A:5:SER:C	1:A:6:ILE:N	10	56.58
(1,139)	1:A:56:HIS:N	1:A:56:HIS:CA	1:A:56:HIS:C	1:A:57:VAL:N	4	56.07
(1,139)	1:A:56:HIS:N	1:A:56:HIS:CA	1:A:56:HIS:C	1:A:57:VAL:N	7	56.07
(1,62)	1:A:57:VAL:C	1:A:58:MET:N	1:A:58:MET:CA	1:A:58:MET:C	1	56.0
(1,117)	1:A:30:THR:N	1:A:30:THR:CA	1:A:30:THR:C	1:A:31:TYR:N	3	55.92
(1,112)	1:A:18:THR:N	1:A:18:THR:CA	1:A:18:THR:C	1:A:19:LEU:N	5	55.84
(1,131)	1:A:48:VAL:N	1:A:48:VAL:CA	1:A:48:VAL:C	1:A:49:GLU:N	7	55.67
(1,131)	1:A:48:VAL:N	1:A:48:VAL:CA	1:A:48:VAL:C	1:A:49:GLU:N	5	55.61
(1,117)	1:A:30:THR:N	1:A:30:THR:CA	1:A:30:THR:C	1:A:31:TYR:N	8	55.1
(1,149)	1:A:64:ASP:N	1:A:64:ASP:CA	1:A:64:ASP:C	1:A:65:LYS:N	5	54.53
(1,62)	1:A:57:VAL:C	1:A:58:MET:N	1:A:58:MET:CA	1:A:58:MET:C	3	53.96
(1,62)	1:A:57:VAL:C	1:A:58:MET:N	1:A:58:MET:CA	1:A:58:MET:C	6	53.78
(1,97)	1:A:1:MET:C	1:A:2:LYS:N	1:A:2:LYS:CA	1:A:2:LYS:C	3	53.73
(1,23)	1:A:23:ARG:C	1:A:24:GLU:N	1:A:24:GLU:CA	1:A:24:GLU:C	3	53.69
(1,104)	1:A:14:THR:N	1:A:14:THR:CA	1:A:14:THR:C	1:A:15:MET:N	9	53.52
(1,131)	1:A:48:VAL:N	1:A:48:VAL:CA	1:A:48:VAL:C	1:A:49:GLU:N	1	53.07
(1,112)	1:A:18:THR:N	1:A:18:THR:CA	1:A:18:THR:C	1:A:19:LEU:N	9	52.84
(1,101)	1:A:5:SER:C	1:A:6:ILE:N	1:A:6:ILE:CA	1:A:6:ILE:C	4	52.8
(1,142)	1:A:59:ASP:C	1:A:60:PHE:N	1:A:60:PHE:CA	1:A:60:PHE:C	5	52.39
(1,100)	1:A:5:SER:N	1:A:5:SER:CA	1:A:5:SER:C	1:A:6:ILE:N	7	51.82
(1,96)	1:A:84:LEU:C	1:A:85:GLU:N	1:A:85:GLU:CA	1:A:85:GLU:C	9	51.72
(1,131)	1:A:48:VAL:N	1:A:48:VAL:CA	1:A:48:VAL:C	1:A:49:GLU:N	4	51.26
(1,106)	1:A:15:MET:N	1:A:15:MET:CA	1:A:15:MET:C	1:A:16:LYS:N	2	51.12
(1,25)	1:A:26:MET:C	1:A:27:THR:N	1:A:27:THR:CA	1:A:27:THR:C	7	51.1
(1,112)	1:A:18:THR:N	1:A:18:THR:CA	1:A:18:THR:C	1:A:19:LEU:N	3	50.92
(1,151)	1:A:66:GLU:N	1:A:66:GLU:CA	1:A:66:GLU:C	1:A:67:ASN:N	1	50.81
(1,112)	1:A:18:THR:N	1:A:18:THR:CA	1:A:18:THR:C	1:A:19:LEU:N	1	50.28
(1,140)	1:A:56:HIS:C	1:A:57:VAL:N	1:A:57:VAL:CA	1:A:57:VAL:C	10	50.0
(1,104)	1:A:14:THR:N	1:A:14:THR:CA	1:A:14:THR:C	1:A:15:MET:N	7	49.97
(1,140)	1:A:56:HIS:C	1:A:57:VAL:N	1:A:57:VAL:CA	1:A:57:VAL:C	8	49.82
(1,62)	1:A:57:VAL:C	1:A:58:MET:N	1:A:58:MET:CA	1:A:58:MET:C	7	49.72
(1,151)	1:A:66:GLU:N	1:A:66:GLU:CA	1:A:66:GLU:C	1:A:67:ASN:N	9	49.43
(1,140)	1:A:56:HIS:C	1:A:57:VAL:N	1:A:57:VAL:CA	1:A:57:VAL:C	7	49.37
(1,136)	1:A:54:ILE:C	1:A:55:PHE:N	1:A:55:PHE:CA	1:A:55:PHE:C	7	49.07
(1,97)	1:A:1:MET:C	1:A:2:LYS:N	1:A:2:LYS:CA	1:A:2:LYS:C	8	48.98
(1,140)	1:A:56:HIS:C	1:A:57:VAL:N	1:A:57:VAL:CA	1:A:57:VAL:C	4	48.96
(1,151)	1:A:66:GLU:N	1:A:66:GLU:CA	1:A:66:GLU:C	1:A:67:ASN:N	4	48.91
(1,117)	1:A:30:THR:N	1:A:30:THR:CA	1:A:30:THR:C	1:A:31:TYR:N	7	48.55
(1,117)	1:A:30:THR:N	1:A:30:THR:CA	1:A:30:THR:C	1:A:31:TYR:N	9	48.42
(1,140)	1:A:56:HIS:C	1:A:57:VAL:N	1:A:57:VAL:CA	1:A:57:VAL:C	5	48.27
(1,140)	1:A:56:HIS:C	1:A:57:VAL:N	1:A:57:VAL:CA	1:A:57:VAL:C	3	47.92
(1,140)	1:A:56:HIS:C	1:A:57:VAL:N	1:A:57:VAL:CA	1:A:57:VAL:C	6	47.79
(1,131)	1:A:48:VAL:N	1:A:48:VAL:CA	1:A:48:VAL:C	1:A:49:GLU:N	10	47.75
(1,114)	1:A:22:SER:N	1:A:22:SER:CA	1:A:22:SER:C	1:A:23:ARG:N	3	47.7
(1,104)	1:A:14:THR:N	1:A:14:THR:CA	1:A:14:THR:C	1:A:15:MET:N	1	47.7
(1,108)	1:A:16:LYS:N	1:A:16:LYS:CA	1:A:16:LYS:C	1:A:17:ILE:N	1	47.44
(1,136)	1:A:54:ILE:C	1:A:55:PHE:N	1:A:55:PHE:CA	1:A:55:PHE:C	3	47.31
(1,104)	1:A:14:THR:N	1:A:14:THR:CA	1:A:14:THR:C	1:A:15:MET:N	3	47.3
(1,112)	1:A:18:THR:N	1:A:18:THR:CA	1:A:18:THR:C	1:A:19:LEU:N	4	46.85
(1,140)	1:A:56:HIS:C	1:A:57:VAL:N	1:A:57:VAL:CA	1:A:57:VAL:C	1	46.7
(1,112)	1:A:18:THR:N	1:A:18:THR:CA	1:A:18:THR:C	1:A:19:LEU:N	2	46.59

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	Violation ( ° )
(1,140)	1:A:56:HIS:C	1:A:57:VAL:N	1:A:57:VAL:CA	1:A:57:VAL:C	9	46.51
(1,136)	1:A:54:ILE:C	1:A:55:PHE:N	1:A:55:PHE:CA	1:A:55:PHE:C	10	46.28
(1,104)	1:A:14:THR:N	1:A:14:THR:CA	1:A:14:THR:C	1:A:15:MET:N	8	46.24
(1,151)	1:A:66:GLU:N	1:A:66:GLU:CA	1:A:66:GLU:C	1:A:67:ASN:N	5	46.21
(1,104)	1:A:14:THR:N	1:A:14:THR:CA	1:A:14:THR:C	1:A:15:MET:N	2	46.07
(1,131)	1:A:48:VAL:N	1:A:48:VAL:CA	1:A:48:VAL:C	1:A:49:GLU:N	9	46.06
(1,136)	1:A:54:ILE:C	1:A:55:PHE:N	1:A:55:PHE:CA	1:A:55:PHE:C	1	45.88
(1,136)	1:A:54:ILE:C	1:A:55:PHE:N	1:A:55:PHE:CA	1:A:55:PHE:C	4	45.81
(1,140)	1:A:56:HIS:C	1:A:57:VAL:N	1:A:57:VAL:CA	1:A:57:VAL:C	2	45.74
(1,146)	1:A:62:SER:C	1:A:63:VAL:N	1:A:63:VAL:CA	1:A:63:VAL:C	2	45.69
(1,104)	1:A:14:THR:N	1:A:14:THR:CA	1:A:14:THR:C	1:A:15:MET:N	10	45.13
(1,136)	1:A:54:ILE:C	1:A:55:PHE:N	1:A:55:PHE:CA	1:A:55:PHE:C	2	45.02
(1,136)	1:A:54:ILE:C	1:A:55:PHE:N	1:A:55:PHE:CA	1:A:55:PHE:C	6	45.01
(1,117)	1:A:30:THR:N	1:A:30:THR:CA	1:A:30:THR:C	1:A:31:TYR:N	10	44.87
(1,104)	1:A:14:THR:N	1:A:14:THR:CA	1:A:14:THR:C	1:A:15:MET:N	4	44.72
(1,104)	1:A:14:THR:N	1:A:14:THR:CA	1:A:14:THR:C	1:A:15:MET:N	5	44.54
(1,108)	1:A:16:LYS:N	1:A:16:LYS:CA	1:A:16:LYS:C	1:A:17:ILE:N	2	44.49
(1,136)	1:A:54:ILE:C	1:A:55:PHE:N	1:A:55:PHE:CA	1:A:55:PHE:C	8	44.0
(1,146)	1:A:62:SER:C	1:A:63:VAL:N	1:A:63:VAL:CA	1:A:63:VAL:C	1	43.41
(1,136)	1:A:54:ILE:C	1:A:55:PHE:N	1:A:55:PHE:CA	1:A:55:PHE:C	9	43.36
(1,112)	1:A:18:THR:N	1:A:18:THR:CA	1:A:18:THR:C	1:A:19:LEU:N	8	43.31
(1,95)	1:A:83:GLU:C	1:A:84:LEU:N	1:A:84:LEU:CA	1:A:84:LEU:C	10	42.47
(1,117)	1:A:30:THR:N	1:A:30:THR:CA	1:A:30:THR:C	1:A:31:TYR:N	2	42.19
(1,97)	1:A:1:MET:C	1:A:2:LYS:N	1:A:2:LYS:CA	1:A:2:LYS:C	9	42.18
(1,99)	1:A:4:ILE:C	1:A:5:SER:N	1:A:5:SER:CA	1:A:5:SER:C	10	41.98
(1,146)	1:A:62:SER:C	1:A:63:VAL:N	1:A:63:VAL:CA	1:A:63:VAL:C	9	41.75
(1,146)	1:A:62:SER:C	1:A:63:VAL:N	1:A:63:VAL:CA	1:A:63:VAL:C	4	41.3
(1,149)	1:A:64:ASP:N	1:A:64:ASP:CA	1:A:64:ASP:C	1:A:65:LYS:N	9	41.11
(1,146)	1:A:62:SER:C	1:A:63:VAL:N	1:A:63:VAL:CA	1:A:63:VAL:C	3	41.05
(1,108)	1:A:16:LYS:N	1:A:16:LYS:CA	1:A:16:LYS:C	1:A:17:ILE:N	4	40.95
(1,108)	1:A:16:LYS:N	1:A:16:LYS:CA	1:A:16:LYS:C	1:A:17:ILE:N	9	40.53
(1,146)	1:A:62:SER:C	1:A:63:VAL:N	1:A:63:VAL:CA	1:A:63:VAL:C	10	39.97
(1,146)	1:A:62:SER:C	1:A:63:VAL:N	1:A:63:VAL:CA	1:A:63:VAL:C	7	39.83
(1,131)	1:A:48:VAL:N	1:A:48:VAL:CA	1:A:48:VAL:C	1:A:49:GLU:N	3	39.78
(1,106)	1:A:15:MET:N	1:A:15:MET:CA	1:A:15:MET:C	1:A:16:LYS:N	5	39.6
(1,146)	1:A:62:SER:C	1:A:63:VAL:N	1:A:63:VAL:CA	1:A:63:VAL:C	6	39.41
(1,70)	1:A:63:VAL:C	1:A:64:ASP:N	1:A:64:ASP:CA	1:A:64:ASP:C	10	39.1
(1,146)	1:A:62:SER:C	1:A:63:VAL:N	1:A:63:VAL:CA	1:A:63:VAL:C	8	39.05
(1,142)	1:A:59:ASP:C	1:A:60:PHE:N	1:A:60:PHE:CA	1:A:60:PHE:C	1	38.75
(1,146)	1:A:62:SER:C	1:A:63:VAL:N	1:A:63:VAL:CA	1:A:63:VAL:C	5	38.58
(1,102)	1:A:6:ILE:N	1:A:6:ILE:CA	1:A:6:ILE:C	1:A:7:SER:N	4	38.48
(1,112)	1:A:18:THR:N	1:A:18:THR:CA	1:A:18:THR:C	1:A:19:LEU:N	6	38.01
(1,178)	1:A:86:HIS:N	1:A:86:HIS:CA	1:A:86:HIS:C	1:A:87:HIS:N	9	37.68
(1,108)	1:A:16:LYS:N	1:A:16:LYS:CA	1:A:16:LYS:C	1:A:17:ILE:N	3	37.06
(1,70)	1:A:63:VAL:C	1:A:64:ASP:N	1:A:64:ASP:CA	1:A:64:ASP:C	1	36.19
(1,70)	1:A:63:VAL:C	1:A:64:ASP:N	1:A:64:ASP:CA	1:A:64:ASP:C	2	35.26
(1,142)	1:A:59:ASP:C	1:A:60:PHE:N	1:A:60:PHE:CA	1:A:60:PHE:C	4	35.13
(1,142)	1:A:59:ASP:C	1:A:60:PHE:N	1:A:60:PHE:CA	1:A:60:PHE:C	2	35.05
(1,108)	1:A:16:LYS:N	1:A:16:LYS:CA	1:A:16:LYS:C	1:A:17:ILE:N	5	34.48
(1,97)	1:A:1:MET:C	1:A:2:LYS:N	1:A:2:LYS:CA	1:A:2:LYS:C	7	34.33
(1,70)	1:A:63:VAL:C	1:A:64:ASP:N	1:A:64:ASP:CA	1:A:64:ASP:C	5	34.29

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	Violation ( ° )
(1,147)	1:A:63:VAL:N	1:A:63:VAL:CA	1:A:63:VAL:C	1:A:64:ASP:N	9	34.06
(1,108)	1:A:16:LYS:N	1:A:16:LYS:CA	1:A:16:LYS:C	1:A:17:ILE:N	7	33.53
(1,147)	1:A:63:VAL:N	1:A:63:VAL:CA	1:A:63:VAL:C	1:A:64:ASP:N	3	33.49
(1,142)	1:A:59:ASP:C	1:A:60:PHE:N	1:A:60:PHE:CA	1:A:60:PHE:C	7	33.39
(1,97)	1:A:1:MET:C	1:A:2:LYS:N	1:A:2:LYS:CA	1:A:2:LYS:C	2	33.24
(1,97)	1:A:1:MET:C	1:A:2:LYS:N	1:A:2:LYS:CA	1:A:2:LYS:C	6	33.2
(1,142)	1:A:59:ASP:C	1:A:60:PHE:N	1:A:60:PHE:CA	1:A:60:PHE:C	8	33.05
(1,97)	1:A:1:MET:C	1:A:2:LYS:N	1:A:2:LYS:CA	1:A:2:LYS:C	10	32.33
(1,147)	1:A:63:VAL:N	1:A:63:VAL:CA	1:A:63:VAL:C	1:A:64:ASP:N	2	32.29
(1,70)	1:A:63:VAL:C	1:A:64:ASP:N	1:A:64:ASP:CA	1:A:64:ASP:C	6	32.28
(1,108)	1:A:16:LYS:N	1:A:16:LYS:CA	1:A:16:LYS:C	1:A:17:ILE:N	8	31.55
(1,142)	1:A:59:ASP:C	1:A:60:PHE:N	1:A:60:PHE:CA	1:A:60:PHE:C	6	31.26
(1,147)	1:A:63:VAL:N	1:A:63:VAL:CA	1:A:63:VAL:C	1:A:64:ASP:N	1	31.13
(1,70)	1:A:63:VAL:C	1:A:64:ASP:N	1:A:64:ASP:CA	1:A:64:ASP:C	9	30.71
(1,25)	1:A:26:MET:C	1:A:27:THR:N	1:A:27:THR:CA	1:A:27:THR:C	8	30.45
(1,95)	1:A:83:GLU:C	1:A:84:LEU:N	1:A:84:LEU:CA	1:A:84:LEU:C	8	29.69
(1,142)	1:A:59:ASP:C	1:A:60:PHE:N	1:A:60:PHE:CA	1:A:60:PHE:C	9	29.68
(1,70)	1:A:63:VAL:C	1:A:64:ASP:N	1:A:64:ASP:CA	1:A:64:ASP:C	4	29.04
(1,110)	1:A:17:ILE:N	1:A:17:ILE:CA	1:A:17:ILE:C	1:A:18:THR:N	5	28.58
(1,147)	1:A:63:VAL:N	1:A:63:VAL:CA	1:A:63:VAL:C	1:A:64:ASP:N	10	28.1
(1,50)	1:A:48:VAL:C	1:A:49:GLU:N	1:A:49:GLU:CA	1:A:49:GLU:C	3	28.08
(1,70)	1:A:63:VAL:C	1:A:64:ASP:N	1:A:64:ASP:CA	1:A:64:ASP:C	3	27.86
(1,147)	1:A:63:VAL:N	1:A:63:VAL:CA	1:A:63:VAL:C	1:A:64:ASP:N	5	26.25
(1,147)	1:A:63:VAL:N	1:A:63:VAL:CA	1:A:63:VAL:C	1:A:64:ASP:N	4	26.24
(1,70)	1:A:63:VAL:C	1:A:64:ASP:N	1:A:64:ASP:CA	1:A:64:ASP:C	8	26.13
(1,27)	1:A:28:SER:C	1:A:29:ASP:N	1:A:29:ASP:CA	1:A:29:ASP:C	2	25.99
(1,147)	1:A:63:VAL:N	1:A:63:VAL:CA	1:A:63:VAL:C	1:A:64:ASP:N	6	25.68
(1,110)	1:A:17:ILE:N	1:A:17:ILE:CA	1:A:17:ILE:C	1:A:18:THR:N	1	25.52
(1,50)	1:A:48:VAL:C	1:A:49:GLU:N	1:A:49:GLU:CA	1:A:49:GLU:C	8	25.04
(1,137)	1:A:55:PHE:N	1:A:55:PHE:CA	1:A:55:PHE:C	1:A:56:HIS:N	9	24.74
(1,110)	1:A:17:ILE:N	1:A:17:ILE:CA	1:A:17:ILE:C	1:A:18:THR:N	3	24.59
(1,110)	1:A:17:ILE:N	1:A:17:ILE:CA	1:A:17:ILE:C	1:A:18:THR:N	8	24.27
(1,110)	1:A:17:ILE:N	1:A:17:ILE:CA	1:A:17:ILE:C	1:A:18:THR:N	9	24.23
(1,147)	1:A:63:VAL:N	1:A:63:VAL:CA	1:A:63:VAL:C	1:A:64:ASP:N	7	23.93
(1,27)	1:A:28:SER:C	1:A:29:ASP:N	1:A:29:ASP:CA	1:A:29:ASP:C	9	23.91
(1,50)	1:A:48:VAL:C	1:A:49:GLU:N	1:A:49:GLU:CA	1:A:49:GLU:C	6	23.86
(1,50)	1:A:48:VAL:C	1:A:49:GLU:N	1:A:49:GLU:CA	1:A:49:GLU:C	4	23.81
(1,27)	1:A:28:SER:C	1:A:29:ASP:N	1:A:29:ASP:CA	1:A:29:ASP:C	5	23.57
(1,50)	1:A:48:VAL:C	1:A:49:GLU:N	1:A:49:GLU:CA	1:A:49:GLU:C	10	23.38
(1,137)	1:A:55:PHE:N	1:A:55:PHE:CA	1:A:55:PHE:C	1:A:56:HIS:N	3	23.31
(1,50)	1:A:48:VAL:C	1:A:49:GLU:N	1:A:49:GLU:CA	1:A:49:GLU:C	1	23.27
(1,27)	1:A:28:SER:C	1:A:29:ASP:N	1:A:29:ASP:CA	1:A:29:ASP:C	3	23.23
(1,27)	1:A:28:SER:C	1:A:29:ASP:N	1:A:29:ASP:CA	1:A:29:ASP:C	7	22.62
(1,50)	1:A:48:VAL:C	1:A:49:GLU:N	1:A:49:GLU:CA	1:A:49:GLU:C	9	22.55
(1,50)	1:A:48:VAL:C	1:A:49:GLU:N	1:A:49:GLU:CA	1:A:49:GLU:C	2	22.38
(1,50)	1:A:48:VAL:C	1:A:49:GLU:N	1:A:49:GLU:CA	1:A:49:GLU:C	5	22.01
(1,92)	1:A:80:ALA:C	1:A:81:VAL:N	1:A:81:VAL:CA	1:A:81:VAL:C	10	21.77
(1,96)	1:A:84:LEU:C	1:A:85:GLU:N	1:A:85:GLU:CA	1:A:85:GLU:C	1	21.68
(1,23)	1:A:23:ARG:C	1:A:24:GLU:N	1:A:24:GLU:CA	1:A:24:GLU:C	6	21.47
(1,102)	1:A:6:ILE:N	1:A:6:ILE:CA	1:A:6:ILE:C	1:A:7:SER:N	5	21.38
(1,27)	1:A:28:SER:C	1:A:29:ASP:N	1:A:29:ASP:CA	1:A:29:ASP:C	6	21.3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	Violation ( ° )
(1,50)	1:A:48:VAL:C	1:A:49:GLU:N	1:A:49:GLU:CA	1:A:49:GLU:C	7	20.51
(1,95)	1:A:83:GLU:C	1:A:84:LEU:N	1:A:84:LEU:CA	1:A:84:LEU:C	5	20.31
(1,137)	1:A:55:PHE:N	1:A:55:PHE:CA	1:A:55:PHE:C	1:A:56:HIS:N	5	20.27
(1,147)	1:A:63:VAL:N	1:A:63:VAL:CA	1:A:63:VAL:C	1:A:64:ASP:N	8	19.78
(1,70)	1:A:63:VAL:C	1:A:64:ASP:N	1:A:64:ASP:CA	1:A:64:ASP:C	7	19.43
(1,25)	1:A:26:MET:C	1:A:27:THR:N	1:A:27:THR:CA	1:A:27:THR:C	10	19.18
(1,27)	1:A:28:SER:C	1:A:29:ASP:N	1:A:29:ASP:CA	1:A:29:ASP:C	8	18.86
(1,53)	1:A:52:LYS:C	1:A:53:SER:N	1:A:53:SER:CA	1:A:53:SER:C	6	18.81
(1,92)	1:A:80:ALA:C	1:A:81:VAL:N	1:A:81:VAL:CA	1:A:81:VAL:C	1	18.26
(1,137)	1:A:55:PHE:N	1:A:55:PHE:CA	1:A:55:PHE:C	1:A:56:HIS:N	6	18.06
(1,92)	1:A:80:ALA:C	1:A:81:VAL:N	1:A:81:VAL:CA	1:A:81:VAL:C	4	18.05
(1,27)	1:A:28:SER:C	1:A:29:ASP:N	1:A:29:ASP:CA	1:A:29:ASP:C	4	17.72
(1,110)	1:A:17:ILE:N	1:A:17:ILE:CA	1:A:17:ILE:C	1:A:18:THR:N	2	17.64
(1,98)	1:A:2:LYS:N	1:A:2:LYS:CA	1:A:2:LYS:C	1:A:3:ILE:N	1	17.58
(1,137)	1:A:55:PHE:N	1:A:55:PHE:CA	1:A:55:PHE:C	1:A:56:HIS:N	2	17.19
(1,27)	1:A:28:SER:C	1:A:29:ASP:N	1:A:29:ASP:CA	1:A:29:ASP:C	1	17.18
(1,97)	1:A:1:MET:C	1:A:2:LYS:N	1:A:2:LYS:CA	1:A:2:LYS:C	1	17.17
(1,92)	1:A:80:ALA:C	1:A:81:VAL:N	1:A:81:VAL:CA	1:A:81:VAL:C	6	17.16
(1,25)	1:A:26:MET:C	1:A:27:THR:N	1:A:27:THR:CA	1:A:27:THR:C	4	17.02
(1,25)	1:A:26:MET:C	1:A:27:THR:N	1:A:27:THR:CA	1:A:27:THR:C	9	16.87
(1,137)	1:A:55:PHE:N	1:A:55:PHE:CA	1:A:55:PHE:C	1:A:56:HIS:N	4	16.62
(1,110)	1:A:17:ILE:N	1:A:17:ILE:CA	1:A:17:ILE:C	1:A:18:THR:N	4	16.4
(1,27)	1:A:28:SER:C	1:A:29:ASP:N	1:A:29:ASP:CA	1:A:29:ASP:C	10	16.35
(1,110)	1:A:17:ILE:N	1:A:17:ILE:CA	1:A:17:ILE:C	1:A:18:THR:N	6	16.24
(1,137)	1:A:55:PHE:N	1:A:55:PHE:CA	1:A:55:PHE:C	1:A:56:HIS:N	7	16.23
(1,92)	1:A:80:ALA:C	1:A:81:VAL:N	1:A:81:VAL:CA	1:A:81:VAL:C	5	16.15
(1,92)	1:A:80:ALA:C	1:A:81:VAL:N	1:A:81:VAL:CA	1:A:81:VAL:C	8	16.11
(1,137)	1:A:55:PHE:N	1:A:55:PHE:CA	1:A:55:PHE:C	1:A:56:HIS:N	10	16.0
(1,114)	1:A:22:SER:N	1:A:22:SER:CA	1:A:22:SER:C	1:A:23:ARG:N	5	15.87
(1,95)	1:A:83:GLU:C	1:A:84:LEU:N	1:A:84:LEU:CA	1:A:84:LEU:C	1	15.83
(1,95)	1:A:83:GLU:C	1:A:84:LEU:N	1:A:84:LEU:CA	1:A:84:LEU:C	4	15.75
(1,92)	1:A:80:ALA:C	1:A:81:VAL:N	1:A:81:VAL:CA	1:A:81:VAL:C	7	15.33
(1,137)	1:A:55:PHE:N	1:A:55:PHE:CA	1:A:55:PHE:C	1:A:56:HIS:N	1	15.07
(1,137)	1:A:55:PHE:N	1:A:55:PHE:CA	1:A:55:PHE:C	1:A:56:HIS:N	8	15.04
(1,92)	1:A:80:ALA:C	1:A:81:VAL:N	1:A:81:VAL:CA	1:A:81:VAL:C	3	14.6
(1,92)	1:A:80:ALA:C	1:A:81:VAL:N	1:A:81:VAL:CA	1:A:81:VAL:C	9	14.45
(1,97)	1:A:1:MET:C	1:A:2:LYS:N	1:A:2:LYS:CA	1:A:2:LYS:C	4	14.29
(1,3)	1:A:4:ILE:C	1:A:5:SER:N	1:A:5:SER:CA	1:A:5:SER:C	8	14.06
(1,92)	1:A:80:ALA:C	1:A:81:VAL:N	1:A:81:VAL:CA	1:A:81:VAL:C	2	13.62
(1,53)	1:A:52:LYS:C	1:A:53:SER:N	1:A:53:SER:CA	1:A:53:SER:C	2	13.62
(1,23)	1:A:23:ARG:C	1:A:24:GLU:N	1:A:24:GLU:CA	1:A:24:GLU:C	4	13.53
(1,110)	1:A:17:ILE:N	1:A:17:ILE:CA	1:A:17:ILE:C	1:A:18:THR:N	7	12.6
(1,3)	1:A:4:ILE:C	1:A:5:SER:N	1:A:5:SER:CA	1:A:5:SER:C	2	12.38
(1,38)	1:A:40:ALA:C	1:A:41:PHE:N	1:A:41:PHE:CA	1:A:41:PHE:C	4	12.31
(1,3)	1:A:4:ILE:C	1:A:5:SER:N	1:A:5:SER:CA	1:A:5:SER:C	4	12.12
(1,3)	1:A:4:ILE:C	1:A:5:SER:N	1:A:5:SER:CA	1:A:5:SER:C	7	11.93
(1,22)	1:A:22:SER:C	1:A:23:ARG:N	1:A:23:ARG:CA	1:A:23:ARG:C	4	11.92
(1,98)	1:A:2:LYS:N	1:A:2:LYS:CA	1:A:2:LYS:C	1:A:3:ILE:N	7	11.66
(1,19)	1:A:19:LEU:C	1:A:20:SER:N	1:A:20:SER:CA	1:A:20:SER:C	2	11.65
(1,22)	1:A:22:SER:C	1:A:23:ARG:N	1:A:23:ARG:CA	1:A:23:ARG:C	10	11.4
(1,38)	1:A:40:ALA:C	1:A:41:PHE:N	1:A:41:PHE:CA	1:A:41:PHE:C	8	11.21

Continued on next page...



Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	Violation ( ° )
(1,19)	1:A:19:LEU:C	1:A:20:SER:N	1:A:20:SER:CA	1:A:20:SER:C	8	11.09
(1,38)	1:A:40:ALA:C	1:A:41:PHE:N	1:A:41:PHE:CA	1:A:41:PHE:C	7	10.87
(1,38)	1:A:40:ALA:C	1:A:41:PHE:N	1:A:41:PHE:CA	1:A:41:PHE:C	1	10.79
(1,38)	1:A:40:ALA:C	1:A:41:PHE:N	1:A:41:PHE:CA	1:A:41:PHE:C	3	10.72
(1,38)	1:A:40:ALA:C	1:A:41:PHE:N	1:A:41:PHE:CA	1:A:41:PHE:C	6	10.51
(1,53)	1:A:52:LYS:C	1:A:53:SER:N	1:A:53:SER:CA	1:A:53:SER:C	1	10.02
(1,3)	1:A:4:ILE:C	1:A:5:SER:N	1:A:5:SER:CA	1:A:5:SER:C	5	10.01
(1,38)	1:A:40:ALA:C	1:A:41:PHE:N	1:A:41:PHE:CA	1:A:41:PHE:C	9	9.84
(1,19)	1:A:19:LEU:C	1:A:20:SER:N	1:A:20:SER:CA	1:A:20:SER:C	3	9.82
(1,38)	1:A:40:ALA:C	1:A:41:PHE:N	1:A:41:PHE:CA	1:A:41:PHE:C	2	9.8
(1,38)	1:A:40:ALA:C	1:A:41:PHE:N	1:A:41:PHE:CA	1:A:41:PHE:C	10	9.67
(1,38)	1:A:40:ALA:C	1:A:41:PHE:N	1:A:41:PHE:CA	1:A:41:PHE:C	5	9.25
(1,3)	1:A:4:ILE:C	1:A:5:SER:N	1:A:5:SER:CA	1:A:5:SER:C	9	8.92
(1,3)	1:A:4:ILE:C	1:A:5:SER:N	1:A:5:SER:CA	1:A:5:SER:C	3	8.87
(1,3)	1:A:4:ILE:C	1:A:5:SER:N	1:A:5:SER:CA	1:A:5:SER:C	6	7.9
(1,19)	1:A:19:LEU:C	1:A:20:SER:N	1:A:20:SER:CA	1:A:20:SER:C	7	7.73
(1,114)	1:A:22:SER:N	1:A:22:SER:CA	1:A:22:SER:C	1:A:23:ARG:N	4	7.56
(1,19)	1:A:19:LEU:C	1:A:20:SER:N	1:A:20:SER:CA	1:A:20:SER:C	1	7.5
(1,3)	1:A:4:ILE:C	1:A:5:SER:N	1:A:5:SER:CA	1:A:5:SER:C	1	7.41
(1,110)	1:A:17:ILE:N	1:A:17:ILE:CA	1:A:17:ILE:C	1:A:18:THR:N	10	7.4
(1,53)	1:A:52:LYS:C	1:A:53:SER:N	1:A:53:SER:CA	1:A:53:SER:C	3	7.38
(1,53)	1:A:52:LYS:C	1:A:53:SER:N	1:A:53:SER:CA	1:A:53:SER:C	4	7.04
(1,53)	1:A:52:LYS:C	1:A:53:SER:N	1:A:53:SER:CA	1:A:53:SER:C	9	7.03
(1,19)	1:A:19:LEU:C	1:A:20:SER:N	1:A:20:SER:CA	1:A:20:SER:C	4	6.58
(1,19)	1:A:19:LEU:C	1:A:20:SER:N	1:A:20:SER:CA	1:A:20:SER:C	5	6.36
(1,35)	1:A:33:LYS:C	1:A:34:VAL:N	1:A:34:VAL:CA	1:A:34:VAL:C	8	6.27
(1,102)	1:A:6:ILE:N	1:A:6:ILE:CA	1:A:6:ILE:C	1:A:7:SER:N	10	6.14
(1,53)	1:A:52:LYS:C	1:A:53:SER:N	1:A:53:SER:CA	1:A:53:SER:C	5	5.91
(1,19)	1:A:19:LEU:C	1:A:20:SER:N	1:A:20:SER:CA	1:A:20:SER:C	6	5.4
(1,53)	1:A:52:LYS:C	1:A:53:SER:N	1:A:53:SER:CA	1:A:53:SER:C	7	5.38
(1,129)	1:A:46:LEU:N	1:A:46:LEU:CA	1:A:46:LEU:C	1:A:47:LYS:N	3	4.89
(1,19)	1:A:19:LEU:C	1:A:20:SER:N	1:A:20:SER:CA	1:A:20:SER:C	9	4.82
(1,53)	1:A:52:LYS:C	1:A:53:SER:N	1:A:53:SER:CA	1:A:53:SER:C	8	3.57
(1,54)	1:A:53:SER:N	1:A:53:SER:CA	1:A:53:SER:C	1:A:54:ILE:N	2	3.06
(1,22)	1:A:22:SER:C	1:A:23:ARG:N	1:A:23:ARG:CA	1:A:23:ARG:C	6	2.71
(1,129)	1:A:46:LEU:N	1:A:46:LEU:CA	1:A:46:LEU:C	1:A:47:LYS:N	9	2.65
(1,161)	1:A:73:THR:N	1:A:73:THR:CA	1:A:73:THR:C	1:A:74:VAL:N	1	2.63
(1,161)	1:A:73:THR:N	1:A:73:THR:CA	1:A:73:THR:C	1:A:74:VAL:N	6	2.3
(1,163)	1:A:74:VAL:N	1:A:74:VAL:CA	1:A:74:VAL:C	1:A:75:LEU:N	10	2.27
(1,129)	1:A:46:LEU:N	1:A:46:LEU:CA	1:A:46:LEU:C	1:A:47:LYS:N	7	2.27
(1,161)	1:A:73:THR:N	1:A:73:THR:CA	1:A:73:THR:C	1:A:74:VAL:N	5	2.15
(1,159)	1:A:72:GLU:N	1:A:72:GLU:CA	1:A:72:GLU:C	1:A:73:THR:N	9	2.15
(1,174)	1:A:80:ALA:N	1:A:80:ALA:CA	1:A:80:ALA:C	1:A:81:VAL:N	2	2.07
(1,163)	1:A:74:VAL:N	1:A:74:VAL:CA	1:A:74:VAL:C	1:A:75:LEU:N	4	1.97
(1,174)	1:A:80:ALA:N	1:A:80:ALA:CA	1:A:80:ALA:C	1:A:81:VAL:N	9	1.95
(1,164)	1:A:74:VAL:C	1:A:75:LEU:N	1:A:75:LEU:CA	1:A:75:LEU:C	2	1.95
(1,164)	1:A:74:VAL:C	1:A:75:LEU:N	1:A:75:LEU:CA	1:A:75:LEU:C	1	1.89
(1,159)	1:A:72:GLU:N	1:A:72:GLU:CA	1:A:72:GLU:C	1:A:73:THR:N	10	1.88
(1,174)	1:A:80:ALA:N	1:A:80:ALA:CA	1:A:80:ALA:C	1:A:81:VAL:N	6	1.84
(1,163)	1:A:74:VAL:N	1:A:74:VAL:CA	1:A:74:VAL:C	1:A:75:LEU:N	5	1.83
(1,174)	1:A:80:ALA:N	1:A:80:ALA:CA	1:A:80:ALA:C	1:A:81:VAL:N	7	1.8

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	Violation ( ° )
(1,161)	1:A:73:THR:N	1:A:73:THR:CA	1:A:73:THR:C	1:A:74:VAL:N	4	1.76
(1,163)	1:A:74:VAL:N	1:A:74:VAL:CA	1:A:74:VAL:C	1:A:75:LEU:N	1	1.71
(1,174)	1:A:80:ALA:N	1:A:80:ALA:CA	1:A:80:ALA:C	1:A:81:VAL:N	4	1.7
(1,174)	1:A:80:ALA:N	1:A:80:ALA:CA	1:A:80:ALA:C	1:A:81:VAL:N	1	1.66
(1,129)	1:A:46:LEU:N	1:A:46:LEU:CA	1:A:46:LEU:C	1:A:47:LYS:N	10	1.61
(1,159)	1:A:72:GLU:N	1:A:72:GLU:CA	1:A:72:GLU:C	1:A:73:THR:N	2	1.6
(1,174)	1:A:80:ALA:N	1:A:80:ALA:CA	1:A:80:ALA:C	1:A:81:VAL:N	8	1.54
(1,161)	1:A:73:THR:N	1:A:73:THR:CA	1:A:73:THR:C	1:A:74:VAL:N	9	1.53
(1,174)	1:A:80:ALA:N	1:A:80:ALA:CA	1:A:80:ALA:C	1:A:81:VAL:N	5	1.46
(1,159)	1:A:72:GLU:N	1:A:72:GLU:CA	1:A:72:GLU:C	1:A:73:THR:N	4	1.4
(1,164)	1:A:74:VAL:C	1:A:75:LEU:N	1:A:75:LEU:CA	1:A:75:LEU:C	10	1.36
(1,161)	1:A:73:THR:N	1:A:73:THR:CA	1:A:73:THR:C	1:A:74:VAL:N	7	1.33
(1,159)	1:A:72:GLU:N	1:A:72:GLU:CA	1:A:72:GLU:C	1:A:73:THR:N	7	1.33
(1,155)	1:A:68:ASP:N	1:A:68:ASP:CA	1:A:68:ASP:C	1:A:69:ALA:N	3	1.33
(1,168)	1:A:77:LYS:N	1:A:77:LYS:CA	1:A:77:LYS:C	1:A:78:VAL:N	9	1.31
(1,53)	1:A:52:LYS:C	1:A:53:SER:N	1:A:53:SER:CA	1:A:53:SER:C	10	1.29
(1,155)	1:A:68:ASP:N	1:A:68:ASP:CA	1:A:68:ASP:C	1:A:69:ALA:N	2	1.27
(1,164)	1:A:74:VAL:C	1:A:75:LEU:N	1:A:75:LEU:CA	1:A:75:LEU:C	5	1.12
(1,163)	1:A:74:VAL:N	1:A:74:VAL:CA	1:A:74:VAL:C	1:A:75:LEU:N	2	1.12
(1,155)	1:A:68:ASP:N	1:A:68:ASP:CA	1:A:68:ASP:C	1:A:69:ALA:N	1	1.07
(1,155)	1:A:68:ASP:N	1:A:68:ASP:CA	1:A:68:ASP:C	1:A:69:ALA:N	8	1.04
(1,164)	1:A:74:VAL:C	1:A:75:LEU:N	1:A:75:LEU:CA	1:A:75:LEU:C	8	1.0
(1,129)	1:A:46:LEU:N	1:A:46:LEU:CA	1:A:46:LEU:C	1:A:47:LYS:N	6	0.99
(1,164)	1:A:74:VAL:C	1:A:75:LEU:N	1:A:75:LEU:CA	1:A:75:LEU:C	4	0.98
(1,161)	1:A:73:THR:N	1:A:73:THR:CA	1:A:73:THR:C	1:A:74:VAL:N	8	0.98
(1,164)	1:A:74:VAL:C	1:A:75:LEU:N	1:A:75:LEU:CA	1:A:75:LEU:C	6	0.96
(1,161)	1:A:73:THR:N	1:A:73:THR:CA	1:A:73:THR:C	1:A:74:VAL:N	10	0.93
(1,129)	1:A:46:LEU:N	1:A:46:LEU:CA	1:A:46:LEU:C	1:A:47:LYS:N	4	0.91
(1,163)	1:A:74:VAL:N	1:A:74:VAL:CA	1:A:74:VAL:C	1:A:75:LEU:N	8	0.86
(1,159)	1:A:72:GLU:N	1:A:72:GLU:CA	1:A:72:GLU:C	1:A:73:THR:N	1	0.78
(1,159)	1:A:72:GLU:N	1:A:72:GLU:CA	1:A:72:GLU:C	1:A:73:THR:N	6	0.74
(1,163)	1:A:74:VAL:N	1:A:74:VAL:CA	1:A:74:VAL:C	1:A:75:LEU:N	6	0.73
(1,161)	1:A:73:THR:N	1:A:73:THR:CA	1:A:73:THR:C	1:A:74:VAL:N	2	0.67
(1,163)	1:A:74:VAL:N	1:A:74:VAL:CA	1:A:74:VAL:C	1:A:75:LEU:N	9	0.57
(1,161)	1:A:73:THR:N	1:A:73:THR:CA	1:A:73:THR:C	1:A:74:VAL:N	3	0.57
(1,166)	1:A:76:PRO:N	1:A:76:PRO:CA	1:A:76:PRO:C	1:A:77:LYS:N	8	0.56
(1,174)	1:A:80:ALA:N	1:A:80:ALA:CA	1:A:80:ALA:C	1:A:81:VAL:N	3	0.53
(1,163)	1:A:74:VAL:N	1:A:74:VAL:CA	1:A:74:VAL:C	1:A:75:LEU:N	7	0.52
(1,54)	1:A:53:SER:N	1:A:53:SER:CA	1:A:53:SER:C	1:A:54:ILE:N	6	0.51
(1,166)	1:A:76:PRO:N	1:A:76:PRO:CA	1:A:76:PRO:C	1:A:77:LYS:N	5	0.49
(1,129)	1:A:46:LEU:N	1:A:46:LEU:CA	1:A:46:LEU:C	1:A:47:LYS:N	1	0.46
(1,164)	1:A:74:VAL:C	1:A:75:LEU:N	1:A:75:LEU:CA	1:A:75:LEU:C	9	0.39
(1,129)	1:A:46:LEU:N	1:A:46:LEU:CA	1:A:46:LEU:C	1:A:47:LYS:N	2	0.37
(1,168)	1:A:77:LYS:N	1:A:77:LYS:CA	1:A:77:LYS:C	1:A:78:VAL:N	5	0.36
(1,159)	1:A:72:GLU:N	1:A:72:GLU:CA	1:A:72:GLU:C	1:A:73:THR:N	5	0.36
(1,164)	1:A:74:VAL:C	1:A:75:LEU:N	1:A:75:LEU:CA	1:A:75:LEU:C	3	0.28
(1,164)	1:A:74:VAL:C	1:A:75:LEU:N	1:A:75:LEU:CA	1:A:75:LEU:C	7	0.28
(1,168)	1:A:77:LYS:N	1:A:77:LYS:CA	1:A:77:LYS:C	1:A:78:VAL:N	1	0.25
(1,159)	1:A:72:GLU:N	1:A:72:GLU:CA	1:A:72:GLU:C	1:A:73:THR:N	8	0.25
(1,155)	1:A:68:ASP:N	1:A:68:ASP:CA	1:A:68:ASP:C	1:A:69:ALA:N	10	0.16
(1,168)	1:A:77:LYS:N	1:A:77:LYS:CA	1:A:77:LYS:C	1:A:78:VAL:N	7	0.15

Continued on next page...

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	Violation ( ° )
(1,166)	1:A:76:PRO:N	1:A:76:PRO:CA	1:A:76:PRO:C	1:A:77:LYS:N	4	0.15
(1,166)	1:A:76:PRO:N	1:A:76:PRO:CA	1:A:76:PRO:C	1:A:77:LYS:N	3	0.05
(1,163)	1:A:74:VAL:N	1:A:74:VAL:CA	1:A:74:VAL:C	1:A:75:LEU:N	3	0.05